Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, Особенности спектра тяжелых фермионов в скошенной фазе антиферромагнитных интерметаллидов, *ТМФ*, 2010, том 162, номер 1, 125–149

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6460>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.162.85.209

26 апреля 2023 г., 17:15:34

© 2010 г.

В. В. Вальков*, Д. М. Дзедзисашвили†

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРА ТЯЖЕЛЫХ ФЕРМИОНОВ В СКОШЕННОЙ ФАЗЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

Изучено влияние индуцированного магнитным полем скоса магнитных подрешеток на энергетическую структуру тяжелофермионных квазичастиц в интерметаллидах с антиферромагнитным типом упорядочения. Исследования выполнены в рамках эффективного гамильтониана периодической модели Андерсона в режиме сильных электронных корреляций. В результате учета виртуальных забросов в высокоэнергетические двоичные состояния этот гамильтониан включает обменные взаимодействия между спиновыми моментами f -ионов, а также s - f -обменную связь между двумя подсистемами. Для неколлинеарной геометрии задачи введено унитарное преобразование, позволившее свести уравнение восьмой степени для спектра тяжелых фермионов к двум уравнениям четвертой степени. Показано, что характер квазиимпульсной зависимости энергии тяжелых фермионов претерпевает качественные изменения при переходе от антиферромагнитной фазы к фазе со значительным углом скоса, возникающим при наложении внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: периодическая модель Андерсона, тяжелые фермионы, антиферромагнетизм, скошенная фаза.

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема корректного учета сильных электронных корреляций при описании физических свойств систем на основе редкоземельных и трансурановых элементов занимает центральное место в современной теории конденсированного состояния вещества. Характерной особенностью таких систем является наличие незаполненной f -оболочки редкоземельных ионов и сильных внутриионных кулоновских взаимодействий. Большая величина гибридизации атомных орбиталей магнитных ионов с состояниями коллективизированных электронов не позволяет рассматривать по отдельности проводящие и магнитные свойства таких систем, а требует единого подхода при их описании. Основой для теоретических исследований таких систем служит периодическая модель Андерсона (ПМА) [1].

*Институт физики СО РАН, Красноярск, Россия. E-mail: vvv@iph.krasn.ru

†Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия. E-mail: ddm@iph.krasn.ru

Подвижность носителей тока в соединениях с тяжелыми фермионами (ТФ), в системах Кондо, в соединениях со смешанной валентностью изменяется в широких пределах. Поэтому среди этих систем имеются изоляторы, полупроводники, металлы и сверхпроводники. Экспериментальные данные свидетельствуют о существенном влиянии сильных электронных корреляций (СЭК) на их термодинамические [2]–[5] и гальваномагнитные [6]–[9] свойства. Для описания низкотемпературного поведения отмеченных систем был предложен метод слейв-бозонного представления [10], позволивший учесть СЭК и получить спектр ТФ с большой эффективной массой для парамагнитных интерметаллидов.

В настоящее время многочисленный класс ТФ-систем и систем Кондо составляют материалы, переходящие при понижении температуры в состояние с дальним антиферромагнитным (АФМ) порядком. Это упорядочение в локализованной подсистеме сказывается на спектре ТФ, поскольку взаимосвязь носителей тока с локализованными моментами велика. Для частного случая ПМА, когда химический потенциал находится строго посередине между значениями энергий E_0 и $E_0 + U$, вычисление спектра Ферми для АФМ-изолятора Кондо было реализовано в работах [11]–[14]. Однако полученные решения не могут быть использованы для описания металлического поведения АФМ-интерметаллидов. Кроме того, они применимы только для коллинеарной геометрии, когда нет скоса магнитных подрешеток. В изотропных АФМ это возможно только при нулевом магнитном поле ($H = 0$).

Между тем значительное число экспериментальных работ посвящено изучению свойств ТФ-АФМ, находящихся во внешнем магнитном поле. Поскольку для АФМ ТФ-систем характерные температуры спинового упорядочения составляют единицы градусов Кельвина, то магнитные поля ~ 30 кэ соизмеримы с энергиями обменных взаимодействий. Поэтому такие поля способны существенно повлиять на взаимную ориентацию магнитных подрешеток в локализованной подсистеме.

В этой связи представляется актуальным вычисление спектра ТФ в АФМ-интерметаллидах в условиях, когда магнитное поле вызывает заметный скос магнитных подрешеток. В этом случае перестройка структуры основного состояния магнитной подсистемы из-за сильной связи с коллективизированными электронами будет существенно влиять на их энергетический спектр.

Ниже для описания магнитных свойств ТФ-металлических систем используется так называемая расширенная ПМА, которая учитывает обменные взаимодействия в подсистеме локализованных f -электронов, а также s - f -обменные взаимодействия локализованных и коллективизированных электронов. Слагаемые отмеченного типа появляются в эффективном низкоэнергетическом гамильтониане ПМА в режиме большого, но конечного одноузельного кулоновского взаимодействия U в результате преобразования Шриффера–Вольфа [15], [16]. Такой подход, основанный на методе канонических преобразований, в различных вариантах был использован для построения эффективного гамильтониана ПМА в работах [17]–[21]. Следует, однако, отметить, что в случае ТФ-АФМ с металлическим типом основного состояния эффективные обменные интегралы, возникающие в результате преобразования

Шриффера–Вольфа, расходятся, если энергия локализованного уровня E_0 находится в зоне проводимости [21]. Это препятствие было устранено в работе [22] посредством выделения высокоэнергетических гибридационных процессов V_{12} , приводящих к виртуальным забросам в верхнюю зону Хаббарда. При учете этих процессов до четвертого порядка по параметру V_{12}/U был построен эффективный гамильтониан ПМА, описывающий отмеченные выше обменные взаимодействия в металлической фазе. Этот гамильтониан использован ниже для вычисления спектра ТФ в скошенной фазе металлических АФМ.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН АФМ-ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

Гамильтониан ПМА в представлении операторов рождения $c_{k\sigma}^+$ (d_f^+) и уничтожения $c_{k\sigma}$ (d_f) коллективизированного (локализованного) электрона с квазиимпульсом k (с номером ячейки Ванье f) и проекцией спинного момента σ имеет вид

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} = & \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_\sigma - \mu) d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma} + \\ & + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{fk\sigma} \{ V_k e^{-ikf} c_{k\sigma}^+ d_{f\sigma} + \text{к.с.} \}. \end{aligned} \quad (1)$$

В этом выражении первая сумма описывает ансамбль невзаимодействующих электронов проводимости, находящихся во внешнем магнитном поле H , снимающем вырождение затравочного энергетического спектра ε_k по значению проекции спинного момента $\sigma = +1/2, -1/2$: $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - 2\sigma\mu_B H$, μ_B – магнетон Бора. Второе слагаемое гамильтониана (1) учитывает наличие в рассматриваемых интерметаллидах локализованных f -электронных состояний с исходной энергией E_0 . В магнитном поле энергия этих состояний содержит добавку Зеемана $E_\sigma = E_0 - g\sigma\mu_B H$, зависящую от g -фактора. Появление в рассмотренных операторных выражениях химического потенциала μ обусловлено использованием в дальнейшем усреднения по большому каноническому ансамблю. Оператор кулоновского взаимодействия двух электронов, находящихся в локализованных на ячейке f состояниях и обладающих противоположными значениями проекции спинных моментов, отражен третьим слагаемым гамильтониана ПМА, в котором $\hat{n}_{f\sigma} = c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$ – оператор числа f -электронов с проекцией спинного момента σ , U – энергия хаббардовского отталкивания. Наконец, последний член выражения (1) описывает гибридационные процессы коллективизированных и локализованных электронов, интенсивность которых определяется матричным элементом V_k .

В дальнейшем ограничимся рассмотрением режима сильных корреляций, считая, что локализованный уровень E_0 находится в пределах нижней половины зоны проводимости, а $E_0 + U$ – выше потолка зоны проводимости. Если $U \gg |V_k|$, то введение атомного представления для локализованных состояний f -ионов позволяет отделить высокоэнергетические процессы гибридазации от низкоэнергетических. К первым относятся процессы, при которых происходят переходы f -ионов

в двоечные состояния, энергия которых определяется большой величиной U . Учет таких забросов по теории возмущений приводит к эффективному гамильтониану, включающему обменную связь спиновых моментов коллективизированных и локализованных электронов, а также обменное взаимодействие между спиновыми моментами f -ионов [22]. В результате получается, что описание физических свойств ТФ-АФМ-интерметаллидов реализуется в рамках модифицированного гамильтониана Андерсона, имеющего в представлении Ванье следующий вид:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - 2\sigma\mu_B H - \mu) c_{f\sigma}^+ c_{f\sigma} + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} c_{f\sigma}^+ c_{f'\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_\sigma - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}, \quad (2)$$

где

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} = \sum_{ff'\sigma} \{V_{ff'} c_{f\sigma}^+ X_{f'}^{0\sigma} + \text{к.с.}\}, \quad \widehat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} = \sum_{ff'} J_{ff'} (\vec{S}_f \vec{\sigma}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\vec{S}_f \vec{S}_{f'}).$$

В этих выражениях $\varepsilon_\sigma = \varepsilon - 2\sigma\mu_B H$ – диагональная часть энергии коллективизированного состояния в представлении Ванье в магнитном поле, ε – затравочный уровень отмеченной энергии, $t_{ff'}$ – матричные элементы, отражающие интенсивность перескоков коллективизированных электронов с узла f на узел f' и связанные посредством обычного фурье-преобразования с энергией ε_k . Описание состояний f -ионов осуществляется в атомном представлении с помощью операторов Хаббарда: $X_f^{m,n} = |m\rangle\langle n|$. При $n = 0$ вектор $|n\rangle$ описывает состояние без электронов, а при $n = \sigma$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) – одноэлектронное состояние с проекцией спинового момента σ . Состояния с двумя f -электронами на узел не участвуют в формировании гильбертова пространства эффективного гамильтониана (2), поскольку процессы с участием двоечных состояний учтены по теории возмущений. С этим обстоятельством и связано наличие в формуле (2) слагаемого $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}$, которое учитывает s – f -обменное взаимодействие между спиновыми моментами локализованных и коллективизированных электронов, а также обменное взаимодействие в локализованной подсистеме с обменными интегралами $J_{ff'}$ и $I_{ff'}$ соответственно. Поведение этих интегралов при изменении гибридизации и расстояния между узлами решетки проанализировано в работе [22]. По указанной выше причине оператор $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}}$ учитывает только низкоэнергетические гибридизационные процессы между локализованными и коллективизированными состояниями с параметром гибридизации $V_{ff'}$.

Компоненты локализованных квазиспиновых операторов $\vec{S}_f$ связаны с операторами Хаббарда посредством следующих выражений:

$$\begin{aligned} S_f^x &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\bar{\sigma}}, & S_f^y &= i \sum_{\sigma} \sigma X_f^{\bar{\sigma}\sigma}, & S_f^z &= \sum_{\sigma} \sigma X_f^{\sigma\sigma}, \\ S_f^+ &= X_f^{\uparrow\downarrow}, & S_f^- &= X_f^{\downarrow\uparrow}, & \bar{\sigma} &= -\sigma. \end{aligned} \quad (3)$$

Для коллективизированных состояний используется обычная связь компонентов оператора спина с операторами Ферми:

$$\sigma_f^x = \frac{c_{f\uparrow}^+ c_{f\downarrow} + c_{f\downarrow}^+ c_{f\uparrow}}{2}, \quad \sigma_f^y = \frac{c_{f\uparrow}^+ c_{f\downarrow} - c_{f\downarrow}^+ c_{f\uparrow}}{2i}, \quad \sigma_f^z = \frac{c_{f\uparrow}^+ c_{f\uparrow} - c_{f\downarrow}^+ c_{f\downarrow}}{2}.$$

При описании скошенной АФМ-фазы введем, как обычно, две подрешетки F и G . В дальнейшем индексами f будем обозначать узлы, принадлежащие F -подрешетке, а индексом g — узлы, относящиеся к G -подрешетке. Тогда гамильтониан, описывающий невзаимодействующие коллективизированные и локализованные электроны, можно записать в виде

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_0 = & \sum_{f\sigma} (\varepsilon_\sigma - \mu) c_{f\sigma}^+ c_{f\sigma} + \sum_{g\sigma} (\varepsilon_\sigma - \mu) a_{g\sigma}^+ a_{g\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_\sigma - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{g\sigma} (E_\sigma - \mu) X_g^{\sigma\sigma} + \\ & + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} c_{f\sigma}^+ c_{f'\sigma} + \sum_{gg'\sigma} t_{gg'} a_{g\sigma}^+ a_{g'\sigma} + \sum_{fg\sigma} t_{fg} (a_{g\sigma}^+ c_{f\sigma} + c_{f\sigma}^+ a_{g\sigma}). \end{aligned} \quad (4)$$

В этом выражении операторы рождения (уничтожения) электронов проводимости, относящиеся к G -подрешетке, переобозначены посредством a_g^+ (a_g). Для операторов из F -подрешетки оставлены прежние обозначения. Третье и четвертое слагаемые выражения (4) отражают вклады локализованных состояний из подрешеток F и G соответственно. Пятое (шестое) слагаемое описывает перескоки электронов проводимости внутри подрешетки F (G), а седьмое слагаемое — между подрешетками.

Слагаемое гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}}$ в двухподрешеточном описании целесообразно представить следующим образом:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} = \sum_{fg\sigma} (W_{fg} c_{f\sigma}^+ X_g^{0\sigma} + W_{gf} a_{g\sigma}^+ X_f^{0\sigma}) + \sum_{ff'\sigma} V_{ff'} c_{f\sigma}^+ X_{f'}^{0\sigma} + \sum_{gg'\sigma} V_{gg'} a_{g\sigma}^+ X_{g'}^{0\sigma} + \{\text{к.с.}\}. \quad (5)$$

Здесь первая сумма описывает гибридизационные процессы между состояниями из разных подрешеток. Для описания интенсивности таких процессов введено новое обозначение W_{fg} . Гибридизационные процессы в пределах одной подрешетки отражены вторым и третьим слагаемыми с использованием прежних обозначений для матричных элементов.

Обменная часть гамильтониана после разбиения на подрешетки можно записать как

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} = & \sum_{ff'} J_{ff'} (\vec{S}_f \vec{\sigma}_{f'}) + \sum_{gg'} J_{gg'} (\vec{S}_g \vec{\sigma}_{g'}) + \sum_{fg} L_{fg} (\vec{S}_f \vec{\sigma}_g + \vec{S}_g \vec{\sigma}_f) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\vec{S}_f \vec{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\vec{S}_g \vec{S}_{g'}) + \sum_{fg} K_{fg} (\vec{S}_f \vec{S}_g). \end{aligned} \quad (6)$$

Как и в предыдущих выражениях, для взаимодействий из одной подрешетки использованы старые обозначения. Матричные элементы для s - f -обменного взаимодействия из разных подрешеток обозначены иначе: L_{fg} . По другому обозначены и обменные интегралы между локализованными спиновыми моментами из разных подрешеток: K_{fg} . Необходимость подобных изменений станет ясной из дальнейшего изложения.

3. УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГАМИЛЬТОНИАНА ДЛЯ СКОШЕННОЙ ФАЗЫ. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ УГЛОВ НАПРАВЛЕНИЙ РАВНОВЕСНЫХ НАМАГНИЧЕННОСТЕЙ

Учитывая, что во внешнем магнитном поле в АФМ-фазе происходит скос магнитных подрешеток (см. рис. 1), введем четыре локальные системы координат таким образом, чтобы их оси квантования (новые оси Oz) совпадали по направлениям с направлениями равновесных намагниченностей $\vec{R}_F$, $\vec{R}_G$ локализованных и $\vec{m}_F$, $\vec{m}_G$ коллективизированных электронов в подрешетках F и G . Следует подчеркнуть, что в рассматриваемой неколлинеарной геометрии ориентация векторов намагниченностей подрешеток коллективизированных электронов $\vec{m}_F$ ($\vec{m}_G$) не обязательно параллельна либо антипараллельна вектору $\vec{R}_F$ ($\vec{R}_G$). Пренебрегать же влиянием скоса магнитных моментов коллективизированной подсистемы нельзя, поскольку, как показывает численный анализ, это может привести, например, к отрицательным значениям теплоемкости. Переход к локальным осям осуществляется посредством поворотов вокруг оси Oy исходных систем координат для каждой из четырех магнитных подсистем на углы θ , $-\theta$, φ и $-\varphi$. Предполагается, что угол θ ($-\theta$) характеризует отклонение от исходной оси Oz в плоскости Oxz направления локализованной намагниченности в подрешетке F (G). Аналогично угол φ ($-\varphi$) определяет ориентацию коллективизированной намагниченности в подрешетке F (G). Отмеченному переходу к локальным осям соответствует проведение следующего унитарного преобразования гамильтониана:

$$\widehat{\mathcal{H}} \rightarrow \widetilde{\mathcal{H}} = U(\theta, \varphi) \cdot \widehat{\mathcal{H}} \cdot U^+(\theta, \varphi), \quad (7)$$

где унитарный оператор определяется выражением

$$U(\theta, \varphi) = \prod_f \prod_g \exp\{i(\theta S_f^y + \varphi \sigma_f^y)\} \exp\{-i(\theta S_g^y + \varphi \sigma_g^y)\}. \quad (8)$$

Рис. 1. Направления векторов намагниченностей в скошенной фазе. Магнитное поле направлено вдоль оси z .

Используя выражение (8), находим законы преобразования для операторов, относящихся к подрешетке F :

$$\begin{aligned} c_{f\sigma}(\varphi) &= U c_{f\sigma} U^+ = c_{f\sigma} \cos \frac{\varphi}{2} - 2\sigma c_{f\bar{\sigma}} \sin \frac{\varphi}{2}, \\ X_f^{0\sigma}(\theta) &= U X_f^{0\sigma} U^+ = X_f^{0\sigma} \cos \frac{\theta}{2} - 2\sigma X_f^{0\bar{\sigma}} \sin \frac{\theta}{2}, \\ X_f^{\sigma\sigma}(\theta) &= U X_f^{\sigma\sigma} U^+ = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} X_f^{\sigma_1\sigma_1} - \sigma \sin \theta \sum_{\sigma_1} X_f^{\sigma_1\bar{\sigma}_1} + 2\sigma \cos \theta \sum_{\sigma_1} \sigma_1 X_f^{\sigma_1\sigma_1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Спиновые операторы локализованных электронов из подрешетки F преобразуются следующим образом:

$$\begin{aligned} S_f^x(\theta) &\equiv U S_f^x U^+ = S_f^x \cos \theta + S_f^z \sin \theta, & \sigma_f^x(\varphi) &\equiv U \sigma_f^x U^+ = \sigma_f^x \cos \varphi + \sigma_f^z \sin \varphi, \\ S_f^y(\theta) &\equiv U S_f^y U^+ = S_f^y, & \sigma_f^y(\varphi) &\equiv U \sigma_f^y U^+ = \sigma_f^y, \\ S_f^z(\theta) &\equiv U S_f^z U^+ = S_f^z \cos \theta - S_f^x \sin \theta, & \sigma_f^z(\varphi) &\equiv U \sigma_f^z U^+ = \sigma_f^z \cos \varphi - \sigma_f^x \sin \varphi. \end{aligned} \quad (10)$$

Законы преобразования для операторов $a_{g\sigma}$, $X_g^{0\sigma}$, $X_g^{\sigma\sigma}$, $\vec{S}_g$ и $\vec{\sigma}_g$ из подрешетки G получаются из уравнений (9) и (10), если в них заменить индексы f на g , а углы θ и φ на $-\theta$ и на $-\varphi$.

С учетом формул (9) и (10) находим слагаемые преобразованного гамильтониана:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{k\sigma} (t_k - 2\sigma\mu_B H \cos \varphi - \mu) (c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}) - 2\mu_B H \sin \varphi \left(\sum_g \sigma_g^x - \sum_f \sigma_f^x \right) + \\ &+ \sum_{k\sigma} [\Gamma_k \cos \varphi (c_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + a_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}) + \Gamma_k 2\sigma \sin \varphi (c_{k\sigma}^+ a_{k\bar{\sigma}} + a_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k\sigma})] + \\ &+ (E_0 - \mu - g\sigma\mu_B H \cos \theta) \left(\sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{g\sigma} X_g^{\sigma\sigma} \right) + \\ &+ g\mu_B H \sin \theta \left(\sum_f S_f^x - \sum_g S_g^x \right). \end{aligned} \quad (11)$$

При записи кинетической энергии реализован переход в представление квазиимпульса, причем зона Бриллюэна определена с учетом двухподрешеточной структуры. Соответственно этому образы Фурье интегралов перескока разделяются на внутри- и межподрешеточные:

$$t_{ff'} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-f')} t_k, \quad t_{fg} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-g)} \Gamma_k, \quad (12)$$

где N – число узлов в подрешетке.

Оператор (5) после унитарного преобразования (7) принимает вид

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} = & \sum_{fg\sigma} \left\{ W_{fg} \left[c_{f\sigma}^+ X_g^{0\sigma} \cos\left(\frac{\varphi + \theta}{2}\right) + 2\sigma c_{f\sigma}^+ X_g^{0\bar{\sigma}} \sin\left(\frac{\varphi + \theta}{2}\right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + a_{g\sigma}^+ X_f^{0\sigma} \cos\left(\frac{\varphi + \theta}{2}\right) - 2\sigma a_{g\sigma}^+ X_f^{0\bar{\sigma}} \sin\left(\frac{\varphi + \theta}{2}\right) \right] + \text{к.с.} \right\} + \\ & + \sum_{ff'\sigma} V_{ff'} \left[c_{f'\sigma}^+ X_f^{0\sigma} \cos\left(\frac{\varphi - \theta}{2}\right) + 2\sigma c_{f'\sigma}^+ X_f^{0\bar{\sigma}} \sin\left(\frac{\varphi - \theta}{2}\right) + \text{к.с.} \right] + \\ & + \sum_{gg'\sigma} V_{gg'} \left[a_{g'\sigma}^+ X_g^{0\sigma} \cos\left(\frac{\varphi - \theta}{2}\right) - 2\sigma a_{g'\sigma}^+ X_g^{0\bar{\sigma}} \sin\left(\frac{\varphi - \theta}{2}\right) + \text{к.с.} \right]. \quad (13) \end{aligned}$$

Для обменной части гамильтониана получаем

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} = & \sum_{ff'} J_{ff'} [S_f^y \sigma_{f'}^y + (S_f^x \sigma_{f'}^x + S_f^z \sigma_{f'}^z) \cos(\varphi - \theta) + (S_f^x \sigma_{f'}^z - S_f^z \sigma_{f'}^x) \sin(\varphi - \theta)] + \\ & + \sum_{gg'} J_{gg'} [S_g^y \sigma_{g'}^y + (S_g^x \sigma_{g'}^x + S_g^z \sigma_{g'}^z) \cos(\varphi - \theta) - (S_g^x \sigma_{g'}^z - S_g^z \sigma_{g'}^x) \sin(\varphi - \theta)] + \\ & + \sum_{fg} L_{fg} [S_f^y \sigma_g^y + (S_f^x \sigma_g^x + S_f^z \sigma_g^z) \cos(\varphi + \theta) + (S_f^x \sigma_g^z - S_f^z \sigma_g^x) \sin(\varphi + \theta) + \\ & + S_g^y \sigma_f^y + (S_g^x \sigma_f^x + S_g^z \sigma_f^z) \cos(\varphi + \theta) - (S_g^x \sigma_f^z - S_g^z \sigma_f^x) \sin(\varphi + \theta)] - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\vec{S}_f \vec{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\vec{S}_g \vec{S}_{g'}) + \\ & + \sum_{fg} K_{fg} [(S_g^x \sigma_f^x + S_g^z \sigma_f^z) \cos 2\theta + (S_g^x \sigma_f^z - S_g^z \sigma_f^x) \sin 2\theta + S_f^y \sigma_g^y]. \quad (14) \end{aligned}$$

Уравнения для равновесных значений углов θ и φ получим в приближении, когда спин-флуктуационные вклады считаются пренебрежимо малыми. Поскольку в локальных координатных системах векторы равновесных намагниченностей должны быть ориентированы вдоль своих осей квантования, то в рассматриваемом приближении требование обращения в нуль линейных по операторам $S_f^x, S_g^x, \sigma_f^x, \sigma_g^x$ выражений приводит к системе уравнений

$$\begin{aligned} 2\mu_B H \sin \varphi - R(J_0 \sin(\varphi - \theta) + L_0 \sin(\varphi + \theta)) &= 0, \\ g\mu_B H \sin \theta + m(J_0 \sin(\varphi - \theta) - L_0 \sin(\varphi + \theta)) - RK_0 \sin 2\theta &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь введены следующие обозначения: $R = \langle S_f^z \rangle = \langle S_g^z \rangle$ и $m = \langle \sigma_f^z \rangle = \langle \sigma_g^z \rangle$, I_0 — образ Фурье обменного интеграла при $q = 0$. Аналогичный смысл имеют величины K_0 , J_0 и L_0 .

Система уравнений (15) имеет тривиальное решение: $\theta = 0$, $\varphi = 0, \pi$, соответствующее состоянию, когда локализованные намагниченности подрешеток F и G ориентированы вдоль исходной оси Oz (для АФМ это происходит в сильных магнитных полях); при этом вектор намагниченности коллективизированных электронов

ориентирован параллельно ($\varphi = 0$) либо антипараллельно ($\varphi = \pi$) локализованной намагнитченности.

При $\theta \neq 0$ решение системы (15) сводится к нахождению решений одного уравнения:

$$(g\mu_B H - 2K_0 R \cos \theta) [R^2 (J_0 - L_0)^2 \sin^2 \theta + ((J_0 + L_0) R \cos \theta - 2\mu_B H)^2] = \\ = m^2 [4J_0 L_0 R \cos \theta - 2\mu_B H (J_0 + L_0)]^2, \quad (16)$$

определяющего равновесный угол θ . При этом угол φ вычисляется через найденный θ следующим образом:

$$\text{ctg } \varphi = \frac{2\mu_B H - R(J_0 + L_0) \cos \theta}{R(L_0 - J_0) \sin \theta}. \quad (17)$$

4. СЛЕЙВ-БОЗОННОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И КВАДРАТИЧНАЯ ФОРМА ФЕРМИОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

Для нахождения спектра возбуждений Ферми в приближении, игнорирующем процессы релаксации, как известно, можно воспользоваться представлением вспомогательных (слейв) бозонов для операторов Хаббарда [10]. Это представление оказалось весьма эффективным для понимания природы формирования ТФ в немагнитных интерметаллидах. Для двухподрешеточного случая представление записывается в виде

$$X_f^{0\sigma} = e_f^+ d_{f\sigma}, \quad X_f^{\sigma_1\sigma_2} = d_{f\sigma_1}^+ d_{f\sigma_2}, \quad X_g^{0\sigma} = e_g^+ b_{g\sigma}, \quad X_g^{\sigma_1\sigma_2} = b_{g\sigma_1}^+ b_{g\sigma_2}, \quad (18)$$

где операторы Бозе e_f^+ (e_f) порождают (уничтожают) состояние без электронов на узле f , а операторы рождения (уничтожения) локализованных электронов на узлах f и g обозначены соответственно как $d_{f\sigma}^+$ ($d_{f\sigma}$) и $b_{g\sigma}^+$ ($b_{g\sigma}$). Исключение нефизических состояний достигается посредством констрейна:

$$e_f^+ e_f + \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma} = 1, \quad e_g^+ e_g + \sum_{\sigma} b_{g\sigma}^+ b_{g\sigma} = 1. \quad (19)$$

В среднеполевом подходе совокупность локальных констрейнов заменяется на глобальный. При этом считается, что слейв-бозоны образуют конденсатную фазу, а операторы Бозе могут быть заменены их средними значениями $e_0 = \langle e_f^+ \rangle = \langle e_f \rangle = \langle e_g^+ \rangle = \langle e_g \rangle$, как это имеет место в теории слабо неидеальной бозе-жидкости для бозонов с нулевым значением квазиимпульса. Соответственно сказанному, введенные ограничения принимают вид

$$e_0^2 + \sum_{\sigma} n_{f\sigma} = 1, \quad e_0^2 + \sum_{\sigma} n_{g\sigma} = 1, \quad (20)$$

где $n_{f\sigma} = n_{g\sigma}$ — число локализованных электронов со спином σ в расчете на один узел решетки. В дальнейшем, как это обычно делается, условие (20) учитывается посредством введения неопределенного множителя Лагранжа λ .

Введем двухкомпонентные операторы в квазиимпульсном представлении

$$c_k^+ \equiv (c_{k\uparrow}^+, c_{k\downarrow}^+), \quad a_k^+ \equiv (a_{k\uparrow}^+, a_{k\downarrow}^+), \quad b_k^+ \equiv (b_{k\uparrow}^+, b_{k\downarrow}^+), \quad d_k^+ \equiv (d_{k\uparrow}^+, d_{k\downarrow}^+) \quad (21)$$

и составим блочный оператор $A_k^+ = (c_k^+, a_k^+, b_k^+, d_k^+)$. Тогда гамильтониан запишется в виде

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k A_k^+ \widehat{M}_k(\varphi, \theta) A_k + R^2 N (I_0 - K_0 \cos 2\theta) - 2NRmh_z + 2\lambda N(e_0^2 - 1), \quad (22)$$

где восьмимерная матрица $\widehat{M}_k(\varphi, \theta)$ в блочном виде определяется следующим образом

$$\widehat{M}_k(\varphi, \theta) = \begin{pmatrix} \widehat{T}_k & \widehat{\Gamma}_k(\varphi) & \widehat{W}_k(\varphi + \theta) & \widehat{V}_k(\varphi - \theta) \\ \widetilde{\widehat{\Gamma}}_k(\varphi) & \widehat{T}_k & \widetilde{\widehat{V}}_k(\varphi - \theta) & \widetilde{\widehat{W}}_k(\varphi + \theta) \\ \widetilde{\widehat{W}}_k^*(\varphi + \theta) & \widehat{V}_k^*(\varphi - \theta) & \widehat{L} & 0 \\ \widetilde{\widehat{V}}_k^*(\varphi - \theta) & \widehat{W}_k^*(\varphi + \theta) & 0 & \widehat{L} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Здесь знак тильды означает транспонирование, а звездочка – эрмитово сопряжение. Входящие в $\widehat{M}_k(\varphi, \theta)$ матрицы второго порядка задаются выражениями

$$\begin{aligned} \widehat{\Gamma}_k(\varphi) &= \Gamma_k \widehat{P}(\varphi), & \widehat{W}_k(\varphi + \theta) &= e_0 W_k \widehat{P}\left(\frac{\varphi + \theta}{2}\right), \\ \widehat{V}_k(\varphi - \theta) &= e_0 V_k \widehat{P}\left(\frac{\varphi - \theta}{2}\right), & \widehat{P}(\chi) &= \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi \\ -\sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix}, \\ \widehat{T}_k &= \begin{pmatrix} \xi_k - \frac{\bar{H}_c}{2} & 0 \\ 0 & \xi_k + \frac{\bar{H}_c}{2} \end{pmatrix}, & \widehat{L} &= \begin{pmatrix} \zeta - \frac{\bar{H}_d}{2} & 0 \\ 0 & \zeta + \frac{\bar{H}_d}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

в которых $\xi_k = t_k - \mu$, $\zeta = E_0 - \mu + \lambda$, а $\bar{H}_c = 2\mu_B H \cos \varphi - R h_z$ и $\bar{H}_d = g\mu_B H \cos \theta - m h_z - R(K_0 \cos 2\theta - I_0)$ задают эффективные поля, действующие на спиновые переменные, для коллективизированной и локализованной подсистемы соответственно. При этом $h_z = J_0 \cos(\varphi - \theta) + L_0 \cos(\varphi + \theta)$. Функции V_k и W_k определены через преобразование Фурье внутри- и междоузельных параметров гибридизации в представлении Ванье:

$$V_k = \sum_{f-f'} e^{-ik(f-f')} V(f-f'), \quad W_k = \sum_{f-g} e^{-ik(f-g)} W(f-g).$$

Ренормировка энергии локализованного уровня за счет аддитивного сдвига на множитель Лагранжа является обычной при использовании слеив-бозонного описания ТФ [10]. С использованием этого представления связано также появление последнего слагаемого в уравнении (22).

Из представленной структуры гамильтониана следует, что неколлинеарность задачи за счет гибридизационных процессов между коллективизированными и локализованными электронами приводит к смешиванию состояний из различных спиновых подзон. Это определяет сильную зависимость электронных характеристик системы при наложении внешнего магнитного поля, изменяющего ориентацию магнитных подрешеток и модулирующего вследствие этого интенсивность гибридизационных процессов смешивания электронных подсистем. Дальнейшее решение задачи связано с диагонализацией формы восьмого порядка и вычислением самосогласованных полей и ренормировочных параметров λ и e_0 .

5. ФУНКЦИИ ГРИНА И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Для нахождения спектра и термодинамических средних воспользуемся методом двухвременных запаздывающих функций Грина [23]. Введя векторную функцию

$$\langle\langle A_k(t) | c_{k\sigma}^+(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[A_k(t), c_{k\sigma}^+(t')]_+\rangle, \quad (24)$$

запишем для нее уравнение движения в (k, ω) -представлении:

$$(\omega \cdot \hat{I} - \widehat{M}_k(\varphi, \theta))\langle\langle A_k | c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = B_\sigma, \quad (25)$$

где $B_\sigma = \langle\{A_k, c_{k\sigma}^+\}_+\rangle$, а $\hat{I}$ – восьмимерная единичная матрица. Существенное упрощение задачи достигается посредством применения унитарного преобразования $\widehat{U}_8$:

$$\widehat{U}_8 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{\eta}_1 & \hat{\eta}_1^* & \hat{\eta}_1^* & -\hat{\eta}_1 \\ \hat{\eta}_1^* & \hat{\eta}_1 & -\hat{\eta}_1 & \hat{\eta}_1^* \\ \hat{\eta}_2^* & \hat{\eta}_2 & -\hat{\eta}_2 & \hat{\eta}_2^* \\ \hat{\eta}_2 & \hat{\eta}_2^* & \hat{\eta}_2^* & -\hat{\eta}_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\eta}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\eta}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad (26)$$

в результате которого матрица 8-го порядка из уравнения (25) сводится к матрице, имеющей блочно-диагональный вид:

$$\widehat{U}_8^+ \cdot (\omega \cdot \hat{I} - \widehat{M}_k(\varphi, \theta)) \cdot \widehat{U}_8 = \begin{pmatrix} \widehat{M}_{k,+1/2}^{(4)} & 0 \\ 0 & \widehat{M}_{k,-1/2}^{(4)} \end{pmatrix}, \quad \widehat{M}_{k,s}^{(4)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Omega}_s^{(2)} & \widehat{H}_s^{(2)} \\ (\widehat{H}_s^{(2)})^\dagger & \widehat{\Omega}_{-s}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Матрицы второго порядка, через которые выражены $M_{k,s}^{(4)}$, записываются следующим образом ($s = \pm 1/2$):

$$\widehat{\Omega}_s^{(2)} = \begin{pmatrix} \omega - \xi_k & -e_0 V_k e^{is(\varphi-\theta)} \\ -e_0 V_k^* e^{-is(\varphi-\theta)} & \omega - \zeta \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$\widehat{H}_s^{(2)} = \begin{pmatrix} s\bar{H}_c - \Gamma_k e^{i2s\varphi} & -e_0 W_k e^{is(\varphi+\theta)} \\ -e_0 W_k^* e^{is(\varphi+\theta)} & s\bar{H}_d \end{pmatrix}.$$

При этом нахождение спектра сводится к решению двух дисперсионных уравнений

$$\begin{aligned}
 D_{k,s}^{(4)}(\omega) = & \left[(\omega - \zeta)^2 - \frac{\bar{H}_d^2}{4} \right] \left[(\omega - \xi_k)^2 - \Gamma_k^2 - \frac{\bar{H}_c^2}{4} + 2s\bar{H}_c\Gamma_k \cos \varphi \right] + \\
 & + 2(\omega - \zeta) [u_k^2(s\bar{H}_c \cos \varphi - \Gamma_k) - v_k^2(\omega - \xi_k)] - u_k^4 + v_k^4 + \\
 & + \bar{H}_d \left[2s \cos \theta (u_k^2(\omega - \xi_k) + v_k^2\Gamma_k) - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \bar{H}_c (|\widetilde{W}_k|^2 \cos(\varphi + \theta) + |\widetilde{V}_k|^2 \cos(\varphi - \theta)) \right] = 0
 \end{aligned} \quad (29)$$

для каждого значения квантового числа s . Здесь были использованы обозначения

$$v_k^2 = |\widetilde{V}_k|^2 + |\widetilde{W}_k|^2, \quad u_k^2 = \widetilde{V}_k^* \widetilde{W}_k + \widetilde{V}_k \widetilde{W}_k^*, \quad \widetilde{V}_k = e_0 V_k, \quad \widetilde{W}_k = e_0 W_k. \quad (30)$$

В предельном случае $V_k = W_k = 0$ дисперсионное уравнение принимает очевидную форму

$$\left[(\omega - \zeta)^2 - \frac{\bar{H}_d^2}{4} \right] \left[(\omega - \xi_k)^2 - \Gamma_k^2 - \frac{\bar{H}_c^2}{4} + 2s\bar{H}_c\Gamma_k \cos \varphi \right] = 0. \quad (31)$$

Получающиеся из него решения

$$\omega = \zeta \pm s\bar{H}_d, \quad \omega = \xi_k \pm \sqrt{\Gamma_k^2 + \frac{\bar{H}_c^2}{4} - 2s\bar{H}_c\Gamma_k \cos \varphi} \quad (32)$$

описывают локализованный уровень и зонный спектр коллективизированных электронов, находящихся в модулированном АФМ-структурой поле, расщепленные по спиновой переменной s эффективными полями $\bar{H}_c$ и $\bar{H}_d$.

6. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Для термодинамического описания системы необходимо воспользоваться семью уравнениями самосогласования. Первые пять уравнений определяют: 1 – химический потенциал μ при заданной концентрации электронов n ; 2 – множитель Лагранжа λ ; 3 – среднее число вспомогательных бозонов e_0 ; 4 и 5 – равновесные значения намагниченностей локализованной (R) и коллективизированной (m) подсистем. Их можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 n = \frac{2}{N} \left(\sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle + \sum_{k\sigma} \langle d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} \rangle \right), \quad -2\lambda e_0^2 = \frac{1}{N} \sum_k [\langle c_k^+ (\widehat{W}_k b_k + \widehat{V}_k d_k) \rangle + \text{к.с.}], \\
 e_0^2 = 1 - \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} \rangle, \quad R = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} \rangle, \quad m = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle.
 \end{aligned} \quad (33)$$

Два уравнения для углов скоса магнитных подрешеток φ и θ записаны ранее (15). При получении этих выражений использовалась эквивалентность подрешеток F и G .

Применяя спектральную теорему, в частности, получаем

$$\langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 \left\{ \frac{A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, E_{k\bar{\sigma}}^{(j)}) f(E_{k\bar{\sigma}}^{(j)} - \mu)}{\prod_l' (E_{k\bar{\sigma}}^{(j)} - E_{k\bar{\sigma}}^{(l)})} + \frac{B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, E_{k\sigma}^{(j)}) f(E_{k\sigma}^{(j)} - \mu)}{\prod_l' (E_{k\sigma}^{(j)} - E_{k\sigma}^{(l)})} \right\}. \quad (34)$$

Энергии $E_{k\sigma}^{(j)}$, $j = 1, \dots, 4$, при фиксированном значении σ являются решениями дисперсионного уравнения (29). Штрих у знака произведения в знаменателях в формуле (34) означает отсутствие сомножителя с $l = j$. Выражения для функций $A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, E_{k\bar{\sigma}}^{(j)})$ и $B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, E_{k\sigma}^{(j)})$ приведены в приложении. Вычисление других корреляционных функций, входящих в уравнения самосогласования, производится аналогично. После подстановки корреляционных функций (см. приложение), входящих в уравнения самосогласования, получаем замкнутые уравнения, описывающие термодинамические свойства ТФ-АФМ во внешнем магнитном поле.

7. ВЛИЯНИЕ СКОСА МАГНИТНЫХ ПОДРЕШЕТОК НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ТФ

При численных расчетах предполагалось, что атомное упорядочение соответствует объемноцентрированной кубической решетке, а энергетическая структура зонных электронов формируется за счет перескоков электронов только между ближайшими соседями. Интенсивность перескока обозначается посредством параметра t' . В этом случае фурье-образ, соответствующий перескокам внутри одной подрешетки, равен нулю ($t_k = 0$), а фурье-образ межподрешеточных параметров перескока описывается выражением

$$\Gamma_k = 8t' \cos\left(\frac{k_x b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z b}{2}\right), \quad (35)$$

b – параметр магнитной ячейки. Для упрощения считалось также, что гибридизационные и s – f -обменные процессы между f - и s -состояниями электронов реализуются только в том случае, если эти состояния принадлежат одной и той же ячейке Ванье. Тогда $V_q = V$, $W_q = 0$, $J_q = J$, $L_q = 0$, где V и J – значения параметра гибридизации и s – f -обменного интеграла соответственно. Обменное взаимодействие в подсистеме локализованных электронов учитывалось только между ближайшими спиновыми моментами. Таким образом, $I_q = 0$, а $K_q = 8K_1 \cos(q_x b/2) \cos(q_y b/2) \cos(q_z b/2)$, где K_1 – обменный интеграл для ближайших соседей. В дальнейшем все энергетические параметры будут измеряться в единицах $|t'|$, $t' < 0$.

Анализ решений системы уравнений самосогласования начнем со случая $H = 0$. На рис. 2 показана структура исходного спектра Ферми в коллинеарной АФМ-фазе без учета процессов гибридизации. На правой стороне рис. 2 показана зависимость энергии от квазиимпульса $E_{ks}^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$, для $s = +1/2$, а на левой – для $s = -1/2$. Видно, что все четыре ветви спектра вырождены по значению квантового числа s (левые и правые ветви рисунка идентичны). Удвоение связано с АФМ-структурой,

Рис. 2. Исходная зонная структура ПМА в АФМ-фазе при $H = 0$ и $V = 0$.

при которой происходит двукратное уменьшение зоны Бриллюэна и соответствующее увеличение числа ветвей по сравнению с парамагнитным случаем. Изменение квазиимпульса выбрано вдоль направления $[111]$. Для других направлений качественная картина идентична. Прямые линии соответствуют расщепленным обменным полем $\bar{H}_d$ локализованным состояниям f -подсистемы с энергией E_0 . Дисперсные линии отражают затравочный спектр коллективизированных электронов для АФМ-фазы.

В дальнейшем также ограничимся рассмотрением ситуации, когда локализованный уровень находится в нижней половине зоны проводимости (см. рис. 2), а химический потенциал расположен в его непосредственной окрестности (режим ТФ). Поскольку эффективное поле $\bar{H}_d$, определяющее энергию расщепления f -состояний, много меньше ширины зоны проводимости, то главные изменения энергетического спектра при включении гибридизационных процессов и скосе магнитных подрешеток происходят в непосредственной окрестности энергии E_0 . Имея это в виду, при демонстрации результатов самосогласованного расчета будем акцентировать внимание только на модификации спектра Ферми в отмеченной энергетической области. Следует заметить также, что при выбранном значении химического потенциала самые верхние ветви спектра при $j = 4$ не дают вклада в термодинамические свойства системы.

На рис. 3а для АФМ-фазы ($H = 0$) показан спектр квазичастиц, вычисленный в окрестности локализованного уровня. Расчеты производились при следующих значениях параметров модели: $E_0 = -4$, $V = 0.4$, $K_0 = 0.02$, $J_0 = 0.5$, $n = 2.2$. Температура $T = 1$ К. Самосогласованное значение магнитного момента при выбранных параметрах оказалось равным $R = 0.381$. Главная особенность полученного спектра связана с появлением узкой зоны тяжелых квазичастиц, отделенной как снизу, так и сверху энергетическими щелями. Этим данный спектр отличается от спектра тяжелых квазичастиц в парамагнитной фазе, когда состояния тяжелых квазичастиц

Рис. 3. Температурная эволюция спектра Ферми (а, в, д) и плотности состояний локализованных электронов (б: $T = 1$ K, $R = 0.381$; г: $T = 21$ K, $R = 0.103$; е: $T = 23$ K, $R = 0$) для ПМА в коллинеарной АФМ-фазе ($H = 0$) в окрестности локализованного уровня E_0 . Штрих-пунктирной линией обозначено положение химического потенциала. На рис. б, г, е сплошная линия соответствует плотности состояний f -электронов $D_{f\uparrow}$, штриховая – $D_{f\downarrow}$. При заданных параметрах температура Нееля $T_N \approx 23$ K.

отделены энергетической щелью только с одной стороны. Максимальная ширина отщепленной зоны ТФ имеет порядок величины $\bar{H}_d$ и задается обменными параметрами, а также значениями магнитных моментов локализованной и коллективизированной подсистем.

На рис. 3б представлена плотность состояний $D_{f\sigma}(E)$ для локализованных электронов из подрешетки F по отдельности для каждого значения переменной σ , характеризующей проекцию спинового момента на ось квантования z'_F (см. рис. 1). Из сравнения рис. 3а и 3б видно, что горизонтальные участки спектра, сформированные в окрестности бывшего нижнего локализованного уровня, описывают в основном состояния f -электронов со спинами, направленными вдоль оси квантования z'_F ($\sigma = \uparrow$). Аналогично горизонтальные участки спектра из окрестности бывшего верхнего локализованного уровня относятся к состояниям f -электронов со спинowymi моментами, направленными против оси z'_F ($\sigma = \downarrow$). Поскольку положение химического потенциала μ таково, что заполненными оказываются главным образом f -состояния с $\sigma = \uparrow$, то основное состояние системы характеризуется дальним АФМ-порядком.

Температурная эволюция рассматриваемых дисперсионных кривых демонстрируется на рис. 3в–3е. Видно, что по мере увеличения температуры ширина узкой зоны уменьшается. При температуре порядка 19 К (температура Нееля T_N RuGa_3 равна 24 К [2]) узкая зона вырождается в уровень, а с дальнейшим увеличением температуры инвертируется (рис. 3в). В результате инверсии максимуму дисперсии узкой зоны ($E_{ks}^{(2)}$) соответствуют состояния из центра зоны Бриллюэна. Важно заметить, что, как и при $T = 1$ К, все еще сохраняется диспропорция в заполнении этих состояний локализованными электронами с разными проекциями спинового момента σ . Как видно из рис. 3г, для узкой зоны ($j = 2$) состояния с волновыми векторами k из центра зоны Бриллюэна по-прежнему относятся в основном к f -состояниям с $\sigma = \uparrow$, однако им соответствуют не самые низкие значения энергии $E_{ks}^{(2)}$, как на рис. 3а, а самые высокие. Для локализованных электронов с $\sigma = \downarrow$ максимум плотности состояний в данном случае приходится на дно узкой зоны. Очевидно, что в результате отмеченной инверсии $E_{ks}^{(2)}$ часть локализованных электронов со спином $\sigma = \uparrow$ перетечет в состояния с $\sigma = \downarrow$, а значение R уменьшится. По мере приближения температуры к T_N нижняя щель (между зонами с $j = 1$ и $j = 2$) уменьшается и обращается в нуль (рис. 3д), а верхняя (гибридизационная щель парафазы) остается. Переход в парамагнитную фазу при $T = T_N$ сопровождается выравниванием плотностей состояний f -электронов с разными проекциями спинового момента (на рис. 3е имеется только сплошная линия), что и приводит к обращению R в нуль.

При изменении параметра гибридизации, температуры или магнитного поля происходит модификация основного состояния рассматриваемой системы. При этом уравнения самосогласования в определенных областях фазовой диаграммы могут допускать несколько конкурирующих между собой решений. Выбор конкретного решения в качестве стабильной фазы осуществлялся на основе минимальности значения свободной энергии. Вывод этого термодинамического потенциала может быть основан на представлении (22) для гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$. В этом случае свободная

Рис. 4. Зависимости свободной энергии F (а) и параметра АФМ-порядка R (б) от величины гибридизации V для трех решений – одного парамагнитного (штриховая линия) и двух магнитных (сплошная и штрих-пунктирная линии).

энергия определяется выражением

$$F(T, V, N) = -T \sum_{j=1}^4 \sum_{ks} \ln \left(1 + \exp \left\{ -\frac{E_{ks}^{(j)} - \mu}{T} \right\} \right) - 2NRmh_z + R^2 N(I_0 - K_0 \cos 2\theta) + 2\lambda N(e_0^2 - 1) + \mu N, \quad (36)$$

где восемь ветвей спектра $E_{ks}^{(j)}$ находятся из решения дисперсионного уравнения (29).

В зависимости от величины параметра гибридизации меньшей энергией может обладать как магнитное, так и парамагнитное решение. На рис. 4 представлена именно такая ситуация. Расчеты проводились при следующих параметрах: $E_0 = -2$, $K_0 = 0.02$, $J_0 = 0.5$, $n = 2.8$, $T = 1$ К и $H = 0$. Из рис. 4а видно, что при величине гибридизации меньшей $V_c \approx 0.43$ самым низким значением свободной энергии обладает АФМ-решение с наибольшим R (см. рис. 4б). Однако при $V > V_c$ парамагнитное решение с $R = 0$ становится энергетически более выгодным. Описанная смена типа основного состояния демонстрирует разрушение дальнего АФМ-порядка в локализованной подсистеме при увеличении интенсивности процессов примешивания коллективизированных состояний.

В том случае, когда смены типа основного состояния при увеличении V не происходит, тем не менее наблюдается существенное подавление величины магнитного момента редкоземельного иона. Сказанное демонстрируется на рис. 5, при построении которого по сравнению с расчетом, представленным на рис. 4, были изменены два параметра: $E_0 = -4$ и $n = 2.2$, а остальные оставлены прежними. Видно, что при всех значениях V решение, описывающее дальний магнитный порядок, обладает меньшей энергией, чем парамагнитное решение. Однако величина магнитного момента R уменьшается с $R = 0.45$ (при $V = 0.1$) до $R = 0.06$ (при $V = 0.7$), достигая, таким образом, значения, экспериментально наблюдаемого во многих ТФ АФМ.

Рис. 5. Зависимости свободной энергии F (а) и параметра АФМ-порядка R (б) от величины гибридизации V для парамагнитного решения (штриховая линия) и АФМ-решения (сплошная линия).

Влияние магнитного поля на спектральные свойства ТФ-АФМ показано на рис. 6, где представлены квазиимпульсные зависимости энергий возбуждений Ферми $E_{ks}^{(j)}$ и плотность электронных состояний $D_{f\sigma}$ в окрестности локализованного уровня. Параметры модели выбраны такими же, как и при расчете графиков, представленных на рис. 3, а температура $T = 1\text{ К}$. На левой панели рис. 6а показан спектр квазичастиц в скошенной АФМ-фазе, рассчитанный при значении магнитного поля H , меньшего поля спин-флип перехода H_c . Сравнение дисперсионных кривых на рис. 6а и 3а показывает, что наиболее сильное изменение спектра происходит в окрестности f -уровня и сопровождается снятием вырождения по квантовому числу s . Для $s = -1/2$ на первой ($j = 1$) и второй ($j = 2$) ветвях спектра выделяются области, которые проявляют тенденцию к сближению. Аналогичное поведение наблюдается для второй и третьей ветвей с $s = +1/2$. При увеличении напряженности поля отмеченные участки спектра продолжают сближаться, и при $H = H_c$ происходит их касание. Вид спектра для этого случая показан на левой панели рис. 6б.

На правых панелях рис. 6а и 6б изображены графики плотности состояний f -электронов в том же энергетическом масштабе, что и соответствующие им дисперсионные кривые. Как и раньше, сплошной линией обозначена плотность f -состояний $D_{f\sigma}$ для электронов с $\sigma = +1/2$, а штриховой линией – с $\sigma = -1/2$. Поскольку в магнитном поле плотность f -состояний для зон с разными s отличается, то аналогично спектральным кривым функцию $D_{f\sigma}$ удобно изображать в разных полуплоскостях для разных s . Из представленных на рис. 6 данных видно, что для $s = -1/2$ потолок зоны $E_{k,-1/2}^{(1)}$ и дно зоны $E_{k,-1/2}^{(2)}$, отвечающие главным образом f -состояниям с $\sigma = \uparrow$, после схлопывания при $H = H_c$ магнитных моментов подрешеток можно интерпретировать как единую узкую зону, описывающую только электроны со спином $\sigma = \uparrow$ и являющуюся продолжением зоны $E_{k,+1/2}^{(1)}$ (также описывающую f -электроны с $\sigma = \uparrow$) в схеме приведенных зон Бриллюэна. Аналогичное наблюдение можно

Рис. 6. Спектр квазичастиц и плотность f -состояний ТФ-АФМ в скошенной фазе в окрестности локализованного уровня: а – $H/H_c = 0.92$; б – $H/H_c = 1$; $H_c = 7.8 \cdot 10^{-3}$. Штрих-пунктирной линией показано положение химического потенциала.

сделать и в отношении второй и третьей ветвей спектра с $s = +1/2$. Таким образом, переход в коллинеарную ферромагнитную фазу сопровождается исчезновением узкой отщепленной зоны, а результирующий закон дисперсии можно представить как обычный миксонный спектр, расщепленный по σ магнитным и обменным полями.

Подчеркнем, что при рассмотрении спектра элементарных возбуждений скошенной фазы металлических ТФ-АФМ существенным оказался учет влияния коллективизированных электронов на характеристики дальнего магнитного порядка в f -подсистеме. Это влияние, определяемое посредством механизма s - f -обмена и гибридизации, пренебрежимо мало только для АФМ с низкой концентрацией носителей тока. Однако значительное число редкоземельных интерметаллидов являются металлами, и при их рассмотрении влиянием электронов проводимости на локализо-

Рис. 7. Зависимость углов скоса магнитных подрешеток θ и φ от внешнего магнитного поля.

ванную подсистему пренебрегать нельзя. Этим обстоятельством объясняется появление в теории своего угла скоса φ для коллективизированной подсистемы. Причем если без учета влияния s -электронов связь между углами скоса была бы тривиальной – $\varphi = \theta + \pi$ (константа s - f -обмена положительна), то при учете влияния электронов проводимости на f -подсистему вычисление угла φ требует решения дополнительного уравнения самосогласования. На рис. 7 показаны магнитопольевые зависимости величин углов скоса, построенные при самосогласованном расчете графиков, представленных на рис. 6. Видно, что увеличение поля H приводит к скосу подрешеток (углы θ и φ уменьшаются), а в точке спин-флип перехода ($H = H_c$) магнитные моменты подрешеток становятся коллинеарными (при этом углы θ и φ обращаются в 0 и π соответственно). Видно, что равенство $\varphi = \theta + \pi$ выполняется только в двух предельных случаях: $H = 0$ и $H = H_c$. Для промежуточных значений магнитного поля разница между φ и $\theta + \pi$ достигает 3° . В рассмотренном случае взаимная ориентация векторов средних значений спиновых моментов локализованных и коллективизированных электронов для одной подрешетки является практически антипараллельной. Малость полученного значения разности углов объясняется тем, что в уравнении (17) при $L_0 = 0$ (в расчетах для простоты выбирался именно этот случай) разница между тангенсами углов φ и θ определяется малой величиной $\mu_B H / R J_0$. При $L_0 \neq 0$ различие между φ и θ увеличивается. Заметим, что, несмотря на относительно малую величину отмеченной разницы углов, ее тем не менее необходимо учитывать, поскольку в противном случае, как уже отмечалось, теплоемкость системы в скошенной фазе в низкотемпературной области может принимать отрицательные значения.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные результаты получены в рамках эффективного гамильтониана ПМА [22], включающего обменные взаимодействия как внутри локализованной подсистемы, так и между локализованной и коллективизированной подсистемами.

Основное отличие от результатов цитированных выше работ [11]–[14] заключается, по меньшей мере, в двух моментах. Во-первых, развитая теория из-за снятия ограничения на положение химического потенциала стала приемлемой для описания ТФ АФМ-интерметаллидов с металлическим типом основного состояния. Второе расширение области применимости предложенного подхода связано с возможностью включения таких магнитных полей, когда скосом магнитных подрешеток пренебрегать нельзя. Принятие во внимание этого скоса составляет главное физическое содержание проведенного рассмотрения особенностей спектра ТФ в магнитном поле АФМ-интерметаллидов. Заметим, что при последовательном учете скоса АФМ-структуры в подсистеме локализованных электронов, появляющегося при наложении внешнего магнитного поля, существенным оказался и эффект обратного влияния магнитных степеней свободы коллективизированных электронов на спиновую структуру локализованной магнитной подсистемы. Данное обстоятельство особенно важно для металлических ТФ-соединений, когда концентрация носителей тока велика. Указанное обстоятельство потребовало введения разных углов скоса (θ и φ) для локализованной и коллективизированной подсистем электронов и привело к увеличению числа уравнений самосогласования.

Отметим также, что в математическом отношении ключевую роль при получении обозримых аналитических выражений для самосогласованных средних сыграло введенное унитарное преобразование (26), позволившее провести частичную диагонализацию восьмимерной матрицы и представить ее через две матрицы четвертого порядка. Это значительно упростило процедуру вывода замкнутой системы семи интегральных уравнений самосогласования и позволило записать ее в виде, удобном для проведения численных расчетов.

Исследованные особенности спектра и плотности состояний тяжелых квазичастиц в АФМ-фазе будут проявляться в различных гальваномагнитных свойствах ТФ-АФМ-интерметаллидов. Подобные эксперименты, в частности по измерению теплоемкости в магнитном поле, в настоящее время проведены на многих ТФ-АФМ: PuGa_3 [2], $\text{Ce}_2\text{Au}_2\text{Cd}$ [3], YbNiSi_3 [4], PuPd_5Al_2 [5]. При этом было обнаружено заметное влияние магнитного поля на низкотемпературную теплоемкость в окрестности температуры Нееля. Для теоретического описания влияния магнитного поля на теплоемкость таких систем как раз и необходимо использовать спектр ТФ в скошенной фазе. Однако проведение соответствующих численных расчетов выходит за рамки темы данной работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем выражения, используемые для расчета термодинамических свойств ТФ-АФМ в скошенной фазе:

$$\langle c_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \rangle_\omega = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned}
A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega) &= [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2](\omega - t_k - \Gamma_k \cos \varphi - \sigma \tilde{H}) - \\
&\quad - (\omega - E_0 - \lambda)(u_k^2 \cos \varphi + v_k^2) - \\
&\quad - \sigma \bar{H} [u_k^2 \cos \theta + \cos(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 + \cos(\varphi - \theta)|\tilde{V}_k|^2], \\
B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega) &= [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2](\omega - t_k + \Gamma_k \cos \varphi - \sigma \tilde{H}) + \\
&\quad + (\omega - E_0 - \lambda)(u_k^2 \cos \varphi - v_k^2) + \\
&\quad + \sigma \bar{H} [u_k^2 \cos \theta - \cos(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 - \cos(\varphi - \theta)|\tilde{V}_k|^2];
\end{aligned} \tag{38}$$

$$\langle\langle c_{k\bar{\sigma}} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{39}$$

где

$$\begin{aligned}
A_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega) &= 2\sigma \sin \varphi \{ \Gamma_k [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2] + u_k^2(\omega - E_0 - \lambda) \} + \\
&\quad + 2\sigma^2 \bar{H} [(\tilde{W}_k^* \tilde{V}_k - \tilde{V}_k^* \tilde{W}_k) \sin \theta + \sin(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 + \sin(\varphi - \theta)|\tilde{V}_k|^2], \\
B_{\sigma\sigma}^{(cc)}(k, \omega) &= -2\sigma \sin \varphi \{ (\Gamma_k [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2] + u_k^2(\omega - E_0 - \lambda)) \} + \\
&\quad + 2\sigma^2 \bar{H} [(\tilde{V}_k^* \tilde{W}_k - \tilde{W}_k^* \tilde{V}_k) \sin \theta + \sin(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 + \sin(\varphi - \theta)|\tilde{V}_k|^2];
\end{aligned} \tag{40}$$

$$\langle\langle a_{k\bar{\sigma}} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{41}$$

где

$$\begin{aligned}
A_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega) &= -[(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2](\omega - t_k - \Gamma_k \cos \varphi - \sigma \tilde{H}) + \\
&\quad + (\omega - E_0 - \lambda)(u_k^2 \cos \varphi + v_k^2) + \\
&\quad + \sigma \bar{H} [u_k^2 \cos \theta + \cos(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 + \cos(\varphi - \theta)|V_k|^2], \\
B_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega) &= [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2](\omega - t_k + \Gamma_k \cos \varphi - \sigma \tilde{H}) + \\
&\quad + (\omega - E_0 - \lambda)(u_k^2 \cos \varphi - v_k^2) + \\
&\quad + \sigma \bar{H} [u_k^2 \cos \theta - \cos(\varphi + \theta)|\tilde{W}_k|^2 - \cos(\varphi - \theta)|V_k|^2];
\end{aligned} \tag{42}$$

$$\langle\langle a_{k\bar{\sigma}} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(ac)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{43}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(ac)}(k, \omega) &= 2\sigma \sin \varphi \left\{ \Gamma_k [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2] + u_k^2 (\omega - E_0 - \lambda) \right\} + \\
 &+ \frac{\bar{H}}{2} [(\widetilde{W}_k^* \widetilde{V}_k - \widetilde{V}_k^* \widetilde{W}_k) \sin \theta + \sin(\varphi + \theta) |\widetilde{W}_k|^2 + \sin(\varphi - \theta) |\widetilde{V}_k|^2], \\
 B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(ac)}(k, \omega) &= 2\sigma \sin \varphi \left\{ \Gamma_k [(\omega - E_0 - \lambda)^2 - \sigma^2 \bar{H}^2] + u_k^2 (\omega - E_0 - \lambda) \right\} + \\
 &+ \frac{\bar{H}}{2} [(\widetilde{W}_k^* \widetilde{V}_k - \widetilde{V}_k^* \widetilde{W}_k) \sin \theta - \sin(\varphi + \theta) |\widetilde{W}_k|^2 - \sin(\varphi - \theta) |\widetilde{V}_k|^2];
 \end{aligned} \tag{44}$$

$$\langle\langle d_{k\sigma} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2} \frac{A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{45}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma \bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma \bar{H}) [V_k^{(c)*}(\varphi - \theta) - W_k^{(c)*}(\varphi + \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [W_k^{(c)*}(\varphi - \theta) - V_k^{(c)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\widetilde{W}_k^{*2} - \widetilde{V}_k^{*2}) [V_k^{(c)}(\varphi - \theta) + W_k^{(c)}(\varphi + \theta)], \\
 B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma \bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma \bar{H}) (V_k^{(c)*}(\varphi - \theta) + W_k^{(c)*}(\varphi + \theta)) + \\
 &+ \Gamma_k [W_k^{(c)*}(\varphi - \theta) + V_k^{(c)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\widetilde{W}_k^{*2} - \widetilde{V}_k^{*2}) [V_k^{(c)}(\varphi - \theta) - W_k^{(c)}(\varphi + \theta)];
 \end{aligned} \tag{46}$$

$$\langle\langle d_{k\bar{\sigma}} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2} \frac{A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{47}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda + \sigma \bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma \bar{H}) [V_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + W_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [W_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + V_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\widetilde{W}_k^{*2} - \widetilde{V}_k^{*2}) [V_k^{(s)}(\varphi - \theta) - W_k^{(s)}(\varphi + \theta)], \\
 B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(dc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda + \sigma \bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma \bar{H}) [V_k^{(s)*}(\varphi - \theta) - W_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [W_k^{(s)*}(\varphi - \theta) - V_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\widetilde{W}_k^{*2} - \widetilde{V}_k^{*2}) [V_k^{(s)}(\varphi - \theta) + W_k^{(s)}(\varphi + \theta)];
 \end{aligned} \tag{48}$$

$$\langle\langle b_{k\sigma} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2} \frac{A_{\bar{\sigma}\sigma}^{(bc)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\bar{\sigma}\sigma}^{(bc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{49}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma\bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma\tilde{H}) [W_k^{(c)*}(\varphi + \theta) - V_k^{(c)*}(\varphi - \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [V_k^{(c)*}(\varphi + \theta) - W_k^{(c)*}(\varphi - \theta)] \} + \\
 &+ (\tilde{V}_k^{*2} - \tilde{W}_k^{*2}) [V_k^{(c)}(\varphi - \theta) + W_k^{(c)}(\varphi + \theta)], \\
 B_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma\bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma\tilde{H}) [W_k^{(c)*}(\varphi + \theta) + V_k^{(c)*}(\varphi - \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [V_k^{(c)*}(\varphi + \theta) + W_k^{(c)*}(\varphi - \theta)] \} + \\
 &+ (\tilde{V}_k^{*2} - \tilde{W}_k^{*2}) [W_k^{(c)}(\varphi + \theta) - V_k^{(c)}(\varphi - \theta)];
 \end{aligned} \tag{50}$$

$$\langle\langle b_{k\bar{\sigma}} \mid c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{51}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda + \sigma\bar{H}) \{ (\omega - t_k - \sigma\tilde{H}) [V_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + W_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [W_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + V_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\tilde{W}_k^{*2} - \tilde{V}_k^{*2}) [V_k^{(s)}(\varphi - \theta) - W_k^{(s)}(\varphi + \theta)], \\
 B_{\sigma\sigma}^{(bc)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda + \sigma\bar{H}) \times \\
 &\times \{ (\omega - t_k - \sigma\tilde{H}) [-V_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + W_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] + \\
 &+ \Gamma_k [-W_k^{(s)*}(\varphi - \theta) + V_k^{(s)*}(\varphi + \theta)] \} + \\
 &+ (\tilde{W}_k^{*2} - \tilde{V}_k^{*2}) [-V_k^{(s)}(\varphi - \theta) - W_k^{(s)}(\varphi + \theta)];
 \end{aligned} \tag{52}$$

$$\langle\langle d_{k\sigma} \mid d_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \frac{A_{\sigma\sigma}^{(dd)}(k, \omega)}{D_{k\bar{\sigma}}^{(4)}(\omega)} + \frac{1}{2} \frac{B_{\sigma\sigma}^{(dd)}(k, \omega)}{D_{k\sigma}^{(4)}(\omega)}, \tag{53}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{\sigma\sigma}^{(dd)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma\bar{H}) [(\omega - t_k)^2 - \Gamma_k^2 - \sigma^2\tilde{H}^2 - 2\sigma\tilde{H}\Gamma_k \cos \varphi] - \\
 &- (\omega - t_k)(v_k^2 + u_k^2 \cos \theta) - \Gamma_k(u_k^2 + v_k^2 \cos \theta) - \\
 &- \sigma\tilde{H} [|\tilde{W}_k|^2 \cos(\varphi + \theta) + |\tilde{V}_k|^2 \cos(\varphi - \theta) + u_k^2 \cos \varphi], \\
 B_{\sigma\sigma}^{(dd)}(k, \omega) &= (\omega - E_0 - \lambda - \sigma\bar{H}) [(\omega - t_k)^2 - \Gamma_k^2 - \sigma^2\tilde{H}^2 + 2\sigma\tilde{H}\Gamma_k \cos \varphi] - \\
 &- (\omega - t_k)(v_k^2 - u_k^2 \cos \theta) - \Gamma_k(u_k^2 - v_k^2 \cos \theta) - \\
 &- \sigma\tilde{H} [|\tilde{W}_k|^2 \cos(\varphi + \theta) + |\tilde{V}_k|^2 \cos(\varphi - \theta) - u_k^2 \cos \varphi].
 \end{aligned} \tag{54}$$

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00226), Интеграционного проекта № 53 СО РАН, а также программы ОФН РАН “Сильные электронные корреляции”.

Список литературы

- [1] C. M. Varma, W. Weber, L. J. Randall, *Phys. Rev. B*, **33**:2 (1986), 1015–1019.
- [2] P. Boulet, E. Colineau, F. Wastin, P. Javorsky, J. C. Griveau, J. Rebizant, G. R. Stewart, E. D. Bauer, *Phys. Rev. B*, **72**:6 (2005), 064438.
- [3] S. Rayaprol, R. Pottgen, *Phys. Rev. B*, **72**:21 (2005), 214435.
- [4] S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, M. A. Avila, T. Takabatake, *Phys. Rev. B*, **75**:9 (2007), 094433.
- [5] K. Gofryk, J.-C. Griveau, E. Colineau, J. Rebizant, *Phys. Rev. B*, **77**:9 (2008), 092405.
- [6] Н. Е. Случанко, А. В. Богач, В. В. Глушков, С. В. Демишев, Н. А. Самарин, Г. С. Бурханов, О. Д. Чистяков, *Письма в ЖЭТФ*, **76**:1 (2002), 31–34.
- [7] П. А. Алексеев, Ж.-М. Миньо, К. С. Немковский, В. Н. Лазуков, Е. В. Нефедова, А. П. Менушенков, А. В. Кузнецов, Р. Бюли, А. В. Грибанов, *ЖЭТФ*, **132**:1 (2007), 22–26.
- [8] М. И. Игнатов, А. В. Богач, Г. С. Бурханов, В. В. Глушков, С. В. Демишев, А. В. Кузнецов, О. Д. Чистяков, Н. Ю. Шицевалова, Н. Е. Случанко, *ЖЭТФ*, **132**:1 (2007), 69–72.
- [9] А. В. Богач, Г. С. Бурханов, В. В. Глушков, С. В. Демишев, О. Д. Чистяков, Н. Е. Случанко, *ЖЭТФ*, **132**:1 (2007), 125–128.
- [10] P. Coleman, *Phys. Rev. B*, **29**:6 (1984), 3035–3044.
- [11] V. Dorin, P. Schlottmann, *Phys. Rev. B*, **46**:17 (1992), 10800–10807.
- [12] B. Möller, P. Wölfle, *Phys. Rev. B*, **48**:14 (1993), 10320–10326.
- [13] E. Halvorsen, G. Czycholl, *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**:11 (1996), 1775–1783.
- [14] S.-J. Sun, M.-F. Yang, T.-M. Hong, *Phys. Rev. B*, **48**:21 (1993), 16127–16130.
- [15] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, *Phys. Rev.*, **149**:2 (1966), 491–492.
- [16] C. Lacroix, M. Cyrot, *Phys. Rev. B*, **20**:5 (1979), 1969–1976.
- [17] C. Proetto, A. López, *Phys. Rev. B*, **24**:6 (1981), 3031–3036.
- [18] В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс, *ТМФ*, **121**:3 (1999), 464–478.
- [19] Д. Ф. Дигор, П. Ентел, М. Маринаро, В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс, *ТМФ*, **127**:2 (2001), 304–316.
- [20] A. Hübsch, K. W. Becker, *Eur. Phys. J. B*, **52**:3 (2006), 345–353.
- [21] Z. Liang-Jian, Z. Qing-Qi, *J. Magn. Magn. Mater.*, **109**:2–3 (1992), 237–242.
- [22] В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, *ТМФ*, **157**:2 (2008), 235–249.
- [23] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1965.

Поступила в редакцию 29.04.2009