

919190



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

УДК 530.145, УДК 531.19,  
УДК 537.611

К - 89

17-84-751

**КУЗЕМСКИЙ**

**Александр Леонидович**

**МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ  
В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ  
И СПЛАВАХ**

**Специальность: 01.04.02 – теоретическая  
и математическая физика.**

**Автореферат диссертации на соискание ученой  
степени доктора физико-математических наук**

Дубна 1984

Работе выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник

Е.Б.ТАРЕЕВА

доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник

Б.И.САДОВНИКОВ

доктор физико-математических наук,  
профессор

И.П.ПАВЛОЦКИЙ

Ведущая организация:

Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова, Москва

Защита состоится "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 1985 г. на заседании Специализированного совета Д 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской обл.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 1985 г.

Ученый секретарь  
Специализированного совета  
кандидат физико-математических наук

В.И.ЖУРАВЛЕВ

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Проблема последовательного микроскопического описания корреляционных эффектов в квантовых неидеальных ферми-системах является принципиально важной и актуальной задачей современной квантово-статистической теории конденсированного состояния вещества. В значительной степени это обусловлено тем, что в последние годы существенно усилился интерес к изучению магнитных, электронных и сверхпроводящих свойств переходных и редкоземельных металлов, их соединений и разупорядоченных сплавов в связи с разнообразными возможностями практического использования этой обширной группы веществ в современной технике и технологии. Особые свойства переходных металлов, их сплавов и соединений определяются доминирующей ролью  $d$ -электронов. В отличие от простых металлов, где применимо приближение почти свободных электронов, волновые функции  $d$ -электронов сильно локализованы и, как правило, должны описываться в приближении сильной связи.

Богатство и разнообразие физических явлений в указанной группе веществ обуславливается также существенной ролью корреляционных эффектов. Квантово-статистическая теория корреляционных эффектов в связи с исследованием свойств переходных металлов, их сплавов и соединений начала интенсивно развиваться в последние десятилетия, когда удалось сформулировать на языке относительно простых модельных гамильтонианов основные черты ранних полуфеноменологических теорий. основополагающие исследования в этом направлении были выполнены Н.Н.Боголюбовым в его работах, посвященных полярной модели твердого тела, Андерсоном, который предложил микроскопическую модель для разбавленных сплавов, и Хаббардом, который ввел известную корреляционную модель электронов в переходном металле. Все эти модели связаны между собой: модель Андерсона можно рассматривать как локальный вариант модели Хаббарда, а эта последняя является сильно упрощенным вариантом полярной модели (не учитывается дальнее действие). Модельные гамильтонианы Андерсона и Хаббарда изучались в большом числе работ. Однако несмотря на разнообразие методов теории многих тел, применявшихся здесь, задача последовательного микроскопического учета корреляционных эффектов, при описании динамических свойств, до сих пор не получила окончательного и удовлетворительного решения. При последовательном решении этой проблемы возникают серьезные трудности принципиального характера. Необходимо в рамках единого подхода описывать явления, где проявляется локализованный характер  $d$ -электронных состояний, и явления, где

эти электроны ведут себя как коллективизированные, зонные. В системах с сильными межэлектронными корреляциями и сложным характером электронных состояний могут происходить электронные фазовые переходы, для описания которых недостаточны приближение среднего поля и стандартная теория возмущений. В разупорядоченных сплавах необходимо дополнительно учитывать сильное потенциальное рассеяние. В различных конкретных случаях важную роль играют электрон-решеточное взаимодействие, межзонное рассеяние или косвенное РККИ-взаимодействие, определяющие интересные и практически важные явления в соответствующих системах (например, сверхпроводимость).

Широкие экспериментальные исследования магнитных, электронных, тепловых и сверхпроводящих свойств переходных и редкоземельных металлов, их сплавов и соединений, проведенные в последние годы, показали, что изучение динамических свойств модельных гамильтонианов Хаббарда, Андерсона и ряда их обобщений представляет большой интерес. В частности, при изучении неупругого рассеяния медленных нейтронов оказывается весьма существенным учет корреляционных эффектов. Непосредственное исследование с помощью рассеяния нейтронов полного спектра квазичастичных возбуждений в ферромагнитных переходных металлах, в широком интервале значений переданных энергии и импульса, позволяет лучше судить об адекватности тех или иных микроскопических моделей и потому имеет принципиальный интерес для теории твердого тела в целом.

Таким образом, самостоятельный теоретический интерес проблемы состоит в развитии новых квантово-статистических методов исследования корреляционных эффектов в неидеальных ферми-системах со сложным квазичастичным спектром и сильным взаимодействием, а также в выяснении критериев адекватности различных микроскопических моделей. С точки зрения практических приложений построение последовательной квантово-статистической теории позволяет объяснять и описывать уникальное сочетание разнообразных физических свойств указанной группы веществ, а также прогнозировать свойства новых материалов.

#### Цель работы

1. Разработка последовательной квантово-статистической теории корреляционных эффектов в неидеальных ферми-системах со сложным квазичастичным спектром и сильным взаимодействием в приближении сильной связи для электронов.

2. Описание магнитных, электрических и сверхпроводящих свойств переходных и редкоземельных металлов, их сплавов и соединений на основе разработанного метода в рамках единого подхода.

3. Построение теории, устанавливающей общие закономерности влияния дополнительных взаимодействий, важных в определенных классах веществ: электрон-решеточного взаимодействия, межзонного рассеяния, косвенного РККИ-взаимодействия, сильного потенциального рассеяния, на наблюдаемые характеристики и физические свойства системы.

4. Исследование проблемы соотношения между описанием электронов на языке локализованных и коллективизированных состояний и уточнение представлений о их природе и тех критериях, которые позволяют судить о степени локализации или делокализации.

Научная новизна. В диссертации систематически прослежена роль корреляционных эффектов при последовательном микроскопическом описании магнитных, электронных и сверхпроводящих свойств переходных и редкоземельных металлов, их сплавов и соединений на основе приближения сильносвязанных электронов. Рассмотрены основные модельные гамильтонианы электронной теории твердого тела. При этом изучены спектры квазичастичных возбуждений при учете затухания, а также реакции на внешние поля (электропроводность, восприимчивость).

Для описания корреляционных эффектов в широкой области значений интеграла кулоновского взаимодействия разработан специальный вариант метода двухвременных температурных функций Грина Боголюбова-Тябликова, основанный на введении неприводимых функций Грина. Развита самосогласованная теория корреляционных эффектов в модели Хаббарда, в рамках которой удается построить новое интерполяционное решение этой модели, улучшающее известные ранее решения. На основе этих представлений изучена роль ряда дополнительных взаимодействий. Последовательно подчеркивается и обсуждается резко выраженный  $d$ -зонный характер переходных (и ряда редкоземельных) металлов, их сплавов и соединений и связанные с этим характерные особенности их свойств. Впервые развита самосогласованная теория электрон-фононного взаимодействия на основе модифицированного приближения сильной связи Фрелиха-Митры и дан вывод уравнений сверхпроводимости для переходного металла в представлении Ванье.

Впервые разработан самосогласованный вариант теории корреляционных эффектов в системе с сильным потенциальным рассеянием. Впервые построена последовательная микроскопическая теория нелокального электрон-решеточного взаимодействия и получены уравнения сверхпроводимости в приближении сильной связи в разупорядоченных концентрированных бинарных сплавах переходных металлов. Развита теория элементарных возбуждений при учете их затухания для обобщенной РККИ-модели магнетизма и для  $d-f$ -модели магнитного полупроводника.

Изучены некоторые кинетические явления для реалистической модели переходного металла в рамках приближения сильной связи для электронов. Вычислено низкотемпературное поведение электросопротивления при учете сдвига и деформации поверхности Ферми. Получено новое выражение для электросопротивления, дающее возможность описывать отклонения от правила Маттисена. Предложен новый микроскопический подход для описания влияния электрон-фононного взаимодействия на электросопротивление разупорядоченных сплавов переходных металлов, основанный на получении интегрального уравнения для двухчастичной функции Грина. Построена последовательная теория диффузии ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах и показана эффективность метода обобщенных кинетических уравнений, получаемых с помощью неравновесного статистического оператора Д.Н.Зубарева, для описания релаксационных процессов в подсистеме ядерных магнитных моментов в разбавленных сплавах.

В диссертации также рассмотрен широкий круг вопросов, связанных с описанием неупругого рассеяния медленных нейтронов в переходных и редкоземельных металлах, их сплавах и соединениях. В частности, детально проанализирована проблема непосредственного измерения стонервских (одночастичных) возбуждений в ферромагнитных переходных металлах. Показано, что изучение возбужденных состояний и реакций на внешние поля позволяет выявить принципиальные особенности модельных гамильтонианов электронной теории твердого тела, что дает возможность выяснить адекватность микроскопических моделей и имеет важное значение для решения проблемы соотношения между описанием электронов на языке локализованных и коллективизированных состояний.

Научная и практическая ценность работы. Представленные в диссертации исследования дают последовательное и систематическое описание широкого круга явлений, происходящих в переходных и редкоземельных металлах, их сплавах и соединениях. Теоретический подход, развитый в диссертации, позволяет с новой точки зрения рассмотреть целый ряд основных проблем указанной группы веществ и дать новые методы их решения. Полученные результаты дают достаточно полную картину динамического поведения основных модельных гамильтонианов электронной теории твердого тела при учете эффектов корреляции между сильно связанными электронами и различных дополнительных типов взаимодействий, важных в определенных классах веществ. Результаты, вошедшие в диссертацию, послужили основой дальнейшего развития теории, а также использовались для объяснения ряда проведенных экспериментов и для предложения постановки новых экспериментов. К последним относится круг вопросов, связанных с возможностью прямого наблюдения стонервских (одночастичных) возбуждений с помощью неупругого рассеяния медленных нейтронов.

В целом, результаты работы развивают новое направление в теории конденсированного состояния вещества — самосогласованное квантово-статистическое описание корреляционных эффектов в неидеальных ферми-системах со сложным квазичастичным спектром и сильным взаимодействием. Математический формализм, развитый в диссертации, достаточно прост в практическом применении, что обеспечило широкие возможности его применения для расчета квазичастичных спектров и затухания возбуждений в самых различных модельных системах.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Разработана самосогласованная теория корреляционных эффектов в неидеальных ферми-системах с сильным и слабым межэлектронным взаимодействием. Подход основан на введении неприводимых частей функций Грина (не содержащих ренормировок среднего поля). Это позволяет (не прибегая к тому или иному способу обрыва цепочки уравнений для функций Грина) записать уравнение Дайсона и получить точное аналитическое представление для массового оператора через многочастичные функции Грина. Приближенные решения конструируются как определенные приближения для массового оператора. Однако поскольку используется правильная структура решения (в виде формального решения уравнения Дайсона), конструирование приближенных решений возможно проводить систематическим образом. Метод позволяет проводить самосогласованные расчеты спектра возбуждений и их затухания в случаях, когда неприменимы приближение среднего поля и теория возмущений.

2. Показано, что метод неприводимых функций Грина для невырожденной модели Хаббарда позволяет эффективно описывать корреляционные эффекты и в рамках единого подхода найти (на основе точного аналитического представления для массового оператора) самосогласованные приближенные решения, имеющие интерполяционный характер: от зонного предела (слабая корреляция) до атомного (сильная корреляция). Найденные обобщенные решения в различных предельных случаях сводятся к ряду известных решений.

3. Предложено новое приближение при расчете одночастичных спектров моделей Хаббарда и Андерсона, описывающее влияние коллективных возбуждений на одноэлектронный спектр. Показано, что одночастичный спектр можно вычислить (в области резонанса) через восприимчивость колебаний электронной плотности, плотности "двоек" и спиновой плотности.

4. Предложен новый самосогласованный подход для изучения взаимного влияния магнитной и электронной подсистем в  $d-f$ -обменной мо-

дели магнитного полупроводника. Полученные результаты позволяют провести полный анализ спектра одноэлектронных квазичастичных возбуждений широкозонного магнитного полупроводника с учетом корреляционных эффектов.

5. Развита самосогласованная теория электрон-фононного взаимодействия в переходных металлах и их соединениях на основе модифицированного приближения сильной связи Фрелиха-Митры. Найден сдвиг и затухание энергий электронов. Впервые установлен характер изменения спектра электронов за счет электрон-фононного взаимодействия для случая изолятора - полупроводника Мотта-Хаббарда. В простейшем приближении очень сильной корреляции найдено, что электрон-фононное взаимодействие не приводит к уменьшению кулоновской щели.

6. Предложен новый подход для описания сверхпроводимости переходных металлов в базе локализованных функций Ванье. Найдена система уравнений сверхпроводимости, которая может рассматриваться как обобщение уравнений Элиашберга на случай переходного металла. Найдены явные выражения для электрон-фононной спектральной функции и проведен ее численный расчет для ряда переходных металлов. Показано, что описание электронов в приближении сильной связи достаточно хорошо для нахождения общего хода электрон-фононной спектральной функции.

7. Предложена новая самосогласованная теория электронной корреляции для разупорядоченных бинарных сплавов переходных металлов в широком интервале значений концентрации на основе модели Хаббарда со случайными параметрами. Установлен явный вид корреляционных поправок к когерентному потенциалу.

8. Предложена модель нелокального электрон-решеточного взаимодействия в разупорядоченных бинарных сплавах переходных металлов, которая является обобщением модели Барисича-Лаббе-Фриделя на случай сплавов. Впервые сформулирована последовательная самосогласованная теория электрон-фононного взаимодействия в разупорядоченных сплавах переходных металлов.

9. Развита последовательная микроскопическая теория сверхпроводящих разупорядоченных сплавов переходных металлов в приближении сильной связи. В приближении когерентного потенциала получен аналог линейаризованного уравнения Элиашберга для целевой функции и найдена температура сверхпроводящего перехода.

10. Предложен новый подход для вычисления электросопротивления переходного металла при учете слабого электрон-электронного рассеяния и электрон-фононного рассеяния. При учете сдвига поверхности Ферми и ее деформации установлено явное выражение для низкотемпературной за-

висимости электросопротивления, позволяющее описывать отклонение от правила Маттисена.

11. Сформулировано новое микроскопическое описание влияния взаимодействия связанных электронов с колебаниями решетки на электропроводность разупорядоченных сплавов переходных металлов. Найдено интегральное уравнение для двухчастичной функции Грина и показана возможность отрицательного значения температурного коэффициента электросопротивления в рамках приближения когерентного потенциала.

12. Развита последовательная квантово-статистическая теория диффузии ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах переходных металлов, основанная на методе неравновесного статистического оператора Д.Н.Зубарева. Установлено, что по сравнению с квантово-механическим описанием наличие диффузионного барьера приводит к существенному уточнению картины релаксации.

13. Развита самосогласованная теория элементарных возбуждений при учете затухания в системах со сложным квазичастичным спектром. Показано, что вычисление затухания в подобных системах имеет ряд существенных особенностей, обусловленных взаимодействием между подсистемами кристалла.

14. Показано, что исследование спектра магнитных возбуждений переходных и редкоземельных металлов и их соединений с помощью неупругого рассеяния медленных нейтронов позволяет судить о степени локализации или делокализации электронных состояний.

Апробация работы и публикации. Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики и Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ, кафедры магнетизма физического факультета Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, а также на Международной школе по теоретической физике (Карпач, 1974), Всесоюзной конференции по фазовым переходам металл-диэлектрик (Львов, 1977), Всесоюзных конференциях по физике магнитных явлений (Донецк, 1977; Тула, 1983), Международном симпозиуме по магнетизму (Дрезден, 1981), Международной конференции по эффектам кристаллического поля и  $f$ -электронному магнетизму (Вроцлав, 1982), Всесоюзном совещании - семинаре по неклассическим кристаллам (Севан, 1982), Международной конференции по сверхпроводимости  $d$ - и  $f$ -зонных металлов (Карлсруэ, 1982), Международных симпозиумах по электронной структуре металлов и сплавов (Дрезден, 1982, 1983), Всесоюзном совещании по физике низких температур (Кишинев, 1982), Общеввропейской конференции по физике конденсированного состояния вещества (Лозанна, 1983), Всесоюзном научном семинаре по металлофизике сверхпроводников (Киев, 1983), Между-

народной конференции стран-членов СЭВ по физике и технике низких температур (Варна, 1983).

Основные результаты диссертации опубликованы в 23 работах.

Структура диссертации. Диссертация состоит из предисловия, шести глав и выводов; содержит 350 страниц машинописного текста, включая 6 рисунков, 1 таблицу и библиографический список литературы из 465 названий.

#### СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В Предисловии дано обоснование актуальности и важности рассматриваемых проблем, рассмотрена общая постановка задачи об учете корреляционных эффектов, кратко изложен материал диссертации и основные результаты.

В первой, вводной, главе диссертации излагаются основные положения приближения сильной связи и микроскопического (модельного) подхода для исследования магнитных и электрических свойств переходных и редкоземельных металлов и их соединений. В § 4 записаны основные модельные гамильтонианы электронной теории твердого тела. Основной изучаемой моделью является модель Хаббарда для невырожденной зоны

$$H = \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1)$$

В зависимости от соотношения между интегралом кулоновского отталкивания  $U$  и эффективной шириной зоны  $W$  модель (1) описывает различные физические ситуации, от зонного предела ( $U/W \ll 1$ ) до атомного предела ( $U/W \gg 1$ ). Также записаны гамильтонианы однопримесной и периодической модели Андерсона, модифицированной модели Шубина-Вонсовского-Зенера, модели РККИ и  $d-f$ -обменной модели магнитного полупроводника.

В § 5 кратко обсуждается проблема адекватности модельного описания.

Во второй главе развита самосогласованная теория корреляционных эффектов в неидеальных ферми-системах на основе метода неприводимых функций Грина.

В § 6 проведено обсуждение квантово-статистического подхода для описания корреляционных эффектов в многочастичных системах. Дан анализ основных методов, применявшихся для расчета одночастичных свойств невырожденных моделей Хаббарда и Андерсона.

В § 7 введены двухвременные термодинамические функции Грина - Боголюбова - Тябликова. Сформулирован метод неприводимых функций Грина, который является полезной переформулировкой обычного метода уравнений движения. Исходная идея состояла в том, чтобы производить

расщепления многочастичных функций Грина в массовом операторе, поскольку при этом можно условно проконтролировать процедуру расщепления по аналогии с диаграммным подходом. Метод неприводимых функций Грина находится в тесной связи с методом проекционного оператора, который выражает идею "сокращенного описания" системы в наиболее общей форме. Операция проектирования позволяет свести бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений к нескольким относительно простым уравнениям, в которых "эффективно" учитывается та существенная информация о системе, которая определяет специфику данной задачи. Для того чтобы пояснить введение неприводимых функций Грина, рассмотрим запаздывающую функцию Грина  $G_{AA^+}^r = \langle\langle A(t), A^+(t') \rangle\rangle$ . В уравнении движения

$$\omega G_{AA^+}^r(\omega) = \langle[A, A^+]_+\rangle + \langle\langle[A, H] - [A^+]_+\rangle\rangle \quad (2)$$

введем по определению неприводимую ( $ir$ ) функцию Грина

$$ir \langle\langle[A, H] | A^+ \rangle\rangle_\omega = \langle\langle[A, H] - \alpha A | A^+ \rangle\rangle_\omega, \quad (3)$$

где  $\alpha$  определяется из условия

$$\langle\langle[[A, H]^{ir}, A^+]_+\rangle\rangle = 0. \quad (4)$$

Из (4) найдем

$$\alpha = \frac{\langle\langle[A, H] - A^+ \rangle\rangle}{\langle\langle[A, A^+]_+\rangle\rangle} = \frac{M_1}{M_0}. \quad (5)$$

где  $M_0, M_1$  - нулевой и первый моменты спектральной плотности. Неприводимой называется такая функция Грина, которая не может быть сведена путем расщепления к функциям Грина более низкого порядка. Вводя функцию Грина "нулевого порядка", в которой учтены все ренормировки среднего поля

$$G^0 = \langle\langle[A, A^+]_+\rangle\rangle (\omega - \alpha)^{-1}, \quad (6)$$

представим (2) в виде

$$G^0 = G^0 + G^0 P G^0. \quad (7)$$

Здесь введен оператор рассеяния

$$P = (M_0)^{-1} \langle\langle[A, H]^{ir} | ([A, H]^+)^{ir} \rangle\rangle (M_0)^{-1}. \quad (8)$$

Это позволяет определить массовый оператор

$$P = M + M G^0 P \quad (9)$$

и записать точное уравнение Дайсона

$$G = G^0 + G^0 M G. \quad (10)$$

Массовый оператор  $M$  выражается, согласно (8) и (7), через много-

частичную неприводимую функцию Грина и описывает возможные процессы неупругого рассеяния, приводящие к затуханию и дополнительной перенормировке частот квазичастицных возбуждений. Выделение в "нулевой" функцию Грина всех ренормировок среднего поля является не просто методическим приемом, но имеет весьма существенное значение. Средние поля могут иметь весьма нетривиальную структуру, которую трудно установить из каких-либо независимых соображений, что особенно наглядно проявляется при изучении модели Хаббарда в случае очень сильной корреляции. Конкретный способ введения неприводимых частей зависит от вида гамильтониана, условий задачи и типа операторов, из которых строится функция Грина.

В § 8 метод неприводимых функции Грина используется для получения обобщенного самосогласованного решения модели Хаббарда (I) в зонном пределе. Изучалась одноэлектронная функция Грина  $G_{k\beta} = \langle a_{k\beta} | a_{k\beta}^+ \rangle$ . В данном разделе уравнение (3) записывалось в виде

$$\langle a_{k+p,\beta} a_{p+q,-\beta}^+ a_{q,-\beta} | a_{k\beta}^+ \rangle = \langle a_{k+p,\beta} a_{p+q,-\beta}^+ a_{q,-\beta} | a_{k\beta}^+ \rangle - \delta_{p,0} \langle n_{q,-\beta} \rangle G_{k\beta}. \quad (II)$$

Массовый оператор (9) принимает следующую форму:

$$M_{k\beta}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pqrs} \langle a_{k+p,\beta} a_{p+q,-\beta}^+ a_{q,-\beta} | a_{r,-\beta}^+ a_{r+s,-\beta} a_{k+s,\beta}^+ \rangle_{\omega}. \quad (I2)$$

В парном приближении получим следующее самосогласованное представление (I2):

$$M_{k\beta}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \int \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3} \{ n(\omega_1) [1 - n(\omega_2) - n(\omega_3)] + n(\omega_2) n(\omega_3) \} g_{p+q,-\beta}(\omega_1) g_{k+p,\beta}(\omega_2) g_{q,-\beta}(\omega_3), \quad (I3)$$

где  $g_{k\beta}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\beta}(\omega + i\varepsilon)$ . В качестве примера получено явное выражение  $M_{k\beta}$  для парамагнитного случая с дельтаобразной формой первого итерационного приближения. Схема допускает возможность итерационного улучшения решения. Найдены уравнения для средних чисел заполнения и плотность одночастичных состояний. Показано, что соответствующий критерий магнетизма Стонера модифицируется. Учет корреляции приводит к сужению области магнитных решений по сравнению с приближением среднего поля. Предложен итерационный прием, позволяющий строить теорию возмущений для массового оператора по величине  $U/W$ . Наличие явного аналитического представления позволяет в зонном пределе с общей точки зрения проанализировать условие существования хорошо определенной поверхности Ферми в системе со взаимодействием в духе Латтинжера.

В § 9 развита новая самосогласованная теория сильной корреляции в модели Хаббарда. С помощью операторов "сплава" Хаббарда

$$d_{i\alpha\beta} \equiv n_{i-\alpha}^+ a_{i\beta} \quad (\alpha = \pm); \quad n_{i\pm}^+ = n_{i\pm}, \quad n_{i\pm}^- = (1 - n_{i\pm}) \quad (I4)$$

одночастичную функцию Грина можно представить в виде

$$G_{ij\beta}(\omega) = \langle a_{i\beta} | a_{j\beta}^+ \rangle_{\omega} = \sum_{\alpha\beta} \langle d_{i\alpha\beta} | d_{j\beta\alpha}^+ \rangle_{\omega} = \sum_{\alpha\beta} G_{ij\beta}^{\alpha\beta}(\omega), \quad (I5)$$

где  $G_{ij\beta}^{\alpha\beta}$  - матричная функция Грина. Матричная неприводимая функция Грина вводится следующим образом:

$$\bar{D}_{ie}^r(\omega) = \langle n_{i\beta}^+ a_{e\beta} + \alpha a_{i\beta} \cdot b_{ie,-\beta} | d_{j\beta\alpha}^+ \rangle_{\omega} - \sum_{\alpha'} \{ \tilde{A}_{ie} \cdot \tilde{G}_{ij\beta} - \tilde{B}_{ei} \cdot \tilde{G}_{ej\beta} \}. \quad (I6)$$

Далее, согласно (7)-(10) выводится точное уравнение Дайсона, массовый оператор которого имеет вид

$$\bar{M}_{q\beta}(\omega) = \bar{\Phi}^{-1} \left\{ \sum_{lm} t_{ie} t_{mj} \langle \bar{D}_{ie}^r | \bar{D}_{mj}^r \rangle_{\omega} \right\}_q \bar{\Phi}^{-1}. \quad (I7)$$

В отличие от других подходов вычисление одночастичной функции Грина атомного предела не опирается на теорию возмущений с начальным локальным двухуровневым решением. В нашем подходе в "нулевой" функции Грина

$$G_{0\beta}(q, \omega) = \sum_{\alpha\beta} G_{0q}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\omega - (n_{-\beta}^+ E_- + n_{-\beta}^- E_+) - \lambda(q)}{(\omega - E_- - n_{-\beta}^- \lambda_1(q))(\omega - E_+ - n_{-\beta}^+ \lambda_2(q)) - n_{-\beta}^- n_{-\beta}^+ \lambda_3(q) \lambda_4(q)} \quad (I8)$$

учтены все ренормировки среднего поля и потому она является нелокальной. Впервые, в наиболее полном виде, получен явный вид средних полей, которые описываются следующими корреляционными функциями:

$$\begin{aligned} \{ \tilde{A}_{ie} \}_{\alpha\beta} &= \alpha \langle d_{i\beta-\alpha}^+ a_{e-\alpha} \rangle + \langle d_{i-\beta-\alpha} a_{e-\alpha}^+ \rangle (n_{e-\alpha}^{\beta})^{-1}, \\ \{ \tilde{B}_{ie} \}_{\alpha\beta} &= \{ \langle n_{e-\alpha}^{\beta} n_{i-\alpha}^+ \rangle + \alpha \beta \langle a_{i\beta} a_{i-\alpha}^+ a_{e-\alpha} a_{e\alpha}^+ \rangle - \langle a_{i\beta} a_{i-\alpha} a_{e-\alpha}^+ a_{e\alpha}^+ \rangle \} (n_{e-\alpha}^{\beta})^{-1}. \end{aligned} \quad (I9)$$

Выражение (I8) можно представить в форме



$$G_{0z}(q, \omega) = \frac{n_{-z}^+}{\omega - E_- - n_{-z}^+ W_{q, -z}^-} + \frac{n_{-z}^-}{\omega - E_+ - n_{-z}^- W_{q, -z}^+} \quad (20)$$

где

$$n_{-z}^+ n_{-z}^- W_{q, -z}^\pm = N^{-1} \sum_{ij} t_{ij} \exp[-i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)] \times$$

$$\times \{ \langle a_{i-z}^\pm n_{i-z}^\pm a_{j-z}^\pm \rangle + \langle a_{i-z} n_{i-z}^- a_{j-z}^\pm \rangle + \langle n_{i-z}^\pm n_{i-z}^\pm \rangle +$$

$$+ \langle a_{i-z} a_{i-z}^\pm a_{j-z} a_{j-z}^\pm \rangle - \langle a_{i-z} a_{i-z} a_{j-z} a_{j-z}^\pm \rangle \} \quad (21)$$

— величины сдвигов для верхней и нижней зон, вследствие корреляции электронов. Решение (20) очень близко к решениям, получаемым в случае сильной корреляции методом Рот и методом моментов. Выражения для зонных сдвигов (21) совпадает с результатами этих методов, с тем отличием, что зонные сдвиги (21) различны для верхней и нижней подзоны и не содержат членов, не зависящих от квазиимпульса. Поэтому решение (18) является более полным. Существенно, что в нашем подходе точно показана несводимость средних полей (19) к функционалам от средней плотности электронов в атомном пределе. Показано, что замена точных средних полей на функционал от средней плотности требует отбрасывания корреляторов вида  $\langle a_{i-z}^\pm n_{i-z}^\pm a_{j-z} \rangle$  и  $\langle a_{i-z} a_{j-z}^\pm a_{j-z} a_{i-z}^\pm \rangle$  и дополнительного приближения в (20)  $\langle n_{i-z} n_{i-z} \rangle \approx n_{-z}^2$ . Это приводит к заведомо неверному решению "Хаббард I". Далее найдены поправки за счет массового оператора (17), которые приводят к частотной зависимости величин  $\lambda_i(q)$ . Эти поправки входят аддитивным образом:

$$\lambda_{1(2)}(q, \omega) = \lambda_{1(2)}(q) - \frac{n_{-z}^\pm}{n_{-z}^\pm} M_{q, \pm}^{\pm}(\omega) \quad (22)$$

Таким образом, в отличие от решения "Хаббард III" метод неприводимых функций Грина позволяет получить обобщенное двухполосное решение для модели Хаббарда в случае сильной корреляции, где явным образом разделены вклады от упругого рассеяния (ренормировки среднего поля) и от неупругого рассеяния, приводящие к частотной зависимости (массовый оператор). В качестве примера найдена основная поправка в приближении "аналогии сплава".

В § 10 и II развитый формализм применен для учета корреляционных эффектов в однопримесной модели Андерсона и модели Хаббарда с s-d-гибридизацией, в случае, когда корреляция мала. Матричная формулировка метода неприводимых функций Грина позволяет компактно опи-

сывать процессы межзонного рассеяния. В пренебрежении перенормировками вершин получены самосогласованные выражения для массовых операторов, которые легко вычисляются в парном приближении. С учетом массового оператора корреляционное решение модели Андерсона запишется в виде

$$\langle d_{0z} | d_{0z}^\dagger \rangle_\omega = \left\{ \omega - E_0 - U n_{-z} - \sum_P \frac{|V_P|^2}{\omega - \varepsilon_P} - M_z(\omega) \right\}^{-1} \quad (23)$$

которое обобщает простейшее хартри-фоковское решение. Результаты, полученные для однопримесной модели Андерсона полностью переносятся на случай модели Андерсона-Ньюса, описывающей хемосорбцию на поверхности переходного металла, и представляют интерес для анализа проблемы изменения одночастичной плотности состояний адсорбата на поверхности переходного металла за счет корреляционных эффектов.

В § 8-II показано, что метод неприводимых функций Грина позволяет учесть влияние коллективных возбуждений на одноэлектронный спектр моделей Хаббарда и Андерсона, поскольку одночастичный спектр (в области резонанса) можно вычислить через восприимчивости колебаний электронной плотности, плотности доек и спиновой плотности.

В § 12 метод неприводимых функций Грина применяется для исследования d-f-обменной модели магнитного полупроводника. Учтена кулоновская корреляция между сильносвязанными коллективизированными электронами, осуществляющими косвенный обмен. Получено полное самосогласованное выражение для массового оператора одноэлектронной функции Грина при учете электрон-электронного и электрон-магнитного рассеяния. Найдены перенормированная энергия и затухание квазичастичных возбуждений. Показано, что результат Вулси и Уайта, полученный с помощью теории возмущений, и результат Синкконена, полученный с помощью функционального дифференцирования, получаются из наших выражений как частные случаи.

В § 13 кратко рассмотрены некоторые свойства одночастичной плотности состояний неидеальной ферми-системы и указан общий метод нахождения низкотемпературного поведения электронной теплоемкости.

Третья глава посвящена разработке самосогласованной теории электрон-фононного взаимодействия и сверхпроводимости в переходных металлах и их соединениях. С помощью развитого во второй главе метода неприводимых функций Грина рассмотрено взаимодействие сильносвязанных электронов с фононами в переходных металлах и их соединениях в рамках модифицированного приложения сильной связи Фрелиха-Митри.

В § 14 и 15 описаны основные подходы, используемые в настоящее время для исследования электрон-фононных систем. Описание электрон-фононного взаимодействия в переходных металлах и их соединениях име-

ет свою специфику, что определяется доминирующей ролью  $d$ -электронов и весьма сложным видом потенциала решетки. Здесь отчетливо выявились два подхода.

Первый подход основан на использовании оператора электрон-фононного взаимодействия Фрелиха. Существенно, что в этом подходе переход к представлению вторичного квантования связан с ортонормированной системой блоховских волновых функций  $\{\Psi_{\vec{R}_k}(\vec{r})\}$ . Эти функции связаны унитарным преобразованием с функциями Ванье  $\{\phi_k(\vec{r}-\vec{R}_l)\}$ , центрированными на неподвижных узлах периодической решетки. Данный подход получили наименование "блоховского" (или зонного). При конкретных расчетах здесь оказался эффективным метод "жесткого маффин-тин" потенциала.

Второй подход носит название "модифицированного приближения сильной связи" Фрелиха-Митры. Главная идея состоит в том, что при малых колебаниях ионов около положений равновесия волновые функции сильно-связанных электронов можно считать "жестко" следующими за движущимися ионами:  $\phi(\vec{r}-\vec{R}_i) \approx \phi(\vec{r}-\vec{R}_i-\vec{u}_i)$ . Разлагая волновую функцию по малым смещениям, можно описать электрон-решеточное взаимодействие. Оба указанных подхода являются эквивалентными для гармонической решетки, однако второй подход имеет ряд преимуществ при описании переходных металлов.

В § 16 детально рассмотрен вывод гамильтониана Барисича-Лаббе-Фриделя (БЛФ), который наиболее просто и конструктивно реализует "модифицированное приближение сильной связи" в терминах вторично-квантованного гамильтониана. При выводе гамильтониана БЛФ, который является прямым обобщением гамильтониана Хаббарда (I), необходимо предположить ортогональность волновых функций электронов в колеблющейся решетке:

$$\int d^3r \phi^*(\vec{r}-\vec{R}_j-\vec{u}_j) \phi(\vec{r}-\vec{R}_i-\vec{u}_i) \approx \delta_{ij}. \quad (24)$$

Гамильтониан БЛФ записывается в форме

$$H_{e-i} = \sum_{i \neq j} T_{ij} (\vec{u}_i - \vec{u}_j) a_{i\alpha}^\dagger a_{j\alpha}. \quad (25)$$

$$T_{ij} = q_0 \frac{(\vec{R}_j - \vec{R}_i)}{|\vec{R}_j - \vec{R}_i|} t_{ij} \quad (26)$$

в базисе локализованных волновых функций и в форме

$$H_{e-i} = \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{\delta\gamma} V_{\nu}(\vec{R}, \vec{R}') Q_{\vec{\kappa}'\vec{\delta}} a_{\kappa\delta}^\dagger a_{\kappa\gamma}, \quad (27)$$

$$V_{\nu}(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{i q_0}{\alpha \sqrt{MN}} \sum_{\alpha} (t(\vec{R}_{\alpha}) \vec{E}_{\vec{\kappa}'\vec{\delta}} \nu \vec{R}_{\alpha} [\sin(\vec{R}\vec{R}_{\alpha}) - \sin(\vec{R}'\vec{R}_{\alpha})]) \quad (28)$$

в блоховском представлении. Из (25) и (27) видно, что, в отличие от

модели Фрелиха, содержащей матричный элемент от градиента потенциала, в модели БЛФ в операторе электрон-фононного взаимодействия матричный элемент записан в явном виде через небольшое число величин, характеризующих переходный металл: векторы поляризации фононных частот  $\vec{E}_{\alpha\nu}$ , интеграл перескока в идеальной (неподвижной) решетке  $t_{ij}(t(\vec{R}_{\alpha}))$  где  $\vec{R}_{\alpha}$  - расстояние между ближайшими соседями), массу иона  $M$ , постоянную решетки  $\alpha$ , число элементарных ячеек  $N$  и атомный параметр  $q_0$ , характеризующий экспоненциальное убывание слетеровской волновой функции  $\Phi(r) \sim \exp[-q_0 r]$ . В работе гамильтониан БЛФ используется для анализа только электронных свойств переходного металла.

В § 17 впервые получена полная самосогласованная система уравнений для функций Грина электронов при учете колебаний решетки в рамках модели БЛФ (27) в металлическом пределе (т.е. в зонном пределе для модели Хаббарда). Вычислены перенормированный спектр электронов и затухание, перенормированная плотность состояний и модифицированный критерий магнетизма Стонера

$$UD_0^e(\epsilon_f)(1 + \lambda_{eff}) > 1. \quad (29)$$

где  $\lambda_{eff}$  - эффективный параметр электрон-фононного взаимодействия. Результаты данного параграфа можно рассматривать как обобщение теории электрон-фононного взаимодействия в простых металлах, развитой А.Б.Мигдалом на случай переходного металла, в рамках модифицированного приближения сильной связи.

В § 18 развитый в § 17 подход обобщается для случая соединений переходных металлов. Также используется модель БЛФ (25), однако считается, что  $U \gg W$ . Расчет проводился в базисе локализованных функций (25). Электронная корреляция, для простоты, описывалась в приближении "Хаббард I" (хотя расчеты справедливы для общего двухполосного решения). Получена самосогласованная система уравнений для функций Грина электронов и смещений решетки и найдены явные аналитические выражения для массового и поляризационного операторов. Впервые рассмотрена процедура нахождения поправок за счет электрон-фононного взаимодействия к электронному спектру, состоящему из двух подзон. Показано, что эти поправки, в рассмотренном простейшем приближении для кулоновской корреляции, не приводят к уменьшению кулоновской щели в спектре. Рассчитан также поляризационный оператор фононов с учетом двух подзон электронного спектра.

В § 19 модель БЛФ (25) используется для вывода уравнений сверхпроводимости переходного металла в базисе локализованных волновых функций. Как теория, так и эксперимент указывают на то, что  $d$ -состояния, главным образом, ответственны за сверхпроводимость переход-

ных металлов. Использование базиса локализованных волновых функций позволяет подчеркнуть характерные особенности описания сверхпроводимости переходных металлов. Кроме того, такое представление необходимо для построения теории сверхпроводимости разупорядоченных сплавов и аморфных веществ. Полученные уравнения также записываются в блоховском представлении. В таком виде они представляют собой прямое обобщение интегральных уравнений Элиашберга на случай переходного металла. В настоящем подходе электрон-решеточное и кулоновское взаимодействия описываются единым образом. Показано, что динамические поправки за счет кулоновского взаимодействия в простых приближениях не описываются функцией диэлектрической проницаемости, что является следствием того, что в модели Хаббарда не учтена дальнедействующая часть кулоновского взаимодействия.

В § 20 получены явные выражения для электрон-фононной спектральной функции (функции Элиашберга) в рамках модели БлФ (27):

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^2} \frac{q_0^2 t^2}{a^2 M N} \int_{S_F} \frac{d^2 k}{v_k} \int_{S_{F'}} \frac{d^2 k'}{v_{k'}} \sum_{\nu, \nu'} \frac{[e_{\kappa-\kappa'\nu}^\alpha (\delta \tilde{\epsilon}_{\nu\nu'}^\alpha / \delta k_\alpha - \delta \tilde{\epsilon}_{\nu\nu'}^\alpha / \delta k'_\alpha)]^2}{2 \omega_{\kappa-\kappa'\nu}} \times \delta(\omega - \omega_{\kappa-\kappa'\nu}) \int_{S_F} \frac{d^2 k}{v_k} \quad (30)$$

Выражение (30) использовалось для численного расчета  $\alpha^2 F$  для пяти переходных металлов с ОЦК-решеткой: ванадия, ниобия, молибдена, вольфрама и тантала. В этом случае

$$\tilde{\epsilon}_k = 8 \cos(\frac{1}{2} a k_x) \cos(\frac{1}{2} a k_y) \cos(\frac{1}{2} a k_z). \quad (31)$$

При численном расчете применялось интегрирование по сферической поверхности Ферми, что является довольно грубым приближением для переходных металлов. Результаты расчета приведены на рис. 1. Заметим, что для ванадия и вольфрама микроскопический расчет проведен впервые. Для всех металлов наблюдается качественное согласие с недавними туннельными и микроконтактными экспериментами, а для ниобия и молибдена — с теоретическими расчетами, выполненными в блоховском подходе на основе приближения "жесткого маффин-тин" потенциала. Результаты численного расчета  $\alpha^2 F$  показывают, что описание электронов в рамках приближения сильной связи вполне хорошо для установления общего хода  $\alpha^2 F$ .

В § 21 проведены краткое обсуждение результатов, полученных в главе 3, и анализ адекватности модели электрон-фононного взаимодействия БлФ. Результаты рассмотрения показывают, что модель БлФ интересна и полезна для описания наиболее существенных свойств системы

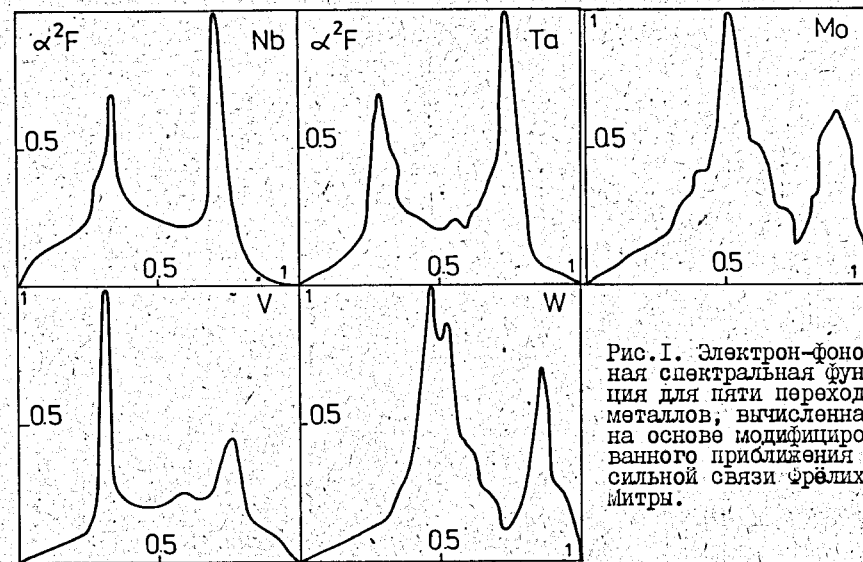


Рис. 1. Электрон-фононная спектральная функция для пяти переходных металлов; вычисленная на основе модифицированного приближения сильной связи Фрелиха-Митры.

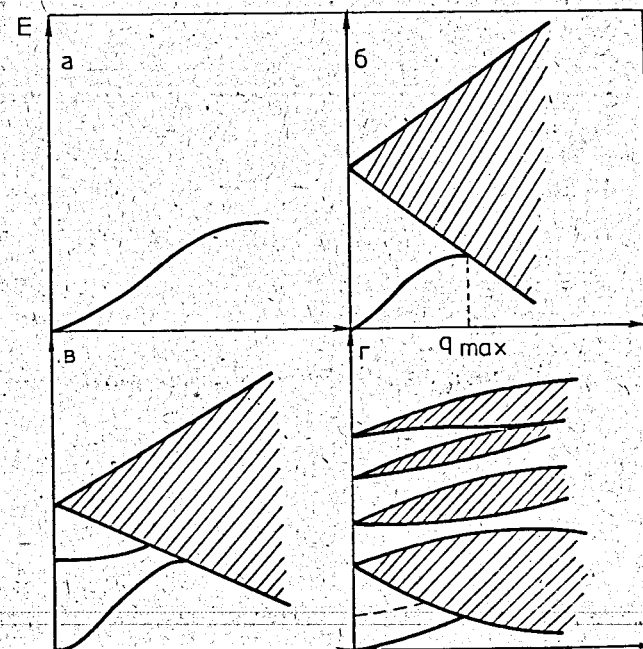


Рис. 2. Спектр возбуждений (полюса поперечной спиновой  $\chi$  восприимчивости) для различных моделей: а) модель Гейзенберга; б) модель Хаббарда; в) модели ШВЗ и РККИ; г) модель Хаббарда-Андерсона с гибридизацией.

сильносвязанных электронов, взаимодействующих с колебаниями решетки в переходных металлах и их соединениях.

Четвертая глава посвящена разработке самосогласованной теории электронной корреляции, электрон-фононного взаимодействия и сверхпроводимости в разупорядоченных сплавах переходных металлов.

В § 22 рассмотрено описание бинарных разупорядоченных сплавов переходных металлов  $A_x B_{1-x}$  на основе модели Хаббарда со случайными параметрами

$$H^{(V)} = H_{oe}^{(V)} + H_{ee}^{(V)}, \quad (32)$$

$$H_{oe}^{(V)} = \sum_{i\delta} \epsilon_i^V a_{i\delta}^+ a_{i\delta} + \sum_{ij\delta} t_{ij}^{VM} a_{i\delta}^+ a_{j\delta}, \quad (33)$$

$$H_{ee}^{(V)} = \frac{1}{2} \sum_{i\delta} U_i^V n_{i\delta} n_{i-\delta}. \quad (34)$$

Обозначение  $\{V\}$  характеризует заданную конфигурацию атомов в сплаве  $\{V\} = \{V_1, V_2, \dots, V_i, \dots, V_N\}$ , где  $V_i = A, B$ . Таким образом, все величины до усреднения зависят от данного набора  $\{V\}$ . Пространственная неоднородность системы описывается случайными атомными уровнями  $\epsilon_i^V$ , интегралами перескока  $t_{ij}^{VM}$  и кулоновскими интегралами  $U_i^V$ . В настоящей работе конфигурационное усреднение проводится в рамках одноузельного приближения когерентного потенциала, справедливого в широком интервале значений концентрации. Проведено обсуждение основных проблем теории бинарных сплавов.

В § 23 развита самосогласованная теория электронной корреляции в разупорядоченных бинарных сплавах. С помощью метода неприводимых функций Грина уравнения приближения когерентного потенциала записаны с учетом электрон-электронного взаимодействия. В результате одноэлектронная функция Грина после конфигурационного усреднения оказывается равной

$$\bar{G}_k(\omega) = (\omega - \epsilon_k - \Sigma^k(\omega) - \bar{M}_k^k(\omega))^{-1}, \quad (35)$$

где  $\Sigma^k(\omega)$  - когерентный потенциал, а  $\bar{M}_k^k$  - нелокальный массовый оператор электрон-электронного рассеяния в сплаве, который является прямым обобщением массового оператора (13). Найдено явное аналитическое выражение массового оператора  $\bar{M}_k^k$  для простого вида первого итерационного приближения самосогласованной схемы.

В § 24 выведен новый гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в разупорядоченном сплаве в рамках модифицированного приближения сильной связи, который имеет вид

$$H_{e-i}^{(V)} = \sum_{ij\delta} \frac{q_i^V + q_j^V}{2} t_{ij} \frac{(\vec{R}_j - \vec{R}_i)}{|\vec{R}_j - \vec{R}_i|} (\bar{u}_i - \bar{u}_j) a_{i\delta}^+ a_{j\delta} \quad (36)$$

для заданной конфигурации атомов в сплаве  $\{V\}$ . Гамильтониан (36) является первой микроскопической моделью, описывающей нелокальное взаимодействие сильносвязанных электронов с колебаниями решетки в разупорядоченном сплаве. Для случая идеального кристалла гамильтониан (36) сводится к (25).

В § 25 получена самосогласованная система уравнений для электронной и фононной функций Грина. Для получения замкнутой системы отбрасывались вершинные поправки в электрон-решеточном взаимодействии и при структурном усреднении. Найдены перенормированный спектр электронов при учете затухания, одночастичные плотности состояний и низкотемпературное поведение электронной теплоемкости. Разработанный метод позволяет найти ширины фононных возбуждений в разупорядоченном сплаве в рамках микроскопического подхода.

В § 26 на основе выведенного гамильтониана электрон-решеточного взаимодействия (36) и метода неприводимых функций Грина дан последовательный вывод уравнений сверхпроводимости в приближении сильной связи для разупорядоченных бинарных сплавов переходных металлов. Здесь используется локализованный базис и метод уравнений движения, развитый в § 19. Введение неприводимых функций Грина (3) производится с учетом аномальных средних, например

$$\langle\langle a_{i\delta} n_{i-\delta} | a_{j\delta}^+ \rangle\rangle = \langle\langle a_{i\delta} n_{i-\delta} | a_{j\delta}^+ \rangle\rangle - \langle n_{i-\delta} \rangle \langle\langle a_{i\delta} | a_{j\delta}^+ \rangle\rangle + \langle a_{i\delta} a_{i-\delta} \rangle \langle\langle a_{i-\delta}^+ | a_{j\delta}^+ \rangle\rangle. \quad (37)$$

Определение (37) опирается на теорию сверхпроводимости Н.Н.Боголюбова, который показал, что средние поля должны включать аномальные спаривания. В результате получается уравнение Дайсона (для заданной конфигурации атомов сплава)

$$\hat{\Phi}_{nj}^k(\omega) = \hat{\Phi}_{nj}^{ok}(\omega) + \sum_{i\ell} \hat{\Phi}_{ni}^{ok}(\omega) \hat{M}_{i\ell}^k(\omega) \hat{\Phi}_{\ell j}^k(\omega). \quad (38)$$

Подробно исследована проблема влияния способа усреднения на вид получаемых уравнений сверхпроводимости. Для простого способа усреднения в рамках редуцированного приближения когерентного потенциала впервые получен аналог нелинейных интегральных уравнений сверхпроводимости для целевой функции и функции ренормировки. В полном приближении когерентного потенциала получен аналог линеаризованного уравнения Элиашберга для целевой функции. Впервые выведено явное выражение для

электрон-фононной спектральной функции разупорядоченного бинарного сплава

$$\begin{aligned} \chi^2 F(\omega) = & 2 \sum_{\alpha} \bar{T}^2 \frac{q_{\alpha}^2}{\alpha^2} \left\{ x^2 q_{\alpha}^2 N_{\alpha}^2(\epsilon_f) \left( -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} D_{\alpha}^*(\omega + i\epsilon) \right) + \right. \\ & + \frac{1}{4} x y (q_{\alpha} + q_{\beta})^2 N_{\alpha}(\epsilon_f) N_{\beta}(\epsilon_f) \left( -\frac{1}{\pi} \left[ \operatorname{Im} D_{\alpha}^*(\omega + i\epsilon) + \operatorname{Im} D_{\beta}^*(\omega + i\epsilon) \right] \right) + \\ & \left. + y^2 q_{\beta}^2 N_{\beta}^2(\epsilon_f) \left( -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} D_{\beta}^*(\omega + i\epsilon) \right) \right\} / N(\epsilon_f), \end{aligned} \quad (39)$$

где  $N_i(\epsilon_f)$  и  $N(\epsilon_f)$  обозначают, соответственно, парциальную и полную усредненные плотности состояний электронов на уровне Ферми,  $\bar{T}$  - интеграл перескока между соседними атомами в кубической решетке,  $D_{\alpha}$  - условно усредненная фононная функция Грина. Таким образом, удается записать  $\chi^2 F(\omega)$  через характерные параметры компонент сплава. Из (39) можно вычислить эффективный параметр электрон-фононного взаимодействия  $\lambda_{eff}$  и найти температуру сверхпроводящего перехода  $T_c$ . Теория взаимодействия сильносвязанных электронов с колебаниями решетки в разупорядоченных сплавах переходных металлов, развитая в § 25, и теория сверхпроводимости в приближении сильной связи, развитая в § 26, дают обобщение теории Мигдала-Элиашберга на случай сплавов переходных металлов в рамках модифицированного приближения сильной связи Фрелиха-Митры и одноузельного приближения когерентного потенциала.

В пятой главе исследуются некоторые кинетические явления в переходных металлах и сплавах. Рассмотренные процессы переноса также связаны с особой ролью d-электронных состояний.

В § 27 и 28 проанализированы основные специфические черты описания электропроводности в переходных металлах и релаксационных явлений в разбавленных сплавах.

В § 29 кратко изложен метод вычисления коэффициентов переноса в твердых телах с помощью обобщенных кинетических уравнений, которые получаются на основе метода неравновесного статистического оператора Д.Н.Зубарева. Получаемые уравнения содержат обобщенные интегралы столкновений в виде корреляционных функций, которые необходимо вычислять для конкретных моделей. Показана связь метода обобщенных кинетических уравнений с формулой Кубо.

В § 30 метод обобщенных кинетических уравнений применяется для расчета электросопротивления переходного металла в рамках модели БЛО (27). При учете сдвига поверхности Ферми и ее деформации

$$\tilde{\epsilon}(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) + m \bar{v}_1 \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} + m \sum_{i=2}^n \bar{v}_i \Phi^i(\vec{k}) \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}} + \dots \quad (40)$$

получено явное выражение для низкотемпературной зависимости электросопротивления  $R$

$$R = \frac{\Omega}{3e^2} \frac{(A_{11}^{cc} T^2 + A_{11}^{cp} T^5)(A_{22}^{cc} T^2 + A_{22}^{cp} T^5) - (A_{12}^{cc} T^2 + A_{12}^{cp} T^5)^2}{N_1^2 (A_{22}^{cc} T^2 + A_{22}^{cp} T^5) + N_2^2 (A_{11}^{cc} T^2 + A_{11}^{cp} T^5) - 2 N_1 N_2 (A_{12}^{cc} T^2 + A_{12}^{cp} T^5)}. \quad (41)$$

Учтены процессы электрон-электронного рассеяния ( $\sim T^2$ ) и нормальные электрон-фононные процессы ( $\sim T^5$ ). Полученное выражение (41) описывает случаи отклонения от правила Мэттисена и может рассматриваться как обобщение теории электропроводности простых металлов Кагана-Жернова-Флёрва на случай переходных металлов.

В § 31 развита микроскопическая теория электросопротивления разупорядоченных сплавов с учетом колебаний решетки. В последние годы было экспериментально обнаружено, что температурный коэффициент электросопротивления  $R$

$$\alpha = R^{-1} \left( \frac{\partial R}{\partial T} \right) \quad (42)$$

зависит от величины  $R$  в неупорядоченных сплавах:  $\alpha > 0$ , когда  $R < 150$  мОм·см и  $\alpha < 0$ , когда  $R > 150$  мОм·см. Теоретическая интерпретация такого поведения  $\alpha$  не вполне ясна даже качественно. Есть основания считать, что для объяснения изменения знака  $\alpha$  необходимо учесть интерференцию сильного потенциального рассеяния и электрон-фононного взаимодействия. В данном разделе теория электропроводности строится в рамках подхода, основанного на построении интегрального уравнения для двухчастичной функции Грина и одноузельного приближения когерентного потенциала. Впервые дано микроскопическое описание фононной подсистемы на основе гамильтониана (36). Ввиду сложности проблемы фононы описывались, для простоты, без учета беспорядка. Показано, что на основе полученного интегрального уравнения для двухчастичной функции Грина возможно, при определенных предположениях, получить отрицательное поведение температурного коэффициента электросопротивления.

В § 32 дан последовательный микроскопический анализ проблемы релаксации ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах, исходя из метода неравновесного статистического оператора Д.Н.Зубарева. По сравнению с квантово-механическим описанием показано, что наличие диффузионного барьера приводит к существенному уточнению картины релаксации

$$T_1^{-1} = R_0^{-1} + 4\pi D N F, \quad (43)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии, который зависит от корреляционных

функций спиновых и электронных переменных,  $R_0$  — время релаксации Корринги. Развитый формализм имеет общий характер и может быть использован для описания других релаксационных явлений.

В шестой главе на основе изученных модельных гамильтонианов и метода уравнений движения для функций Грина рассмотрелось неупругое рассеяние медленных нейтронов в переходных металлах, их сплавах и соединениях. Изучение спектра магнитных возбуждений позволяет сформулировать наиболее наглядные с физической точки зрения критерии соотношения между зонным и локализованным характером электронных состояний. Коллективизированная модель имеет более сложный спектр, чем модель локализованных спинов (рис. 2), что позволяет экспериментальным образом проанализировать адекватность микроскопических моделей.

В § 33-35 дан обзор проблемы соотношения локализованного и зонного описаний магнитоактивных электронов в переходных и редкоземельных металлах, их сплавах и соединениях в связи с задачей вычисления спектра квазичастичных возбуждений и сечения неупругого рассеяния медленных нейтронов.

В § 36 рассмотрен вопрос о возможности прямого наблюдения стонеровских (одночастичных) возбуждений

$$\text{Im} \chi_0^+(\vec{q}, \omega) = \pi N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}) \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta) \quad (44)$$

(где  $\Delta = UN^{-1} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}+} - n_{\mathbf{k}})$  — зонное расщепление) на высокопоточных реакторах типа ИБР-2 и даны некоторые количественные оценки и характеристики экспериментальной установки. Поскольку стонеровские возбуждения (рис. 2, б) не возникают в модели Гейзенберга (рис. 2, а), их экспериментальное обнаружение и детальное исследование с помощью метода рассеяния нейтронов составляет весьма интересную и во многом принципиальную проблему физики магнитного состояния вещества. Использование правила сумм

$$\int \text{Im} \chi^+(\vec{q}, \omega) d\omega = 2\pi \langle S^z \rangle \quad (45)$$

позволяет в простом приближении эффективной массы для однозонной модели Хаббарда, что стонеровское и спин-волновое сечение рассеяния сравнимы между собой при больших значениях переданного импульса  $q = 0,9q_{\text{max}}$ . Найдена ширина диффузионного пика рассеяния нейтронов на стонеровских возбуждениях и с помощью простых оценок для никеля показано, что амплитуда стонеровского пика при  $q = 0,9q_{\text{max}}$  всего в три раза меньше амплитуды спин-волнового пика. Показано, что импульсные источники нейтронов, обладающие достаточно высоким потоком горячих нейтронов, открывают принципиальную возможность непосред-

ственного наблюдения рассеяния нейтронов на стонеровских возбуждениях. Даны оценки скорости счета установки.

В § 37 для уточнения спектра возбуждений переходного металла рассмотрена двухзонная модель Хаббарда с  $s$ - $d$ -гибридизацией. Вычислена спиновая восприимчивость в приближении хаотических фаз

$$\chi^+(\vec{q}, \omega) = \chi^{\text{HF}}(\vec{q}, \omega) \{1 - U \chi^{\text{HF}}(\vec{q}, \omega)\}^{-1}, \quad (46)$$

где  $\chi^{\text{HF}}(\vec{q}, \omega)$  — хартри-фоковская восприимчивость, которая имеет сложную структуру. Полученный результат (46) дает прямое обобщение теории Изьяма, Кима и Кубо для невырожденной модели Хаббарда. Показано, что помимо спин-волнового полюса, восприимчивость (46) имеет еще четыре квазистонеровских континуума (рис. 2, г).

В § 38 рассчитан спектр магнитных возбуждений и их затухание для обобщенной модели РККИ с учетом взаимодействия сильносвязанных электронов с фононами и межэлектронной корреляции. Для расчета полного квазичастичного спектра магнитных возбуждений (рис. 2, в) и их затухания использовался специальный матричный вариант метода неприводимых функций Грина, позволяющий самосогласованным образом описать электрон-магнонные, электрон-электронные и электрон-фононные процессы неупругого рассеяния. Показано, что вычисление затухания в подобных системах, характеризующихся сложным многоветвевым спектром, имеет ряд существенных особенностей. Дана оценка низкотемпературного поведения затухания магнов  $\Gamma(T)$ :

$$\Gamma(T) \sim aT + bT^3. \quad (47)$$

В § 39 развита самосогласованная теория магнитных возбуждений и их затухания в магнитных полупроводниках в рамках  $d$ - $f$  обменной модели. В отличие от теории, развитой в § 38, уравнения движения содержат добавочный член, обусловленный гейзенберговским обменом. Поэтому оказывается необходимым дополнительное введение неприводимых частей для гейзенберговской спиновой подсистемы. В рамках данного подхода удается впервые построить полную самосогласованную теорию магнитных возбуждений  $d$ - $f$  модели с учетом электрон-электронного, электрон-магнонного и магнон-магнонного рассеяния.

В § 40 рассмотрено влияние корреляционных эффектов на коэффициент спин-волновой жесткости разупорядоченных сплавов ферромагнитных переходных металлов в рамках модели Хаббарда со случайными параметрами. Численным образом найдена зависимость коэффициента жесткости от концентрации для сплавов на основе никеля. Полученные результаты сравниваются с данными по неупругому рассеянию медленных нейтронов. Показано, что учет корреляционных эффектов оказывает заметное влияние на поведение коэффициента спин-волновой жесткости.

В § 41 на основе рассмотрения, проведенного в шестой главе, сформулированы выводы, вытекающие из изучения спектра магнитных возбуждений ферромагнитных переходных металлов в связи с двойственным характером поведения магнитоактивных электронов. Проанализированы последние данные исследования никеля и железа с помощью неупругого рассеяния нейтронов и показано, что исследование спектра магнитных возбуждений переходных металлов имеет принципиальное значение для уточнения основных модельных представлений электронной теории твердого тела.

Выводы и краткое обсуждение основных результатов работы даны в § 42. Результаты диссертации показывают, что учет корреляционных эффектов играет существенную роль при последовательном микроскопическом описании физических свойств переходных металлов и сплавов. Разработанный метод неприводимых функций Грина для ферми-систем дает относительно простой и надежный способ квантово-статистического описания динамики системы. Приближение сильной связи для электронов и его обобщенная форма, предложенная Фрелихом и Митрой, являются достаточно эффективным теоретическим подходом для описания широкого круга явлений, в результате чего удается глубже понять связь между поведением электронов и разнообразными физическими свойствами.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Куземский А.Л. Рассеяние медленных нейтронов и магнитные свойства переходных металлов и сплавов. - ЭЧАЯ, 1981, т. 12, вып. 2, с. 366-423.
2. Куземский А.Л. Самосогласованное вычисление функций Грина в модели Хаббарда. - Дубна, ОИЯИ, 1973. - 15 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P4-7225).
3. Куземский А.Л. Самосогласованная теория сильной корреляции в модели Хаббарда. - Дубна, ОИЯИ, 1975. - 22 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-9239).
4. Куземский А.Л. Самосогласованное интерполяционное решение модели Хаббарда. Атомный и зонный предел. - Дубна, ОИЯИ, 1977. - 21 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-10695).
5. Куземский А.Л. Самосогласованная теория электронной корреляции в модели Хаббарда. - ТМФ, 1978, т. 36, № 2, с. 208-223.
6. Куземский А.Л. К теории корреляции d-электронов в переходных металлах. - Acta Phys. Polonica, 1976, v. 49A, N 1, p. 169-180. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P4-7749).
7. Kuzemsky A.L., Marvakov D.I., Vlahov J.P. - Electronic spectrum of a magnetic semiconductor in the s-f exchange model approximation. - Bulgarian J. Phys., 1983, v. 10, N 3, p. 290-296;

Самосогласованная теория магнитных полупроводников. - Дубна, ОИЯИ, 1983. - 14 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-83-278).

8. Kuzemsky A.L., Nolas A., Plakida N.M. - Self-consistent theory of the electron-phonon interaction in transition metals and their compounds. - Physica, 1983, v. 122B, N 1, p. 168-182; Взаимодействие сильносвязанных электронов с фононами в переходных металлах и их соединениях. - Дубна, ОИЯИ, 1982. - 17 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-82-493).
9. Вуйичич Г.М., Куземский А.Л., Плакида Н.М. - Уравнения сверхпроводимости для переходных металлов в представлении Ванье. - ТМФ, 1982, т. 53, № 1, с. 138-145.
10. Wysokinski K.I., Kuzemsky A.L. - Electron-phonon interaction in disordered transition metal alloys. - phys. stat. sol., (b), 1982, v. 113, N 2, p. 409-420 (Comm. Joint. Inst. Nucl. Res., E17-81-614).
11. Wysokinski K.I., Kuzemsky A.L., Plakida N.M. - The Eliashberg equations for disordered transition metal alloys. - In: Ed. Buckel W., Weber W. - Proceedings of the IV-th Intern. Conf. on Superconductivity in d- and f-Band Metals, 1982, Kernforschungszentrum, Karlsruhe, p. 363-366.
12. Wysokinski K.I., Kuzemsky A.L. - The theory for strong-coupling superconductivity in disordered transition metal alloys. - Journal Low Temp. Phys., 1983, v. 52, N 1/2, p. 81-98 (Comm. Joint Inst. Nucl. Res., E17-82-649).
13. Кристоф Ф., Куземский А.Л. - Электропроводность в модели переходного металла с несферической поверхностью Ферми. - Дубна, 1981, 14 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-81-630).
14. Christoph V., Kuzemsky A.L. - Electrical conductivity of a metallic system with a nonspherical Fermi surface. - phys. stat. sol., (b), 1982, v. 111, N 1, p. K1-K6.
15. Christoph V., Kuzemsky A.L. - The influence of the electron-phonon interaction on the electroconductivity of disordered metallic alloys. - phys. stat. sol., (b), 1982, v. 120, N 2, p. K219-K224. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-83-278).
16. Павликовски А., Бухбиндер И.Л., Куземский А.Л. Диффузия ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах. - Дубна, 1974, 18 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P4-8209).
17. Куземский А.Л., Чер Л. О возможности исследования стонеровских возбуждений в переходных металлах с помощью рассеяния нейтронов. - Дубна, 1976, 19 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P17-9656).

18. Куземский А.Л. Спектр магнитных возбуждений ферромагнитных переходных металлов и рассеяние нейтронов. - Дубна, 1979, 19 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: PI7-12169).
19. Kuzemsky A.L. Theory of transverse neutron inelastic scattering in the transition metals.- Physics of Condensed Matter, 1974, v. 18, N 2, p. 179-187. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: P4-7820).
20. Куземский А.Л., Кристоф Ф., Фрауенхайм Т. Затухание магнитных возбуждений в тяжелых редкоземельных металлах.- Дубна, 1981, 16 с. (Препринт/Объед. ин-т ядер. исслед.: PI7-81-561).
21. Christoph V., Kuzemsky A.L., Frauenhaim T., Conduction electron effects and localized spin excitations in the RKKY- theory of magnetism.- In: Eds. Guertin T.R. et al.- Crystalline Electric Field Effects in f-Electron Magnetism, 1982, Plenum Press, London, New York, p. 219-226.
22. Marvakov D.I., Vlahov J.P., Kuzemsky A.L. Self-consistent theory of elementary excitations in the systems with many-branch spectrum. Ferromagnetic semiconductors.- Dubna, 1984, 19 p. (Comm. Joint Inst. Nucl. Res., E17-84-134); J.Physios C (1985).
23. Коллей Е., Коллей В., Куземский А.Л. Спиновые волны и их устойчивость в неупорядоченных ферромагнитных металлических сплавах. - ФТТ, 1979, т. 21, № 10, с. 3100-3107; Ferromagnetic spin waves and their stability in disordered metallic alloys.- Dubna, 1978, 18 p. (Comm. Joint Inst. Nucl. Res., E17-11899).

Рукопись поступила в издательский отдел  
23 ноября 1984 года.