

Л.Д. Дідух, О.І. Крамар.

Тернопільський державний технічний університет ім. І.Пулюя

**ФЕРОМАГНЕТИЗМ В ДВОКРАТНО ОРБІТАЛЬНО ВИРОДЖЕНІЙ
МОДЕЛІ ГАББАРДА З СИЛЬНИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ.**

Пояснення феромагнетизму в сполуках перехідних металів, незважаючи на значну кількість робіт та різноманіття теоретичних підходів, залишається актуальною задачею фізики сильно корельованих систем. Навіть в рамках однозонної узагальненої моделі Габбарда висновок про існування феромагнітного впорядкування є предметом серйозних дискусій. Разом з тим вузькозонним матеріалам на основі 3d-металів притаманне орбітальне виродження зони провідності. В зв'язку з цим доцільно розглянути узагальнення моделі Габбарда (враховано вплив заселеності вузлів на процеси переносу – так-званий корельований перенос електронів) на випадок двократного орбітального виродження і проаналізувати можливості виникнення у такій системі спонтанного магнітного моменту. У випадку сильної внутрішньоатомної кулонівської взаємодії $U \gg t$ та сильного гундівського зв'язку ($U \gg U' - J_0$) загальний гамільтоніан за допомогою канонічного перетворення може бути зведений до ефективного гамільтоніану (ЕГ). Важливою рисою отриманого ЕГ є феромагнітний характер ефективної обмінної взаємодії, котра поряд з трансляційними механізмами є стабілізуючим фактором для магнітного впорядкування.

З використанням процедури проектування в рівнянні руху та модифікації узагальненого наближення Гартрі-Фока в роботі отримано функції Гріна (для випадків заповнення зони $n < 1$ та $n > 1$) та енергетичні спектри для верхньої та нижньої квазічастинкових підзон. На їх основі проведено розрахунок енергії та намагніченості в основному стані для випадків симетричної форми затравочної густини станів. Зокрема, показано, що для прямокутної густини станів основним є феромагнітний стан з насиченим магнітним моментом для всієї області електронних концентрацій. У випадку напів-еліптичної густини станів існує критичне значення заповнення (залежне від параметра ефективної обмінної взаємодії; $n_1 = 0.28$ при $zJ_{\text{eff}}/w = 0$), при перевищенні якого виникає ненасичений магнітний момент. При збільшенні концентрації електронів в зоні провідності в системі реалізується насичений феромагнітний стан ($n_2 = 0.37$ для $zJ_{\text{eff}}/w = 0$). Збільшення параметра ефективного обміну zJ_{eff}/w приводить до розширення області існування феромагнітного впорядкування, а корельований перенос слабо впливає (незначно сприяє)

ферромагнітним тенденціям (на відміну від невиродженої моделі, де цей вплив більш значний).

У випадку ненульових температур при використанні прямокутної густини станів отримано рівняння на намагніченість, температуру Кюрі, магнітну сприйнятливість системи, на основі яких з використанням числових методів розраховано вказані величини як функції параметрів моделі. Отримані температурні залежності намагніченостей при різних заповненнях зони мають типову поведінку (при зростанні температури T відбувається зменшення m), однак існує критичне значення n , при якому змінюється характер зміни намагніченості з неперервного (перехід другого роду) на стрибкоподібний (перехід першого роду). Важливою особливістю концентраційної залежності температури Кюрі є її зменшення в певній області n при збільшенні магнітного моменту. Цей факт дає змогу інтерпретувати специфічну поведінку температури Кюрі в сполуках $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ та $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$ при зміні заповнення зони провідності.