объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-87-39

М.А.Бокий, И.К.Кудрявцев, В.И.Юкалов

КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА В ГЕТЕРОФАЗНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Направлено в "Solid State Communications"

1987

В работе [I] было построено обобщение модели Вонсовского – Зинера, описывающей магнетизм в системе с локализованными и коллективизированными электронами, для случая сосуществования фаз с различной симметрией параметра порядка, а именно ферро- и парамагнитной фаз. Основные идеи подхода, позволяющего учесть такое сосуществование, изложены в работах [2-6] (см. также [7-9], где подробно описано применение подхода к различного рода системам).

Гамильтониан работы [I] может быть в свою очередь обобщен с помощью учета возможности перераспределения электронов между локализованными атомными d(f) –состояниями и коллективизированными зонными c–состояниями. Такое перераспределение естественным образом приводит к изменению числа электронов, локализованных в данном узле, или к изменению валентности. Таким образом, эта модификация позволила бы описать систему с переменной валентностью [I0,II]. Такими системами являются многие соединения переходных и редкоземельных металлов, актинидов (например, SmS, $YbAl_3$, UN). Характерной особенностью этих соединений является то, что близкими по энергии оказываются состояния с разным числом электронов на центре (например, состояния $4f^{n}$ и $4f^{n-1}$ + электрон в зоне проводимости). Вещества эти обладают рядом интересных свойств, в частности, большинство катализаторов обладают переменной валентностью.

Возможность сосуществования переменной валентности и магнетизма является хорошо установленным экспериментальным фактом (см., например, [I2]). Однако такое сосуществование возможно лишь при определенных соотношениях между параметрами, входящими в гамильтониан задачи [I2]. В частности, в работе [I3] было показано, что магнетизм в системе с переменной валентностью возникает при значениях концентрации локализованных электронов, превышающих определенную пороговую величину. Тем самым наличие в системе переменной валентности является разупорядочивающим по отношению к магнетизму фактором. В свою очередь, гетерофазные флуктуации также разупорядочивают магнитное состояние системы. Интересно было бы исследовать совместное влияние этих двух факторов на появление магнетизма в системе. Именно это мы и исследуем в настоящей работе.

Мы будем использовать обычный для описания систем с переменной валентностью формализм многоэлектронных операторов Хаббарда [I4] (различные варианты модели Хаббарда применительно к такого рода задачам см. в [I5-I7]). Этот формализм позволяет правильно учесть перестройку многоэлектронного состояния при локализации или делокализации электрона и адекватно описать спиновое состояние магнитного иона. Он лежит в основе многоэлектронной конфигурационной модели твердого тела [18–19], из которой мы будем исходить.

Для описания системы электронов в твердом теле с гетерофазными флуктуациями магнитного порядка мы, как и в работе [1], в качестве исходного выберем следующий гамильтониан [20]:

$$H = \bigoplus_{i=1}^{2} H_i ,$$

$$H_i = w_i \sum_{\sigma} \int \Psi^{+}_{i\sigma}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} + U(r) - \mu \right] \Psi_{i\sigma}(\vec{r})\, d\vec{r} +$$

$$+ \frac{w_i^2}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint \Psi^{+}_{i\sigma}(\vec{r}) \Psi^{+}_{i\sigma'}(\vec{r}') \quad (\vec{r}-\vec{r}') \Psi_{i\sigma'}(\vec{r}') \Psi_{i\sigma}(\vec{r})\, d\vec{r}\, d\vec{r}', \qquad (I)$$

где μ – химический потенциал, $U(\vec{r}) = \sum_{f} U(\vec{r}-\vec{R}_f)$ – ионный потенциал решетки, $\Phi(\vec{r}-\vec{r}')$ – кулоновский потенциал взаимодействия между электронами; вероятность w_i определяется как доля электронов в i-й фазе:

$$w_i = \frac{N_i^{e}}{N^{e}} ; \qquad w_1 + w_2 = 1 ,$$

где N^{e} – полное число рассматриваемых электронов, N_i^{e} – число электронов в i-й фазе. В рассматриваемом нами случае ферромагнитного упорядочения с парамагнитным разупорядочением полевые операторы $\Psi_{i\sigma}(\vec{r})$ определены на взаимно ортогональных спиновых подпространствах таким образом, что при достаточно низких температурах в ферромагнитной фазе существует отличная от нуля намагниченность, служащая параметром порядка:

$$M_i = g \mu_B w_i \sum_{\sigma\sigma'} \int \langle \Psi^{+}_{i\sigma}(\vec{r}) S_{\sigma\sigma'} \Psi_{i\sigma'}(\vec{r}) \rangle d\vec{r} \begin{cases} \neq 0 \text{ для } \Theta < \Theta_c & (i=1), \\ = 0 \ \forall \ \Theta & (i=2) . \end{cases}$$

В качестве ортонормированного базиса для гамильтониана (I) выберем систему блоховских функций $|\lambda k\rangle$ (λ – номер зоны, k – квазиимпульс) и волновых функций многоэлектронных термов каждого из N ионов решетки $|f\gamma\rangle$ (f – номер узла, γ – набор квантовых чисел, характеризующих данный терм). В общем случае набор γ включает: число локализованных на $d(f)$ –оболочке электронов ν , полный спин S и орбитальный момент L (либо полный момент J для случая сильной LS –связи), z –проекции полного спина $S^z = M$ (либо полного момента J^z), номер компоненты энергетического мультиплета при расщеплении в кристаллическом поле. Для целей данной работы достаточно знать M (в случае ионов редкоземельных и более тяжелых элементов в необходимый набор входят ν, J, J^z), т.е. $|f\gamma\rangle = |f\nu SM\rangle$. На выбранных таким образом функциях базиса определим операторы вторичного квантования. Блоховским состояниям $|\lambda k\rangle$ будут соответствовать обычные фермиевские операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ в i – й фазе $c^{+}_{i\lambda k\sigma}$, $c_{i\lambda k\sigma}$. Собственные состояния ионов в узлах решетки будут описываться операторами Хаббарда

$$X_{if}^{\gamma\gamma'} = |f\gamma\rangle_i \, {}_i\langle f\gamma'| , \qquad (2)$$

переводящими принадлежащий i- й фазе ион в узле f из состояния $|f\gamma'\rangle_i$ в состояние $|f\gamma\rangle_i$ и удовлетворяющими соотношениям

$$X_{if}^{\gamma\gamma'} X_{if}^{\Gamma\Gamma'} = \delta_{\gamma'\Gamma} X_{if}^{\gamma\Gamma'} ,$$

$$\left[X_{if}^{\gamma\gamma'} , X_{if}^{\Gamma'\Gamma} \right]_{\pm} = \delta_{\gamma'\Gamma'} X_{if}^{\gamma\Gamma} \pm \delta_{\Gamma\gamma} X_{if}^{\Gamma'\gamma'} .$$

Операторы Хаббарда, относящиеся к разным фазам или разным узлам, коммутируют вследствие ортогональности соответствующих состояний. Диагональные операторы, кроме того, удовлетворяют условиям нормировки

$$\sum_{\gamma} X_{if}^{\gamma\gamma} = \hat{1} ,$$

откуда после усреднения получим

$$\sum_{\gamma} \langle X_{if}^{\gamma\gamma} \rangle = 1 ,$$

где среднее $\langle X_{if}^{\gamma\gamma} \rangle$ есть вероятность заполнения соответствующего состояния. Поскольку средние заполнения высоколежащих энергетических состояний пренебрежимо малы при обычных условиях, удобно ограничиться основными и низколежащими возбужденными состояниями и работать с таким "почти полным" базисом. В каждом конкретном случае выбор такого базиса должен обосновываться реальной ситуацией в данном веществе.

Используя разложение произвольного оператора по операторам Хаббарда

$$\hat{O} = \sum_{\gamma\gamma'} \langle \gamma | \hat{O} | \gamma' \rangle X_{if}^{\gamma\gamma'} ,$$

получим используемые в дальнейшем выражения для операторов ионных спинов:

$$S_{if}^{z} = \sum_{\nu SM} M \, X_{if}^{\nu SM, \nu SM} ,$$

$$S_{if}^{+} = \sum_{\nu SM} b_S(M) \, X_{if}^{\nu SM, \nu S(M-1)} ,$$

$$S_{if}^{-} = \sum_{\nu SM} b_S(M) \, X_{if}^{\nu S(M-1), \nu SM} ,$$

$$b_S(M) = \left[(S+M)(S-M+1) \right]^{\frac{1}{2}} ; \quad M = -S, -S+1, \ldots, S-1, S.$$

В результате гамильтониан конфигурационной модели гетерофазного однополрешеточного магнетика запишется следующим образом:

$$H = \bigoplus_{i=1}^{2} H_i ,$$

$$H_i = H_i^{band} + H_i^{ion} + H_{i_{Coul}}^{ion-ion} + H_{i_{exch}}^{ion-ion} + H_{i_{Coul}}^{band-ion} + H_{i_{exch}}^{band-ion} ,$$

$$H_i^{band} = w_i \sum_{\lambda k \sigma} (\varepsilon_{\lambda k} - \mu) \, c_{i\lambda k\sigma}^{+} c_{i\lambda k\sigma} ,$$

$$H_i^{ion} = w_i \sum_{f\gamma} (E_{\gamma} - \nu \mu) \, X_{if}^{\gamma\gamma} ,$$

$$H_{i_{Coul}}^{ion-ion} = \frac{1}{2} w_i^2 \sum_{f \neq f'} \sum_{\gamma\gamma'} A_{\gamma\gamma'}(f-f') \, X_{if}^{\gamma\gamma} X_{if'}^{\gamma'\gamma'} ,$$

$$H_{i_{exch}}^{ion-ion} = - w_i^2 \sum_{f \neq f'} I(f-f') \, \vec{S}_{if} \cdot \vec{S}_{if'} , \qquad (3)$$

$$H_{i_{Coul}}^{band-ion} = w_i^2 \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{kk'\sigma} \sum_{f\gamma} Q_{\gamma}^{\lambda\lambda'} \frac{1}{N} e^{i(k-k')f} \, c_{i\lambda k\sigma}^{+} c_{i\lambda' k'\sigma} X_{if}^{\gamma\gamma} ,$$

$$H_{i_{exch}}^{band-ion} =$$

$$= - 2 w_i^2 \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{kk'} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{f} J^{\lambda\lambda'} \frac{1}{N} e^{i(k-k')f} \langle \sigma' | \vec{S} | \sigma \rangle \, c_{i\lambda' k\sigma'}^{+} c_{i\lambda k\sigma} \vec{S}_{if} ,$$

где $\varepsilon_{\lambda k}$ – закон дисперсии в λ– й зоне, E_{γ} – энергия ионной конфигурации $|\gamma\rangle$, $A_{\gamma\gamma'}(f-f')$ – кулоновское взаимодействие между различными ионами в состояниях $|f\gamma\rangle$ и $|f'\gamma'\rangle$, $I(f-f')$ – обменное взаимодействие между спинами различных ионов, определенными через операторы Хаббарда согласно (2), $Q_{\gamma}^{\lambda\lambda'}$ – параметр кулоновского взаимодействия иона в состоянии $|f\nu\rangle$ с зонными носителями, $J^{\lambda\lambda'}$ – параметр обменного взаимодействия ионного спина со спинами зонных носителей. Гамильтониан (3) не фиксирует число электронов и спин на узле решетки, они должны определяться самосогласованно из решения задачи.

Подробно рассмотрим следующий случай. Ионы магнитной подрешетки могут находиться в двух валентных состояниях с m и $m+1$ электронами на $d(f)$ –оболочке. Энергетическая структура термов представлена основными уровнями каждого из валентных состояний E_m и E_{m+1}, которые являются спин-вырожденными с мультиплетностями $2S'+1$ и $2S+1$ соответственно, т.е. базис локализованных состояний образован из функций $|fmS'M\rangle$, $|f(m+1)SM\rangle$. Запишем гамильтониан конфигурационной модели для однозонного случая, пренебрегая зависимостью параметров взаимодействия от индексов ионных состояний:

$$H = \bigoplus_{i=1}^{2} H_i ,$$

$$H_i = H_i^{band} + H_i^{ion} + H_{i_{Coul}}^{ion-ion} + H_{i_{exch}}^{ion-ion} + H_{i_{Coul}}^{band-ion} + H_{i_{exch}}^{band-ion} ,$$

$$H_i^{band} = w_i \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{ik\sigma}^{+} c_{ik\sigma} ,$$

$$H_i^{ion} = w_i \sum_f \Big[(E_{m+1} - (m+1)\mu) \sum_{M=-S}^{S} X_{if(m+1)}^{MM} + (E_m - \mu m) \sum_{M=-S'}^{S'} X_{ifm}^{MM} ,$$

$$H_{i_{Coul}}^{ion-ion} = \frac{1}{2} w_i^2 \sum_{f \neq f'} \sum_{\nu\nu' MM'} A(f-f') X_{if\nu}^{MM} X_{if'\nu'}^{M'M'} , \qquad (4)$$

$$H_{i_{exch}}^{ion-ion} = - w_i^2 \sum_{f \neq f'} I(f-f') \vec{S}_{if} \cdot \vec{S}_{if'} ,$$

$$H_{i_{Coul}}^{band-ion} = w_i^2 \sum_{kk'\sigma} \sum_{f\nu M} \frac{Q}{N} e^{i(k-k')f} c_{ik\sigma}^{+} c_{ik\sigma}^{+} X_{if\nu}^{MM} ,$$

$$H_{i_{exch}}^{band-ion} = - 2 w_i^2 \sum_{kk'} \sum_{\sigma\sigma' f} \frac{J}{N} e^{i(k-k')f} \langle\sigma'|\vec{S}|\sigma\rangle c_{ik'\sigma'}^{+} c_{ik\sigma} \vec{S}_{if} .$$

Рассмотрим гамильтониан (4) в приближении среднего поля, принимая во внимание только однородные решения, соответствующие сосуществованию в системе ферромагнитной и парамагнитной фаз. Тогда после расцепления билинейных и квадратичных форм получаем:

$$H_i^{MF} = \tilde{H}_i + \tilde{H}_i^{band} + \tilde{H}_i^{ion} ,$$

$$\tilde{H}_i = \frac{1}{2} N w_i^2 A(0) + N w_i^2 C_i^2 I(0) + 2 N w_i^2 C_i m_i J -$$

$$- w_i^2 \sum_{k\sigma} Q \langle c_{ik\sigma}^{+} c_{ik\sigma} \rangle \sum_{\nu M} \langle X_{if\nu}^{MM} \rangle , \qquad (5)$$

$$\tilde{H}_i^{band} = w_i \sum_{k\sigma} (\tilde{\varepsilon}_{k\sigma}^{(i)} - \mu) c_{ik\sigma}^{+} c_{ik\sigma} ,$$

$$\tilde{H}_i^{ion} = w_i \sum_f \Big[\sum_{M=-S}^{S} (\tilde{E}_{(m+1)M}^{(i)} - (m+1)\mu) X_{if(m+1)}^{MM} +$$

$$+ \sum_{M=-S'}^{S'} (\tilde{E}_{mM}^{(i)} - m\mu) X_{ifm}^{MM} \Big] ,$$

где

$$A(0) = \sum A(f-f') ; \qquad I(0) = \sum I(f-f') ;$$

$$C_i = \langle S_{if}^{z} \rangle = \sum_{\nu M} M \langle X_{if\nu}^{MM} \rangle ;$$

$$m_i = \frac{1}{N}\sum_{k\sigma} \sigma \langle c^+_{ik\sigma} c_{ik\sigma} \rangle \quad ;$$

$$\tilde{\mathcal{E}}^{(i)}_{k\sigma} = \mathcal{E}_k + w_i Q \sum_{\nu M} \langle X^{MM}_{if\nu} \rangle - 2 w_i J C_i \sigma \quad ;$$

$$\tilde{E}^{(i)}_{\nu M} = E_\nu - 2w_i I(0) C_i M + \frac{w_i}{N} Q \sum_{k\sigma} \langle c^+_{ik\sigma} c_{ik\sigma} \rangle - 2 w_i J m_i M \,.$$

Теперь с помощью граничного условия можно ввести в систему парамагнитную фазу ($i=2$):

$$C_2 = 0; \qquad m_2 = 0.$$

Переобозначая величины следующим образом

$$C_1 \equiv C; \qquad m_1 \equiv m; \qquad w_1 \equiv w; \qquad w_2 = 1-w,$$

выпишем свободную энергию системы с гамильтонианом (5):

$$F(T,m) = N\left(w^2 - w + \frac{1}{2}\right) A(0) + N w^2 C^2 I(0) + 2Nw^2 JCm -$$

$$- \sum_{ik\sigma} \sum_{\nu M} w_i^2 Q \langle c^+_{ik\sigma} c_{ik\sigma} \rangle \langle X^{MM}_{if\nu} \rangle -$$

$$- \theta \sum_{\nu M} \exp \frac{-\tilde{E}^{(1)}_{\nu M} w + \nu\mu w}{\theta} - \theta \sum_{\nu M} \exp \frac{-\tilde{E}^{(2)}_{M} (1-w) + \nu\mu (1-w)}{\theta} -$$

$$- \theta \sum_{k\sigma} \ln \left[1 + \exp \frac{-w \tilde{\mathcal{E}}^{(1)}_{k\sigma} + w\mu}{\theta} \right] -$$

$$- \theta \sum_{k\sigma} \ln \left[1 + \exp \frac{-(1-w) \tilde{\mathcal{E}}^{(2)}_{k\sigma} + (1-w)\mu}{\theta} \right].$$

Для самосогласованного решения задачи необходимо совместно решить уравнения для средних, входящих в гамильтониан H^{MF} вместе с уравнением для вероятности, получаемым из условия $\frac{\partial F}{\partial w} = 0$, и условием нормировки на число электронов. В результате получается следующая система уравнений самосогласования:

$$m^{(i)}_{k\sigma} = \langle c^+_{ik\sigma} c_{ik\sigma} \rangle = f(E^{(i)}_{k\sigma}) = \frac{1}{\exp E^{(i)}_{k\sigma} + 1} \quad ; \quad E^{(i)}_{k\sigma} = w \tilde{\mathcal{E}}^{(i)}_{k\sigma} - w\mu,$$

$$m_i = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle c^+_{ik\sigma} c_{ik\sigma} \rangle \quad ,$$

$$\langle X^{MM}_{if} \rangle = \exp \frac{-E^{(i)}_{\nu M} w_i + \nu\mu w_i}{\theta} \left[\sum_{\nu M} \exp \frac{-\tilde{E}^{(i)}_{\nu M} w_i + \nu\mu w_i}{\theta} \right]^{-1},$$

$$C_i = \sum_{\nu M} M \langle X^{MM}_{if\nu} \rangle \,,$$

$$w = \left[NA(0) - \sum_{\nu M} (E_\nu - \nu\mu) \exp \frac{-\tilde{E}^{(1)}_{\nu M} w + \nu\mu w}{\theta} + \right.$$

$$+ \sum_{\nu M} (E_\nu - \nu\mu) \exp \frac{-\tilde{E}^{(2)}_{\nu M} (1-w) + \nu\mu (1-w)}{\theta} +$$

$$\left. + \sum_{k\sigma} \frac{\partial E^{(1)}_{k\sigma}}{\partial w} f(E^{(1)}_{k\sigma}) + \sum_{k\sigma} \frac{\partial E^{(2)}_{k\sigma}}{\partial w} f(E^{(2)}_{k\sigma}) \right] \left[2NA - 2NC^2 I(0) \right]^{-1},$$

$$m = w \sum_{\nu M} \nu \exp \frac{-\tilde{E}^{(1)}_{\nu M} w + \nu\mu w}{\theta} + (1-w) \sum_{\nu M} \exp \frac{-\tilde{E}^{(2)}_{\nu M} (1-w) + \nu\mu (1-w)}{\theta} +$$

$$+ w \sum_{k\sigma} f(E^{(1)}_{k\sigma}) + (1-w) \sum_{k\sigma} f(E^{(2)}_{k\sigma}) \,.$$

Найдем критическую точку θ_c, т.е. температуру фазового перехода второго рода (если он имеет место), исследуя разложение уравнения для параметра порядка c. При $\theta \to \theta_c$ имеем

$$c \simeq \frac{\sum\limits_{\nu} \dfrac{S_\nu\,(S_\nu+1)(2S_\nu+1)}{3} \exp \dfrac{-E_\nu + \nu\mu_c - \frac{Q}{2N}\sum\limits_{k\sigma} m_{k\sigma}^{(1)}}{2\theta_c}}{\sum\limits_{\nu}(2S_\nu+1)\exp\dfrac{-E_\nu + \nu\mu_c - \frac{Q}{2N}\sum\limits_{k\sigma} m_{k\sigma}^{(1)}}{2\theta_c}} \times$$

$$\times \frac{CI(0) + mJ}{2\theta_c},$$

$$m \simeq -\frac{CJ}{4N\theta_c} \sum f'(\cdot) \equiv \varkappa c.$$

Отсюда получаем для θ_c следующее уравнение:

$$\theta_c = (I(0)+\varkappa J)\sum_{\nu} \frac{S_\nu\,(S_\nu+1)(2S_\nu+1)}{3} \exp\frac{-E_\nu + \nu\mu_c - \frac{Q}{2N}\sum\limits_{k\sigma} m_{k\sigma}^{(1)}}{2\theta_c} \times$$

$$\times\left[\sum_{\nu}(2S_\nu+1)\exp\frac{-E_\nu + \nu\mu_c - \frac{Q}{2N}\sum\limits_{k\sigma} m_{k\sigma}^{(1)}}{2\theta_c}\right]^{-1}. \tag{6}$$

Интересно проанализировать в (6) влияние множителя, связанного с переменной валентностью. Для этого положим $J=0$, т.е. будем рассматривать зону как электронный резервуар. Пусть, кроме того, n-электронная конфигурация синглетна, т.е. $S'=0$. Тогда уравнение (6) принимает вид

$$\theta_c = I(0)\,\frac{S(S+1)(2S+1)}{6}\left[(2S+1) + \exp\frac{E_{n+1} - E_n - \mu_c}{2\theta_c}\right]^{-1}. \tag{7}$$

Поскольку из двух ионных конфигураций одна магнитная, а другая нет, то в зависимости от взаимного расположения энергетических уровней E_{n+1} и $E_n + \mu_c$ следует ожидать перехода системы от магнитного поведения к немагнитному. В случае, когда синглетный энергетический уровень лежит много выше магнитовырожденного, θ_c достигает своего максимального значения

$$\theta_c^{\max} = I(0)\,\frac{S(S+1)}{6}.$$

В дальнейшем удобно ввести безразмерную переменную $\theta_c(\theta_c^{\max})^{-1}$, а также перейти в уравнении (7) к следующим новым переменным:

$$t = \frac{\theta_c}{\theta_c^{\max}}; \qquad \omega = \frac{\Omega - \mu_c}{2\theta_c^{\max}}; \qquad \Omega = E_{n+1} - E_n.$$

В результате получим уравнение относительно t:

$$t = \frac{2S+1}{2S+1 + \exp\frac{\omega}{t}},$$

которое в зависимости от величины ω имеет от нуля до двух нетривиальных решений. Рассмотрим конкретные случаи.

I) $\omega \le 0; \quad \frac{2S+1}{2S+2} \le t \le 1.$

В этом случае мы имеем одно значение температуры фазового перехода θ_c^+.

2) $0 < \omega < \tilde{\omega}.$

В этом случае существуют два решения θ_c^- и θ_c^+, при $\omega = \tilde{\omega}$ сливающиеся в одно. При $\theta < \theta_c^-$ магнитное упорядочение разрушается заселением нижнего синглетного уровня E_n с переходом всех электронов в зону проводимости. При $\theta > \theta_c^+$ магнитный порядок разрушается термическим разупорядочением.

3) $\omega > \tilde{\omega}.$

В этом случае решений нет, магнитное упорядочение невозможно, так как обменное взаимодействие слабо по сравнению с энергией возбуждения иона на магнитном уровне E_{n+1}. Для критического значения нетрудно получить определяющее его уравнение:

$$\ln \frac{2S+1}{\tilde{\omega}} = \tilde{\omega} + 1 \qquad \left(t = \tilde{\omega} \left(\ln \frac{2S+1}{\tilde{\omega}}\right)^{-1} \right).$$

В заключение авторы хотели бы поблагодарить Л.А.Асланова и А.С.Шумовского за внимание к работе.

Литература

1. Бокий М.А., Юкалов В.И. В сб.: III Межд.симп. по избранным проблемам стат.механики. ОИЯИ, Д17-84-850, Дубна, 1984, т.I, с.170.
2. Юкалов В.И.-ТМФ, 1976, 26, с.403.
3. Yukalov V.I.-Phys.Lett., 1981, A81, p.249.
4. Yukalov V.I.-Physica, 1981, A108, p.402.
5. Yukalov V.I.-Phys.Lett., 1981, A85, p.68.
6. Yukalov V.I.-Phys.Lett., 1981, A81, p.433.
7. Шумовский А.С., Юкалов В.И.-ЭЧАЯ, 1985, 16, с.1274.
8. Боголюбов Н.Н.(мл.), Шумовский А.С., Юкалов В.И.-ТМФ, 1984, 60, с.432.
9. Шумовский А.С., Юкалов В.И. Фазовые состояния и переходы. ОИЯИ, Р17-85-676, Дубна, 1985.
10. Хомский Д.И.-УФН, 1979, 129, с.443.
11. Varma C.M.-Rev.Mod.Phys., 1976, 48, p.219.
12. Sharma H.V., Singh I.- phys.stat. solidi b, 1983, 118, p.511.
13. Matlak M., Nolting W. -Sol.State Comm., 1983, 47, p.11.
14. Hubbard J.C.-Proc.Roy.Soc., 1963, A276, p.238.
15. Callen J., Callen E.-J.Appl.Phys., 1970, 41, p.879 ; Phys.Rev. Lett., 1971, 65, p.236.
16. Chakraverty B.-Czech.J.Phys., 1970, B31, p.343.
17. Bari R. -Phys.Rev., 1971, B3, p.2662.
18. Кузьмин Е.В. Обменные взаимодействия в металлах.В кн.:Физика магнитоупорядоченных веществ. Наука, Новосибирск, 1976.
19. Лосева Г.Б., Овчинников С.Г., Петраковский Г.А. Переход металл-изолятор в сульфидах 3d -металлов. Наука, Новосибирск, 1981.
20. Yukalov V.I.-Comm.Oxf.Univ. DTP 47-81, Oxford, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 января 1987 года.

Бокий М.А., Кудрявцев И.К., Юкалов В.И. Р17-87-39

Критическая температура в гетерофазной модели Хаббарда

Исследовано влияние переменной валентности и гетерофазных флуктуаций на появление магнетизма в системе, описываемой гетерофазной моделью Хаббарда. Проанализирована зависимость температуры Кюри от параметров гамильтониана. Показано, что для некоторых систем могут существовать две критические точки, при этом магнитный порядок существует в интервале между ними.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Boky M.A., Kudryavtsev I.K., Yukalov V.I. P17-87-39

Critical Temperature in Heterophase Hubbard Model

The influence of the intermediate valence and heterophase fluctuations on the onset of the magnetism is investigated for the system described by the heterophase Hubbard model. The dependence of the Curie temperature on parameters of the Hamiltonian is analysed. It is shown that for some systems two critical points can exist, the magnetic order being present in the interval between these points.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987