Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Ю. Ирхин, Метод двухвременных функций Грина в теории магнетизма металлов с сильными корреляциями, *ТМФ*, 2011, том 168, номер 3, 453–466

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6693>

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: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 15:38:10

© 2011 г.

В. Ю. Ирхин*

МЕТОД ДВУХВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА МЕТАЛЛОВ С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Рассматривается применение метода двухвременных функций Грина Боголюбова–Тябликова к многоэлектронной теории металлов в рамках моделей с сильными корреляциями – модели Хаббарда и s - $d(f)$ -обменной модели Вонсовского. Обсуждаются атомное представление в проблеме описания электронных состояний, переход металл–изолятор, проблема некогерентных состояний, эффект Кондо. Анализируется критерий ферромагнетизма в системах сильно коррелированных электронов, который радикально отличается от условия Стонера.

Ключевые слова: магнетизм, функции Грина, многоэлектронные модели, статистическая физика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод двухвременных температурных функций Грина, разработанный Боголюбовым и Тябликовым [1], [2] является одним из классических методов статистической физики. Наряду с диаграммными подходами он находит широкое применение в квантовой физике твердого тела. Особенно полезен и эффективен этот метод в отсутствие явного малого параметра, когда стандартные теоретико-полевые подходы, основанные на теории возмущений, оказываются неприменимыми. Используя расщепления в формализме уравнений движения, можно получать нетривиальные результаты, хотя для оценки их надежности требуется физическая интуиция.

Запишем фурье-образ антикоммутирующей (коммутирующей) двухвременной запаздывающей функции Грина для операторов A и B :

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_E^\pm = \int_{-\infty}^0 \langle [e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}, B]_\pm \rangle e^{iEt} dt, \quad \text{Im } E > 0, \quad (1)$$

где $\mathcal{H}$ – гамильтониан системы. Для практического использования удобно записать уравнение движения сразу в энергетическом представлении:

$$E \langle\langle A|B\rangle\rangle_E^\pm = \langle [A, B]_\pm \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]|B\rangle\rangle_E^\pm, \quad (2a)$$

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия.
E-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

или, используя дифференцирование по “правому” времени,

$$E \langle\langle A|B \rangle\rangle_E^\pm = \langle[A, B]_\pm\rangle + \langle\langle A|[\mathcal{H}, B] \rangle\rangle_E^\pm. \quad (26)$$

Таким образом, функция Грина (1) выражается через более сложные функции Грина.

Как видно из уравнения (2), удобно использовать коммутаторную функцию Грина для операторов бозе-типа A, B (для которых коммутатор $[A, B]$, стоящий под знаком среднего, будет “более простым”) и антикоммутаторную – для операторов ферми-типа. В то же время применение метода вовсе не ограничено обычными бозе- и ферми-возбуждениями квазичастичного типа. В частности, в теории сильно коррелированных систем приходится иметь дело с операторами, которые не обладают простыми коммутационными соотношениями (например, спинные операторы и многоэлектронные X -операторы, введенные Хаббардом). В этом случае стандартные диаграммные разложения неприменимы.

Вычисление функции Грина позволяет получить соответствующие термодинамические средние, используя спектральное представление

$$\langle BA \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E+i\delta}^\pm \frac{dE}{e^{E/T} \pm 1}. \quad (3)$$

В общем случае бесконечную последовательность уравнений (2) можно “расцепить”, выражая функции Грина более высокого порядка через простые функции.

В случае взаимодействующих электронов функция Грина может быть представлена через уравнение Дайсона

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}}|c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_E = [E - E_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(E)]^{-1}, \quad (4)$$

где $E_{\mathbf{k}}$ – затравочный спектр, $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$ – собственная энергия.

При условии, что гамильтониан взаимодействия содержит малый параметр, метод уравнений движения позволяет провести разложение теории возмущений. В частности, применяя оба уравнения (2), можно получить удобное выражение для собственной энергии [3]:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{k}}(E) &= \Lambda_{\mathbf{k}} + \langle\langle [c_{\mathbf{k}}, \mathcal{H}_{\text{int}}] - \Lambda_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} | [\mathcal{H}_{\text{int}}, c_{\mathbf{k}}^\dagger] - \Lambda_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_E^{\text{irr}}, \\ \Lambda_{\mathbf{k}} &= \langle\{[c_{\mathbf{k}}, \mathcal{H}_{\text{int}}], c_{\mathbf{k}}^\dagger\}\rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

где индекс “irr” означает, что расходящиеся вклады, содержащие знаменатели $(E - E_{\mathbf{k}})^n$, при дальнейших вычислениях неприводимой функции Грина в выражении (5) должны быть опущены.

В связи с различными методиками расцепления и решения бесконечных систем уравнений для двухвременных температурных функций Грина (и особенно формализма неприводимых функций Грина) следует упомянуть работы Церковникова [4].

Метод двухвременных функций Грина может быть использован и в отсутствие малого параметра, если использовать расцепления высших функций Грина или замкнуть цепочку уравнений движения каким-либо иным способом. В настоящей работе мы обсудим его применение к моделям с сильными корреляциями – модели Хаббарда и s - $d(f)$ -обменной модели Вонсовского.

2. МОДЕЛЬ ХАББАРДА И ФОРМАЛИЗМ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ОПЕРАТОРОВ

Хаббард [5]–[8] выделил в своей модели наиболее существенную часть межэлектронного взаимодействия – сильное отталкивание электронов на одном узле U . В случае невырожденной зоны ее гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} t_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}, \quad (6)$$

где $t_{\mathbf{k}}$ – зонный спектр. Модель Хаббарда широко использовалась для рассмотрения ферромагнетизма коллективизированных электронов, перехода металл–изолятор и других физических явлений. Несмотря на очевидную простоту, физика этой модели очень богата, а ее строгое исследование является весьма трудной проблемой.

Поскольку в случае сильных корреляций теория возмущений не работает, Хаббард использовал метод двухвременных запаздывающих функций Грина Боголюбова и Тябликова. Предложенная им схема расщепления на разных узлах позволила получить формальный переход от зонной картины к атомной. Стартуя с атомного предела, Хаббард нашел интерполяционное решение, описывающее как атомный, так и зонный пределы для s -состояний [5]; затем он рассмотрел простую модель вырожденных зон [6].

В то же время интерполяционное описание оказалось в значительной мере иллюзорным (в частности, корреляционное расщепление в спектре сохраняется при сколь угодно малых U). В третьей работе Хаббарда [7] рассмотрено улучшенное расщепление “Хаббард-III” – одноузельное приближение, аналогичное теории неупорядоченных сплавов. Оно позволило, в частности, получить переход металл–изолятор. Однако и ему присущи недостатки: переоценка затухания, отсутствие ферми-жидкостного поведения.

В действительности эти проблемы носят принципиальный характер и отражают невозможность простого описания перехода между одноэлектронной (зонной) и многоэлектронной (атомной) статистикой.

В работе [8] Хаббард использовал метод многоэлектронных X -операторов (атомное представление):

$$X(\Gamma, \Gamma') = |\Gamma\rangle\langle\Gamma'|, \quad \sum_{\Gamma} X(\Gamma, \Gamma) = 1, \quad (7)$$

где $|\Gamma\rangle$ – точные собственные состояния гамильтониана. (Этот формализм, который позволяет учесть внутриатомные взаимодействия в нулевом приближении, детально обсуждается в обзорах [9] и книге [10].) Правила умножения для обобщенных проекционных операторов (7) имеют вид

$$X(\Gamma, \Gamma') X(\Gamma'', \Gamma''') = \delta_{\Gamma'\Gamma''} X(\Gamma, \Gamma'''). \quad (8)$$

X -операторы можно разделить на операторы бозе- и ферми-типа: они соответственно меняют количество электронов на узле на четное и нечетное число, а на разных узлах решетки коммутируют и антикоммутируют.

Для атомной конфигурации эквивалентных электронов (с одинаковыми главным и орбитальным квантовыми числами) можно получить представление [9]

$$a_{\gamma}^{\dagger} = \sum_n n^{1/2} \sum_{\Gamma_n, \Gamma_{n-1}} G_{\Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n} C_{\Gamma_{n-1}, \gamma}^{\Gamma_n} X(\Gamma_n, \Gamma_{n-1}). \quad (9)$$

В случае LS -связи

$$C_{\Gamma_{n-1}, \gamma}^{\Gamma_n} \equiv C_{L_{n-1} M_{n-1}, lm}^{L_n M_n} C_{S_{n-1} \mu_{n-1}, (1/2) \sigma}^{S_n \mu_n}, \quad (10)$$

где C – коэффициенты Клебша–Гордана; суммирование по $\gamma = \{lm\sigma\}$ (опускаем для краткости главное квантовое число) стоит вместо суммирования по одноэлектронным орбитальным проекциям m и спиновым проекциям σ , но не по l ; $G_{\Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n}$ – генеалогические коэффициенты. В частности, для s -электронов

$$a_{\sigma}^{\dagger} = X(\sigma, 0) + \sigma X(2, -\sigma), \quad (11)$$

где 0 и 2 – пустые и дважды занятые состояния на узле (дырки и двойки).

Именно представление X -операторов оказалось удобным для систематического построения различных приближений. В работах [11], [12] методом уравнений движения было развито разложение по обратному координационному числу $1/z$ (более формально – по обратному радиуса спадания интеграла переноса, или по числу суммирований в импульсном представлении). Оно позволило последовательно учесть вклады спиновых и зарядовых флуктуаций, а также фермиевских возбуждений, особенно в случае ферромагнетика, хотя также встретилось с рядом трудностей в случае парамагнитного состояния.

Использование операторов Хаббарда возможно и в случае локализованных спинов. Здесь оно дает возможность простым способом получить главные результаты теории гейзенберговских магнетиков. В частности, этот формализм позволяет учесть сильную одноионную магнитную анизотропию в нулевом приближении [10], [13].

Гамильтониан модели Гейзенберга с произвольной одноузельной анизотропией имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \mathcal{H}_a. \quad (12)$$

В представлении X -операторов гамильтониан анизотропии принимает диагональный вид. В случае анизотропии типа “легкая ось” имеем

$$\mathcal{H}_a = - \sum_i [\varphi(S_i^z) + H S_i^z] = - \sum_{i,M} [\varphi(M) + H M] X_i(M, M), \quad (13)$$

где H – магнитное поле. Удобно ввести коммутаторные функции Грина

$$G_{\mathbf{q}}(\omega) = \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}, \quad G_{\mathbf{q}M}(\omega) = \langle\langle X_{\mathbf{q}}(M+1, M) | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}. \quad (14)$$

Запишем уравнение движения, в котором выполним простейшее расщепление, соответствующее расщеплению Тябликова на различных узлах решетки:

$$\begin{aligned} (\omega - H - \varphi(M+1) + \varphi(M) + 2J_0 \langle S^z \rangle) G_{\mathbf{q}M}(\omega) = \\ = \gamma_S(M) (N_{M+1} - N_M) [1 + J_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(\omega)], \end{aligned} \quad (15)$$

где $N_M = \langle X(M, M) \rangle$, $\gamma_S(M) = [(S - M)(S + M + 1)]^{1/2}$. После суммирования по M получаем

$$G_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{\Phi_S(\omega)}{1 - J_{\mathbf{q}}\Phi_S(\omega)}, \quad \Phi_S(\omega) = \sum_M \frac{\gamma_S^2(M)(N_{M+1} - N_M)}{\omega - H - \varphi(M + 1) + \varphi(M) + 2J_0\langle Sz \rangle}. \quad (16)$$

Спектр возбуждений определяется полюсом (16) и содержит $2S$ ветвей. Выражения (15), (16) позволяют вычислить числа заполнения N_M и получить самосогласованное уравнение для намагниченности.

3. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР В МОДЕЛИ ХАББАРДА И ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР

Запишем гамильтониан модели Хаббарда с вырожденными зонами и сильными корреляциями:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, m, \sigma} t_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}lm\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}lm\sigma} + \sum_{i\Gamma} E_{\Gamma} X_i(\Gamma, \Gamma). \quad (17)$$

Здесь мы не учитываем зависимость интегралов переноса от m , т.е. пренебрегаем эффектами кристаллического поля. Такое приближение позволяет в простейшем случае рассмотреть эффекты многоэлектронной термовой структуры в спектре.

Рассмотрим одноэлектронную функцию Грина. Согласно представлению (9)

$$G_{\mathbf{k}\gamma}(E) = \langle\langle a_{\mathbf{k}\gamma} | a_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \rangle\rangle_E = \sum_{n, \Gamma_n, \Gamma_{n-1}} n^{1/2} G_{\Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n} C_{\Gamma_{n-1}, \gamma}^{\Gamma_n} \langle\langle X_{\mathbf{k}}(\Gamma_{n-1}, \Gamma_n) | a_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \rangle\rangle_E. \quad (18)$$

В уравнении движения для функции Грина в правой части выражения (18) выполним простейшее расщепление, которое соответствует расщеплению “Хаббард- Γ ” на разных узлах решетки [5], [6], [8]:

$$\begin{aligned} (E - E_{\Gamma_n} + E_{\Gamma_{n-1}}) \langle\langle X_{\mathbf{k}}(\Gamma_{n-1}, \Gamma_n) | a_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \rangle\rangle_E = \\ = n^{1/2} G_{\Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n} C_{\Gamma_{n-1}, \gamma}^{\Gamma_n} (N_{\Gamma_n} + N_{\Gamma_{n-1}}) [1 + t_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\gamma}(E)]. \end{aligned}$$

Тогда получаем

$$G_{\mathbf{k}\gamma}(E) = \frac{\Phi_{\gamma}(E)}{1 - t_{\mathbf{k}} \Phi_{\gamma}(E)}, \quad (19)$$

где

$$\Phi_{\gamma}(E) = \sum_{n, \Gamma_n, \Gamma_{n-1}} n (G_{\Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n} C_{\Gamma_{n-1}, \gamma}^{\Gamma_n})^2 \frac{N_{\Gamma_n} + N_{\Gamma_{n-1}}}{E - E_{\Gamma_n} + E_{\Gamma_{n-1}}}. \quad (20)$$

Отметим, что выражения (19), (20) имеют структуру, похожую на структуру выражения (16).

Спектр возбуждений определяется уравнением $1 - t_{\mathbf{k}} \Phi_{\gamma}(E) = 0$. Таким образом, межузельный электронный перенос ведет к размытию каждого перехода между атомными уровнями в хаббардовскую подзону. Эти подзоны разделены корреляционными щелями. В частности, для s -зоны мы получаем спектр, который содержит в ферромагнитной фазе четыре подзоны:

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{1,2} = \frac{1}{2} \{ t_{\mathbf{k}} + U \mp [(t_{\mathbf{k}} - U)^2 + 4t_{\mathbf{k}}U(N_{-\sigma} + N_2)]^{1/2} \}. \quad (21)$$

Выражение (21) также может быть переписано через одноэлектронные числа заполнения, поскольку $N_\sigma + N_2 = n_\sigma$, $N_\sigma + N_0 = 1 - n_{-\sigma}$. В отличие от приближения Хартри–Фока–Стонера $E_{\mathbf{k}\sigma} = t_{\mathbf{k}} + Un_{-\sigma}$, зависимость спектра от чисел заполнения не сводится к постоянному сдвигу подзон. Спектр приближения “Хаббард-Г” имеет наиболее простой вид в случае больших U , когда

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^1 = (1 - n_{-\sigma})t_{\mathbf{k}}, \quad E_{\mathbf{k}\sigma}^2 = t_{\mathbf{k}}n_{-\sigma} + U. \quad (22)$$

Можно предположить, что в действительности некоторые подзоны плохо определены из-за большого затухания. Для иллюстрации рассмотрим случай насыщенного хаббардовского ферромагнетика с большим U и малой концентрацией носителей тока (дырок или двоек) c , где вычисление дает [14]

$$G_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \left\{ E - t_{\mathbf{k}} + (1 - c) \left[\sum_{\mathbf{q}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E - t_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}}} \right]^{-1} \right\}^{-1} \quad (23)$$

($\omega_{\mathbf{q}}$ – частота магнонов). Таким образом, некоторые энергетические знаменатели заменяются резольвентами, и соответствующие состояния имеют неквазичастичную природу. При малых значениях c функция Грина (23) не имеет полюсов ниже уровня Ферми. Однако с увеличением c функция Грина приобретает спин-поляронный полюс ниже E_F , и насыщенный ферромагнетизм разрушается [15].

Выражение (23) можно сравнить с соответствующим результатом для парамагнитной фазы в приближении “Хаббард-III”:

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \left\{ E - t_{\mathbf{k}} + \frac{1 - c}{2} \left[\sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E) \right]^{-1} \right\}^{-1}. \quad (24)$$

В отличие от выражения (23), уравнение (24) не содержит фермиевских функций, так что некогерентные (неквазичастичные) состояния не исчезают на E_F . Подобная ситуация всегда имеет место в приближении “Хаббард-III” [7], [11], [12], где затухание на уровне Ферми конечно.

Флуктуационные поправки к электронным функциям Грина приближения “Хаббард-Г” были получены в работах [14], [16]–[18] в рамках формального разложения по $1/z$. Они выражаются через одночастичные числа заполнения, а также спиновые и зарядовые корреляционные функции:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} &= \langle S_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} S_{\mathbf{q}}^{\sigma} \rangle = \langle X_{-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} \rangle, & \kappa_{\mathbf{q}} &= \langle X_{-\mathbf{q}}^{20} X_{\mathbf{q}}^{02} \rangle, \\ \chi_{\mathbf{q}}^{zz} &= \langle \delta(X_{-\mathbf{q}}^{00} + X_{-\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}) \delta(X_{\mathbf{q}}^{00} + X_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}) \rangle, & \delta A &= A - \langle A \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

При этом важное значение имеет выбор правильной структуры функции Грина и процедура самосогласования. Если ориентироваться на структуру типа уравнения Ларкина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{Z_{1\mathbf{k}\sigma}(E)}{E - Z_{2\mathbf{k}\sigma}(E)t_{\mathbf{k}}}, \quad (26)$$

где перенормируются концевой множитель $Z_{1\mathbf{k}\sigma}(E)$ и эффективный интеграл переноса, возникает формальная проблема, связанная с нарушением аналитических свойств запаздывающих функций Грина: поскольку энергия $t_{\mathbf{k}}$ меняет знак в зоне, появляются особенности в верхней полуплоскости [11], [12].

Эту проблему удалось решить с помощью перехода к локалаторному представлению $G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = [F_{\mathbf{k}\sigma}(E) - t_{\mathbf{k}}]^{-1}$. Оно оказывается более полезным, чем выражение (26) либо представление через собственную энергию-пропагатор (уравнение Дайсона (4)). Результат для локалатора имеет вид [18]

$$F_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{b_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{a_{\mathbf{k}\sigma}(E)}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}\sigma}(E) = & \frac{N_0 + N_{\sigma}}{E} + \frac{N_{-\sigma} + N_2}{E - U} + \left(\frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \times \\ & \times \left(\frac{-En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\langle c_{\mathbf{q}-\sigma}^{\dagger} X_{\mathbf{q}}^{0-\sigma} \rangle - \chi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma})}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(N_0 + N_{-\sigma})} + \right. \\ & + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\sigma \langle X_{\mathbf{q}}^{2\sigma} c_{\mathbf{q}-\sigma} \rangle + \kappa_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^2 + E(t_{\mathbf{q}} - U) - Ut_{\mathbf{q}}(N_{\sigma} + N_2)} - \\ & \left. - \frac{U\chi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{zz}}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(N_0 + N_{\sigma})} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}\sigma}(E) = & 1 - \left(\frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 \left(\frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U\langle c_{\mathbf{q}-\sigma}^{\dagger} X_{\mathbf{q}}^{0-\sigma} \rangle}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(N_0 + N_{-\sigma})} + \right. \\ & \left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} + \sigma U \langle X_{\mathbf{q}}^{2\sigma} c_{\mathbf{q}-\sigma} \rangle}{E^2 + E(t_{\mathbf{q}} - U) - Ut_{\mathbf{q}}(N_{\sigma} + N_2)} \right). \end{aligned} \quad (29)$$

Эти выражения могут быть использованы для анализа электронного спектра и различных фазовых переходов в модели Хаббарда, при этом корреляционные функции должны находиться самосогласованно. К сожалению, такое исследование пока до конца не выполнено, поскольку оно сталкивается с вычислительными трудностями.

Для парамагнитной фазы щель в спектре (21) сохраняется при сколь угодно малых U . Чтобы описать переход металл-изолятор, который имеет место при $U \sim W$ (W – ширина зоны), требуются более сложные самосогласованные приближения для электронных функций Грина типа “Хаббард-III”. Недостатки различных локальных приближений (возможность нарушения аналитических свойств функций Грина, несамосогласованное описание термодинамических свойств) обсуждаются в работах [11], [12] с точки зрения $1/z$ -разложения.

Нелокальные возбуждения Ферми в рамках $1/z$ -разложения были учтены в работах [16], [17]. Использование локалаторного представления (27) позволило получить правильные аналитические свойства и качественно воспроизвести трехпиковую структуру с пиком Кондо в центре зоны, ранее полученную в рамках динамической теории среднего поля [19]. Используя (28), (29) и пренебрегая импульсной зависимостью корреляционных функций, самосогласованный результат для локалатора $F(E) = b(E)/a(E)$ можно записать в виде [17]

$$\begin{aligned} a(E) = & 1 + \frac{3}{4} \frac{U^2}{E^2} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E) + \frac{2U}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(E) n_{\mathbf{q}}, \\ b(E) = & F_0(E) + \frac{2U}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 G_{\mathbf{q}}(E) n_{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (30)$$

Рис. 1. Плотность состояний в модели Хаббарда для затравочной полуэллиптической зоны при различных значениях U [17] (W – ширина зоны).

где $n_{\mathbf{q}}$ – точные числа заполнения. Соответствующая эволюция электронного спектра в зависимости от параметра взаимодействия показана на рис. 1.

Отметим, что для корректного рассмотрения парамагнитной фазы важен аккуратный учет спиновой динамики.

4. ФЕРРОМАГНЕТИЗМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Картина ферромагнетизма в модели Хаббарда с сильными корреляциями существенно отличается от стонеровской. Поэтому условие существования ферромагнетизма не должно совпадать с критерием Стонера, который соответствует неустойчивости немагнитной ферми-жидкости относительно малой спиновой поляризации.

В простейшем приближении “Хаббард-I” (см. формулу (22)) магнитное упорядочение есть результат сужения и расширения спиновых подзон (а не постоянного спинового расщепления, как в теории Стонера). Однако оказалось, что эта картина не дает удовлетворительных результатов. В частности, Хаббард [5] не нашел магнитных решений для простых затравочных плотностей состояний. Метод X -операторов проясняет причину этой неудачи: соответствующие выражения для функций Грина

$$\langle\langle X_{\mathbf{k}}(\sigma 0) | X_{-\mathbf{k}}(0\sigma) \rangle\rangle_E = \frac{c + N_{\sigma}}{E - E_{\mathbf{k}\sigma}} \quad (31)$$

($E_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}}(c + N_{\sigma})$ – энергии в приближении “Хаббард-I”, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t_{\mathbf{k}}$) нарушают кинематические соотношения (8), так как при $\langle S^z \rangle \neq 0$ невозможно одновременно удовлетворить тождествам

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle X_{-\mathbf{k}}(0\sigma) X_{\mathbf{k}}(\sigma 0) \rangle = \langle X(00) \rangle = N_0 = c \quad (32)$$

для обеих проекций спина σ .

Более успешным оказывается критерий неустойчивости насыщенного ферромагнетизма, связанный с появлением спин-поляронного полюса для функции Грина со спином, направленным вниз, ниже уровня Ферми [15], [18]. В отличие от приближений “Хаббард-I” и “Хаббард-III”, использование выражений для функций Грина (27)–(29), которые содержат числа заполнения Ферми, позволяет качественно правильно получить магнитную фазовую диаграмму и описать насыщенное и ненасыщенное ферромагнитные состояния [18]. Первая критическая концентрация носителей тока, соответствующая неустойчивости насыщенного ферромагнетизма, составляет для различных решеток около 30 % – значение, которое было ранее получено различными методами.

В работе [20] был использован подход, основанный на спиновой функции Грина. Ее вычисление в магнитном поле H дает

$$G_{\mathbf{q}}(\omega) = \left(2\langle S^z \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})(n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow})}{\omega - H - E_{\mathbf{k}\uparrow} + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}} \right) \times \\ \times \left(\omega - H - \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow})}{\omega - H - E_{\mathbf{k}\uparrow} + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}} \right)^{-1}, \quad (33)$$

где $n_{\mathbf{k}\sigma}$ – числа заполнения в приближении “Хаббард-I”.

При вычислении статической магнитной восприимчивости χ необходимо тщательно рассмотреть пределы $H \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$, $q \rightarrow 0$ из-за неэргодичности ферромагнитного основного состояния. Действительно, простая подстановка $H = \omega = q = 0$ дает только восприимчивость Паули. Чтобы избежать потери вклада Кюри–Вейсса от локальных моментов, в работе [20] был использован метод Тябликова для модели Гейзенберга [2]. Применяя спектральное представление для функций Грина, находим уравнение для намагниченности

$$\langle S^z \rangle = \frac{1-c}{2} + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\omega/T} - 1} \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(\omega). \quad (34)$$

Это уравнение можно упростить при условии $\langle S^z \rangle \ll 1$, которое имеет место и в парамагнитной области ($\langle S^z \rangle = \chi H$, $H \rightarrow 0$), и для $n \ll 1$ при произвольных температурах. Разложение знаменателя и числителя выражения (33) по $\langle S^z \rangle$ и H имеет вид

$$G_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{\omega A_{\mathbf{q}\omega} + \langle S^z \rangle B_{\mathbf{q}\omega} + H C_{\mathbf{q}\omega}}{\omega - \langle S^z \rangle D_{\mathbf{q}\omega} - H P_{\mathbf{q}\omega}}. \quad (35)$$

Здесь величина

$$D_{\mathbf{q}0} = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{8E_{\mathbf{k}}}{(1+c)^2} \left(E_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\omega + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}} \right) \times \\ \times \left(1 + \frac{2}{1+c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}{\omega + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}} \right)^{-1} \quad (36)$$

описывает эффективное обменное взаимодействие вследствие движения носителей тока; $f_{\mathbf{k}} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$.

При $T > T_C$, полагая в формуле(35) $\langle S^z \rangle = \chi H$, получаем уравнение для парамагнитной восприимчивости:

$$\frac{1-c}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}\omega} = T \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\chi B_{\mathbf{q}0} + C_{\mathbf{q}0}}{\chi D_{\mathbf{q}0} + P_{\mathbf{q}0}} + A_{\mathbf{q}0} \right). \quad (37)$$

Температура Кюри определяется условием $\chi(T_C) = \infty$. При малых n имеем

$$T_C = \frac{S_0}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}0}^{-1} \right)^{-1}. \quad (38)$$

Разлагая правую часть (37) по χ при $T_C \ll T \ll E_F$, получаем

$$\chi = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{C}{T - \theta}, \quad (39)$$

где первый член соответствует вкладу Паули, второй – вкладу Кюри–Вейсса от локальных магнитных моментов, где

$$C = \frac{1}{2} S_0, \quad \theta = \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}0} > T_C \quad (40)$$

суть константа Кюри и парамагнитная температура Кюри. Таким образом, “многэлектронный” подход обеспечивает простой вывод закона Кюри–Вейсса для коллективизированных магнетиков.

5. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В s - d -ОБМЕННОЙ МОДЕЛИ

Вторая многэлектронная модель, сыгравшая большую роль в физике твердого тела, – s - d -обменная модель Вонсовского, где рассматриваются две подсистемы электронов (коллективизированные и локализованные) и вводится обменное взаимодействие между ними.

Гамильтониан s - $d(f)$ -модели в простейшей форме имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} - I \sum_{i\sigma\sigma'} (\mathbf{S}_i \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}, \quad (41)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули, I – параметр s - $d(f)$ -обменного взаимодействия, $J_{\mathbf{q}}$ – гейзенберговское взаимодействие между локализованными спинами.

Как правило, s - d -взаимодействие не является большим, хотя иногда рассматривается предел сильного s - d -обмена (модель двойного обмена). Тем не менее даже слабое взаимодействие между локализованными и коллективизированными электронами может привести к перестройке электронного спектра при низких температурах вследствие особенностей резонансного рассеяния в многочастичных системах (эффект Кондо).

Имея гамильтониан более сложной формы, s - d -модель оказывается в некотором отношении более простой, чем модель Хаббарда, поскольку в ней возможно выполнить систематическое квазиклассическое разложение по малому параметру $1/(2S)$ [3], [21].

Обе модели позволяют получить полуфеноменологическое описание электронно-магнетонного взаимодействия в ферро- и антиферромагнитных металлах, удовлетворяющее требованиям симметрии. При построении теории возмущений по электронно-магнетонному рассеянию результаты в обеих моделях отличаются, как правило, только заменой $I \rightarrow U$ [14], [16].

Рассмотрим одноэлектронную функцию Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = [E - t_{\mathbf{k}\sigma} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)]^{-1}, \quad t_{\mathbf{k}\sigma} = t_{\mathbf{k}} - \sigma I \langle S^z \rangle. \quad (42)$$

В парамагнитном случае запишем цепочку уравнений движения

$$(E - t_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 1 - I \sum_{\mathbf{p}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^\sigma(E), \quad (43)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^\sigma(E) = \sum_{\sigma'} \langle\langle (\mathbf{S}_{\mathbf{p}} \sigma \sigma') c_{\mathbf{k}-\mathbf{p}\sigma'} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E,$$

$$(E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{p}})\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^\sigma(E) = -I(\langle \mathbf{S}_{\mathbf{p}} \mathbf{S}_{-\mathbf{p}} \rangle - 2m_{\mathbf{k}-\mathbf{p}})G_{\mathbf{k}\sigma}(E) - I(1 - 2n_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}) \sum_{\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^\sigma(E). \quad (44)$$

Здесь выполнено расщепление типа Нагаока, которое ранее использовалось для исследования эффекта Кондо в однопримесной модели (см. обзор [22]); $n_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$;

$$m_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}, \sigma'} \langle\langle (\mathbf{S}_{\mathbf{q}} \sigma \sigma') c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} \rangle\rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{dE}{e^{E/T} + 1} \sum_{\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^\sigma(E). \quad (45)$$

Выражая интегральный член в уравнении (44) из уравнения (43), мы можем формально решить эту систему уравнений и получить для собственной энергии

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(E) = \frac{2I^2 P_{\mathbf{k}}(E)}{1 - IR(E)}, \quad (46)$$

где

$$P_{\mathbf{k}}(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\langle \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \rangle - 2m_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}, \quad R(E) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - 2n_{\mathbf{k}}}{E - t_{\mathbf{k}}}. \quad (47)$$

Как следует из формулы (46), в третьем порядке по s - d -обмену в мнимой части собственной энергии возникает (логарифмический по энергии) вклад Кондо от интеграла с функциями Ферми $n_{\mathbf{k}}$; в то же время вещественная часть сингулярного вклада компенсируется членами с корреляторами $m_{\mathbf{k}}$.

В случае ферромагнетика во втором порядке теории возмущений для части с собственной энергией получаем

$$\Sigma_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = 2I^2 S \sum_{\mathbf{q}} \frac{N_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}}{E - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} + \omega_{\mathbf{q}}}, \quad \Sigma_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = 2I^2 S \sum_{\mathbf{q}} \frac{1 + N_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}}{E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow} - \omega_{\mathbf{q}}}, \quad (48)$$

где $N_{\mathbf{q}}$ – функции Бозе распределения магнонов. Записывая разложение уравнения Дайсона (42), имеем для плотности состояний

$$N_{\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t_{\mathbf{k}\sigma}) - \sum_{\mathbf{k}} \delta'(E - t_{\mathbf{k}\sigma}) \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) - \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{(E - t_{\mathbf{k}\sigma})^2}. \quad (49)$$

Рис. 2. Плотность состояний полуметаллического ферромагнетика с $|I| = 0.3$ при $T = 0$ для затравочной полуэллиптической зоны с шириной $W = 2$: а – $I > 0$; неквазичастичные состояния с $\sigma = \downarrow$ (нижняя половина рисунка) отсутствуют ниже уровня Ферми; в случае пустой зоны (штриховая линия) спин-поляронный хвост состояний со спином, направленным вниз, достигает дна полосы; пунктир – приближение среднего поля; б – $I < 0$; неквазичастичные состояния с $\sigma = \uparrow$ возникают ниже уровня Ферми.

Обсудим подробнее случай сильного полуметаллического ферромагнетика, где расщепление спиновых подзон превышает энергию Ферми, так что заполнена только одна из них [23]. Второй член в правой части выражения (49) дает перенормировку энергии квазичастиц. Третий член, который возникает из-за разреза собственной энергии $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)$, описывает некогерентный (неквазичастичный) вклад. Видно, что он не обращается в нуль в энергетической области, соответствующей “чужой” спиновой подзоне с противоположной проекцией $-\sigma$. Если пренебречь магннными частотами в знаменателях выражения (48), то при нулевой температуре парциальная плотность некогерентных состояний должна появляться скачком выше или ниже уровня Ферми для $I > 0$ и $I < 0$ соответственно из-за наличия функций распределения Ферми. Учет конечности магннных частот $\omega_{\mathbf{q}}$ ведет к размытию этих особенностей на энергетическом интервале $\omega_{\max} \ll E_F$ (рис. 2), причем величина $N_{-\sigma}(E_F)$ оказывается равной нулю.

В спин-волновой области случай полуметаллического ферромагнетика допускает последовательное рассмотрение путем разложения по числам заполнения электронов и магнонов либо квазиклассическое разложение. С этой целью могут быть использованы методы уравнений движения для функций Грина [3], производящего функционала [24] и разложение оператора эволюции [25]. При этом в каждом порядке возникают интегральные уравнения, описывающие электронно-магнонное рассеяние.

Составляя аналогично формуле (44) интегральные уравнения для функций Грина $\Gamma_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{\sigma}(E) = \langle\langle b_{\mathbf{p}}^{\sigma} c_{\mathbf{k}-\mathbf{p}-\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E$, находим при $I > 0$

$$G_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = G_{\mathbf{k}\uparrow}^0(E) = (E - t_{\mathbf{k}} + IS)^{-1}, \quad (50)$$

$$G_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \left(E - t_{\mathbf{k}} + IS - \frac{2IS}{1 - IR_{\mathbf{k}\uparrow}(E)} \right)^{-1}, \quad (51)$$

$$R_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = \sum_{\mathbf{q}} (1 - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}(E - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Таким образом, электроны со спином, направленным вверх, движутся свободно, а состояния со спином, направленным вниз, имеют некогерентный характер (функция Грина имеет разрез, но не имеет полюсов ниже уровня Ферми).

Для $I < 0$ результат для спина, направленного вниз совпадает с выражением (51) (при $n_{\mathbf{k}\uparrow} = 0$). Эта функция Грина дает точное решение задачи о взаимодействии электрона со спиновой волной и имеет спин-поляронный полюс $E_{\mathbf{k}}^*$, причем в пределе $I \rightarrow -\infty$ имеем

$$G_{\mathbf{k}\downarrow}^{-1}(E) = \frac{2S+1}{2S} \varepsilon - t_{\mathbf{k}}, \quad \varepsilon = E - I(S+1).$$

Напротив, функция Грина со спином, направленным вверх, имеет неполюсную структуру:

$$G_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = \left(E - t_{\mathbf{k}} - IS + \frac{2IS}{1 + IR_{\mathbf{k}\downarrow}(E)} \right)^{-1}, \quad (52)$$

$$R_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}(E + \omega_{\mathbf{q}}).$$

В пределе $I \rightarrow +\infty$ результат (51) дает правильный предельный переход

$$G_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \frac{1}{\varepsilon - t_{\mathbf{k}} + 2S/R_{\mathbf{k}\uparrow}(E)}, \quad \varepsilon = E + IS. \quad (53)$$

С другой стороны, выражение (52) в пределе $I \rightarrow -\infty$ дает качественно правильную неполюсную структуру, но все же не обеспечивает согласия с атомным пределом, поскольку при расщеплениях некорректно учитывается сильное внутриаомное s - d -взаимодействие. Поэтому при больших $|I|$, как и в модели Хаббарда, необходим переход к атомному представлению. Вычисление с его помощью дает вблизи нижнего края зоны

$$G_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = \frac{2S/(2S+1)}{E - E_{\mathbf{k}}^* + (2S-n)/R_{\mathbf{k}\downarrow}^*(E)}, \quad R_{\mathbf{k}\downarrow}^*(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^*}{E - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^* + \omega_{\mathbf{q}}}. \quad (54)$$

Итак, метод уравнений движения для двухвременных функций Грина в сочетании с многоэлектронным представлением позволяет успешно описать электронный спектр систем с сильными корреляциями.

Список литературы

- [1] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *Докл. АН СССР*, **126**:1 (1959), 53–56; Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71**:5 (1960), 71–116; В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, *Метод функций Грина в статистической механике*, Физматлит, М., 1961.
- [2] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1975.
- [3] M. I. Auslender, V. Yu. Irkhin, *J. Phys. C*, **18**:18 (1985), 3533–3545.

- [4] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **7**:2 (1971), 250–261; **49** (1981), 219–233; **50**:2 (1982), 261–271.
- [5] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **276**:1365 (1963), 238–257.
- [6] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **277**:1369 (1964), 237–259.
- [7] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **281**:1386 (1964), 401–419.
- [8] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **285**:1403 (1965), 542–560.
- [9] V. Yu. Irkhin, Yu. P. Irkhin, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **183**:1 (1994), 9–58; V. Yu. Irkhin, *Phys. Metals Metallography*, **110**:7 (2010), 602–641, arXiv:1103.5123.
- [10] В. Ю. Ирхин, Ю. П. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях*, УрО РАН, Екатеринбург, 2004.
- [11] А. О. Anokhin, V. Yu. Irkhin, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **165**:1 (1991), 129–142.
- [12] А. О. Anokhin, V. Yu. Irkhin, M. I. Katsnelson, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**:11 (1991), 1475–1491.
- [13] В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *ТМФ*, **50**:3 (1982), 466–476.
- [14] V. Yu. Irkhin, M. I. Katsnelson, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**:34 (1990), 7151–7171.
- [15] D. M. Edwards, J. A. Hertz, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **3**:12 (1973), 2191–2205.
- [16] В. Ю. Ирхин, М. И. Кацнельсон, *ФММ*, **66**:1 (1988), 41–52.
- [17] V. Yu. Irkhin, A. V. Zarubin, *Eur. Phys. J. B*, **38**:4 (2004), 563–570, arXiv:cond-mat/0103054.
- [18] V. Yu. Irkhin, A. V. Zarubin, *Phys. Rev. B*, **70**:3 (2004), 035116, 16 pp., arXiv:cond-mat/0212586; *Solid State Phenomena*, **168–169** (2011), 469–472.
- [19] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Modern Phys.*, **68**:1 (1996), 13–125.
- [20] M. I. Auslender, V. Yu. Irkhin, M. I. Katsnelson, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21** (1988), 5521.
- [21] Э. Л. Нараев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, М., 1979.
- [22] J. Kondo, “Theory of dilute magnetic alloys”, *Solid State Physics*, **23**, eds. F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich, Academic Press, New York, 1969, 183–281.
- [23] M. I. Katsnelson, V. Yu. Irkhin, L. Chioncel, A. I. Lichtenstein, R. A. de Groot, *Rev. Mod. Phys.*, **80**:2 (2008), 315–378, arXiv:0711.0872.
- [24] M. I. Auslender, V. Yu. Irkhin, M. I. Katsnelson, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **17**:4 (1984), 669–681.
- [25] В. Ю. Ирхин, *ФММ*, **64** (1987), 260–268.

Поступила в редакцию 17.01.2011