

# К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ДИБОРИДОВ

*Р. О. Зайцев\**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

*Н. В. Терёхина\*\**

*Государственный научный центр «НИИТеплоприбор»  
129085, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 ноября 2000 г.

Изучаются электронная структура и магнитные свойства соединений  $MnB_2$  и  $CrB_2$ , имеющих гексагональную решетку типа  $AlB_2$ . Рассмотрение ведется в рамках обобщенной модели Хаббарда с бесконечной энергией электрон-электронного отталкивания в одном и том же атоме. Получены уравнения для нахождения спиновой магнитной восприимчивости, из которых определены условия ферромагнитной неустойчивости, и построена фазовая диаграмма существования ферромагнитного упорядочения.

PACS: 05.70.Fh, 75.50.Cc, 78.20.Bh

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальное изучение диборидов металлов  $MeB_2$  обнаруживает возрастание магнитной восприимчивости в ряду переходных  $3d$ -металлов ( $Me = Ti, V, Cr$ ) [1]. Восприимчивость  $CrB_2$  на порядок превышает магнитную восприимчивость всех парамагнитных диборидов IV–VI групп.

Поскольку дибориды железа, кобальта и никеля не синтезируются, оказывается, что соединение  $MnB_2$  — единственный ферромагнитный диборид с небольшой температурой перехода (примерно 143–157 К) и небольшим магнитным моментом насыщения, примерно  $0.19$ – $0.25 \mu_B$ .

Электрические и магнитные свойства слоистых соединений диборидов переходных элементов со структурой типа  $AlB_2$  характеризуются наличием сильно отщепленных  $(2xy, x^2 - y^2)$ - $d$ -состояний, которые коллективизируются через ионы бора, находящиеся в вырожденных  $p_x$ -,  $p_y$ -состояниях.

Электронное состояние комплексов  $CrB_2$  и  $MnB_2$  близко к половинному заполнению как для катионов  $Cr^+$ ,  $Mn^{2+}$  ( $3d^5$ ), так и для анионов  $B^-$  ( $2s^2 2p^2$ ).

В общем случае условие электронейтральности, выраженное через средние числа заполнения  $d$ -электронов ( $n_d$ ) и  $p$ -электронов ( $n_p$ ), для изучаемых соединений  $MnB_2$  и  $CrB_2$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} n_d + 2n_p &= 8 \quad \text{для } CrB_2, \\ n_d + 2n_p &= 9 \quad \text{для } MnB_2, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $n_d, n_p$  — число  $d$ -,  $p$ -электронов, приходящихся на одну ячейку, см. рис. 1.

Согласно зонным расчетам [1], проделанным для  $CrB_2$ , заряд катиона хрома равен 0.7, что, согласно условию (1), отвечает  $n_d = 5.3$ ,  $n_p = 1.35$ . Отсюда следует, что в общем случае  $5 < n_d < 6$  и недозаполненной оказывается двухэлектронная  $(3z^2 - r^2)$ -оболочка хрома, а  $1 < n_p < 3/2$ .

Несмотря на отсутствие расчетов для  $MnB_2$ , естественно предположить, что заряд катиона Mn также не превышает единицы<sup>1)</sup>. Используя условие электронейтральности, можно заключить, что по-прежнему  $1 < n_p < 3/2$ , однако  $6 < n_d < 7$ .

<sup>1)</sup> Поскольку электроотрицательности Cr(1.6) и Mn(1.5) различаются мало, это предположение находится в согласии с принципом электронейтральности Полинга.

\*E-mail: zaitsev@mbslab.kiae.ru

\*\*E-mail: tnv-tnv@yahoo.com

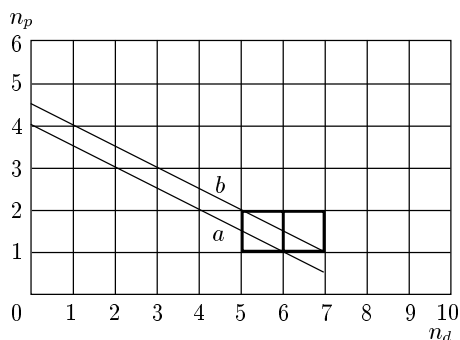


Рис. 1. Линии электронной нейтральности в переменных  $(n_d, n_p)$ :  $a - n_d + 2n_p = 8$  для  $\text{CrB}_2$ ;  $b - n_d + 2n_p = 9$  для  $\text{MnB}_2$

Учитывая гексагональную симметрию, можно утверждать, что в  $\text{CrB}_2$  катион хрома имеет полностью заполненную четырехэлектронную  $(xz, yz)$ -оболочку и недозаполненную двухэлектронную  $(3z^2 - r^2)$ -оболочку.

В соединении  $\text{MnB}_2$  у катиона марганца только начинается заполнение четырехэлектронной  $(2xy, x^2 - y^2)$ -оболочки, в то время как остальные оболочки полностью заполнены.

В настоящей работе проблема возникновения ферромагнетизма  $\text{MnB}_2$  изучается на основе представления о сильном взаимодействии электронов, принадлежащих одному и тому же атому. Соответствующие матричные элементы, называемые также энергией Хаббарда, для хрома, марганца и бора (равные соответственно 14, 15 и 8 эВ) превышают энергию электронного перехода к соседним атомам и ниже считаются бесконечными.

Будет показано, что в случае заполнения нижней электронной хаббардовской подзоны (для  $e$ -электронов марганца) увеличение числа электронов приводит к возрастанию полного числа одночастичных спиновых состояний, что соответствует парамагнитной (положительной) поправке к магнитной восприимчивости.

Если же происходит заполнение верхней хаббардовской подзоны (для  $(3z^2 - r^2)$ -электронов хрома), то увеличение числа электронов приводит к возрастанию числа двочных состояний с нулевым спином, что приводит к антиферромагнитному вкладу в магнитную восприимчивость.

Соответствующие борновские амплитуды рассеяния, вычисленные на поверхности Ферми, имеют противоположные знаки, и поэтому спиновая часть магнитной восприимчивости для  $\text{MnB}_2$  при  $T = 0$

оказывается бесконечной, в то время как  $\text{CrB}_2$  остается парамагнетиком при всех температурах.

Вычисление магнитной восприимчивости проводится с помощью дифференцирования уравнения состояния, записанного в рамках нуль-петлевого приближения (приближение Хаббард I), а также однопетлевого приближения для  $d$ -электронов марганца.

## 2. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПРИ НУЛЕВОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Для нахождения спектра элементарных возбуждений используем обобщенную модель Хаббарда-Эмери [2, 3], в которой учитываются различные интегралы перескока между ближайшими анионами бора,  $t^{(p)}$ , а также между ближайшими анионами бора и катионами марганца,  $t$ :

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \hat{p}_{\nu, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{p}_{\nu', \sigma}(\mathbf{r}') t_{\nu, \nu'}^{(p)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \left\{ \hat{d}_{\lambda, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{p}_{\nu, \sigma}(\mathbf{r}') t_{\sigma, \nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \text{H.c.} \right\} + \sum_{\mathbf{r}} \varepsilon_p \hat{p}_{\nu, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{p}_{\nu, \sigma}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}} \varepsilon_d \hat{d}_{\lambda, \sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{d}_{\lambda, \sigma}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Здесь  $\hat{d}_{\lambda, \sigma}^+(\mathbf{r})$ ,  $\hat{p}_{\nu, \sigma}^+(\mathbf{r})$  и  $\hat{d}_{\lambda, \sigma}(\mathbf{r})$ ,  $\hat{p}_{\nu, \sigma}(\mathbf{r})$  — операторы рождения и уничтожения  $d$ - и  $p$ -электронов.

В случае хрома происходит заполнение  $3z^2 - r^2$ -оболочки, так что индекс  $\lambda$  имеет единственное значение. Для соединения  $\text{MnB}_2$  индексы  $\lambda$  пробегает два значения соответственно двум вырожденным  $(2xy, x^2 - y^2)$ -состояниям катионов. В обоих случаях индексы  $\nu$  принимают два значения соответственно двум вырожденным  $(x, y)$ -состояниям бора.

В изучаемом случае решетки типа  $\text{AlB}_2$  расстояния между ближайшими катионами металла в два раза превышают расстояния между ближайшими анионами бора, которые, в свою очередь, имеют ту же величину, что и расстояния металл-бор-металл. По этой причине ниже катион-катионные перескоки не учитываются (см., например, монографию [1]).

Выбирая расположение осей, как это показано на рис. 2, нетрудно вычислить все четыре матричных элемента оператора перескока.

Для  $\text{MnB}_2$  (и  $\text{CrB}_2$ ) ниже используется простейшая модель, где вместо точных невырожденных шести (или пяти) ветвей выбирается модель, соответствующая расположению энергетических уровней в  $\Gamma$ -точке.

Для соединения  $\text{MnB}_2$  имеем две двукратно вырожденные гибридованные и одну двукратно вы-

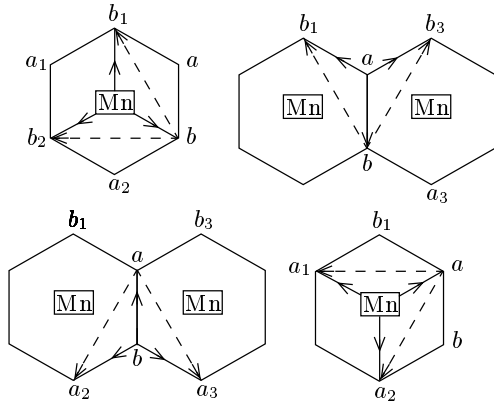


Рис. 2. Отдельные фрагменты структуры  $MnB_2$ . Сплошные линии со стрелками изображают направления перескоков. Штриховые линии — векторы элементарных трансляций

рожденную негибризованную подзону  $p$ -электронов:

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{p}}^{\pm} &= \frac{v}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(r+v)^2 + 4g_p^2 f_p g_e^2 f_e |t_{\mathbf{p}}|^2} - \mu, \\ \mu &= -\frac{\varepsilon_p + \varepsilon_e}{2}, \quad \xi_{\mathbf{p}} = -v\tau_{\mathbf{p}} + \frac{r}{2} - \mu, \\ r &= \varepsilon_p - \varepsilon_e, \quad v = g_p^2 f_p. \end{aligned} \quad (3)$$

Перескоки между катионами переходного элемента не учитываются, так как расстояние между ближайшими катионами равно  $3.02 \text{ \AA}$  заметно превышает минимальное анион-катионное расстояние равно  $2.31 \text{ \AA}$ , которое, в свою очередь, превышает расстояние между анионами бора ( $1.74 \text{ \AA}$ ).

Удается показать, что наличие узкой логарифмической особенности в плотности состояний для множителя

$$\tau_{\mathbf{p}} = \frac{2}{9} \left[ \frac{3}{2} + \cos \alpha + \cos \beta + \cos(\alpha + \beta) \right]$$

незначительно меняет фазовую диаграмму в ее отдельных точках. В остальной широкой области изменения энергетической переменной  $\tau_{\mathbf{p}}$  соответствующая плотность состояний близка к постоянной, так что фактически следующие ниже вычисления проводятся в модели плоской зоны.

Зависимость от поперечного импульса  $p_z$  входит в определение энергии возбуждений через множители  $x \cos^2(p_z/2)$ , так что окончательное выражение для плотности состояний вычисляется по следующей формуле:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 dx \int_0^{\pi/2} d\alpha \delta(\varepsilon - x \cos^2 \alpha) = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}}. \quad (4)$$

Таким образом, при малых энергиях плотность состояний соответствует одномерному движению, поскольку  $\rho \approx 1/\sqrt{\varepsilon}$ . При больших энергиях плотность состояний соответствует трехмерному изотропному спектру:  $\rho \approx \sqrt{1-\varepsilon}$ .

Движение вдоль слоев бора имеет чисто двумерный характер. Соответствующая плотность состояний имеет узкий пик Ван Хова.

### 3. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Определим нормальные координаты  $A^\lambda(\mathbf{p})$ , через которые выражаются диагональные элементы одночастичной виртуальной функции Грина:

$$A^\lambda(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \times \left[ 1 + \text{sign } \lambda \frac{r+v}{\sqrt{(r+v)^2 + 4f_p f_e g^2 \cos^2(p_z/2) W_{\mathbf{p}}}} \right]. \quad (5)$$

Записанные через эти координаты уравнения состояния для области  $n_{p,e} < 1$  имеют следующий вид:

$$n_p = 2f_p \left\{ \sum_{\mathbf{p}} \left[ n_F(\xi(\mathbf{p})) + \sum_{p_z, \lambda=\pm} A^\lambda(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right] \right\}, \quad (6)$$

$$n_e = 4f_e \left\{ \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda=\pm} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right\}. \quad (7)$$

Здесь  $f_{e,p} = 1 - 3n_{e,p}/4$ .

Как уже было отмечено, наиболее актуальной следует считать область, где заряд катионов Mn не превышает единицы. При этом согласно уравнению электронейтральности (1) необходимо рассмотреть область  $1 < n_p < 2$ ,  $6 < n_d < 7$ , или  $0 < n_e < 1$ , где  $n_e = n_d - 6$ .

Соответственно этому, запишем уравнения состояния для области  $0 < n_e < 1$ , или  $1 < n_p < 2$ :

$$n_p = 1 + 2g_p^2 f_p \left\{ \sum_{\mathbf{p}} \left[ n_F(\xi(\mathbf{p})) + \sum_{p_z, \lambda=\pm} A^\lambda(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right] \right\}, \quad (8)$$

$$n_e = 4f_e \left\{ \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda=\pm} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right\}, \quad (9)$$

где теперь  $f_p = (2 + n_p)/12$ , а энергия возбуждений и нормальные координаты зависят от произведения  $g_p^2 f_p$ , где  $g_p^2 = 3/2$  — сумма квадратов генеалогических коэффициентов:

$$A^\lambda(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \text{sign } \lambda \frac{r+v}{\sqrt{(r+v)^2 + 4g_p^2 f_p f_d \cos^2(p_z/2) W_{\mathbf{p}}}} \right], \quad (10)$$

$$W_{\mathbf{p}} = 2t^2 \frac{3}{4} \sqrt{3 + 2S_{\mathbf{p}}},$$

$$S_{\mathbf{p}} = \cos p_x + \cos \left( \frac{p_x}{2} + \frac{\sqrt{3}p_y}{2} \right) + \cos \left( \frac{p_x}{2} - \frac{\sqrt{3}p_y}{2} \right), \quad v = f_p g_p^2 |t_p| \frac{3}{2}. \quad (11)$$

$$\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z) = \frac{v}{2} + \text{sign } \lambda \times \sqrt{\left( \frac{r+v}{2} \right)^2 + g_p^2 f_p f_d \cos^2 \left( \frac{p_z}{2} \right) W_{\mathbf{p}}} - \mu,$$

$$\xi(\mathbf{p}) = -g_p^2 f_p t_p \frac{\sqrt{3 + 2S(\mathbf{p})}}{2} + \varepsilon_p. \quad (12)$$

Для соединения  $\text{CrB}_2$  необходимо рассмотреть заполнение той же  $p_{x,y}$ -оболочки электронов бора. Если ввести обозначение  $n_z = n_d - 4$  как число электронов на незамкнутой  $(3z^2 - r^2)$ -оболочке хрома, то для актуальной области  $1 < n_z < 2$  имеем

$$n_z = 1 + 2f_z \left\{ \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda = \pm} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right\}, \quad (13)$$

$$n_p = 1 + 2g_p^2 f_p \left\{ \sum_{\mathbf{p}} \left[ n_F(\xi(\mathbf{p})) + \sum_{p_z, \lambda = \pm} A^\lambda(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right] \right\}, \quad (14)$$

где теперь везде вместо  $f_e$  фигурирует  $f_z = n_z/2$ .

#### 4. ФЕРРОМАГНИТНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ

Условия возникновения ферромагнитной неустойчивости в однопетлевом приближении легко получить, если заметить, что в области  $0 < n_e < 1$  одночастичные числа заполнения  $n_e^\sigma$  входят в уравнения состояния через концевой множитель, который равен сумме средних чисел заполнения пустых и одночастичных состояний:

$$f_e^\sigma = n_0 + n_e^\sigma, \quad (15)$$

поэтому  $\delta n_e^\sigma = \delta f_e^\sigma$ .

Точно так же в области  $1 < n_z < 2$  одночастичные числа заполнения  $n_z^\sigma$  входят в уравнения состояния через концевой множитель, равный сумме средних чисел заполнения двоичных состояний с нулевой суммарной проекцией спина:

$$f_z^\sigma = n_{\text{II}} + n_z^{-\sigma}, \quad (16)$$

поэтому  $\delta n_z^\sigma = -\delta f_z^\sigma$ .

Можно также заметить, что в области  $1 < n_p < 2$  двухчастичные числа заполнения  $n_{\text{II}}^\sigma$  входят в уравнения состояния через комбинации концевых множителей,  $g_1^2 f_1^\sigma + g_2^2 f_2^\sigma$ . Два концевых множителя  $f_{1,2}^\sigma$  выражаются через суммы одночастичных и двухчастичных состояний:

$$f_1^\sigma = n_{\text{II}}^\sigma + n_1^\sigma, \quad f_2^\sigma = n_{\text{II}}^0 + n_1^{-\sigma}. \quad (17)$$

Отсюда находим вариацию двухчастичных чисел заполнения:

$$\delta n_{\text{II}}^\sigma = \delta f_1^\sigma + \delta f_2^\sigma, \quad \delta n_{\text{II}}^0 = 0. \quad (18)$$

Для  $\text{MnB}_2$  эти соотношения позволяют получить уравнения

$$\delta n_e^\sigma = \delta f_e^\sigma = \tilde{K}_e \delta f_e^\sigma + f_e D_{e,p} \sum_k g_k^2 \delta f_k^\sigma - f_e D_0^e \delta H, \quad (19)$$

$$\delta n_{\text{II}}^\sigma = \sum_k \delta f_k^\sigma = \tilde{K}_p \sum_k g_k^2 \delta f_k^\sigma + g_p^2 f_p D_{p,e} \delta f_e^\sigma - g_p^2 f_p D_0^p \delta H. \quad (20)$$

Здесь введены удобные обозначения

$$\tilde{K}_e = K_e + f_e D_e, \quad \tilde{K}_p = K_p + g_p^2 f_p D_p, \quad g_p^2 = \sum_k g_k^2 = \frac{3}{2}. \quad (21)$$

Коэффициенты  $D_p, D_{p,e}$  и  $D_d, D_{e,p}$  — вариационные производные от  $K_p$  и  $K_e$ , которые определены ниже.

Недостающее уравнение, связывающее между собой вариации одночастичных и двухчастичных  $p$ -состояний, получаем с помощью определения диагональных компонент одночастичной функции Грина, записанной с помощью вспомогательных коэффициентов  $b_k$ , удовлетворяющих условию ортогональности:  $g_1 b_1 + g_2 b_2 = 0$ .

Искомое соотношение, записанное в нуль-петлевом приближении, имеет следующий вид (см. работы [4, 5]):

$$b_1 g_1 \delta n_{11}^\sigma = K_p (g_1 b_1 \delta f_1^\sigma + g_2 b_2 \delta f_2^\sigma). \quad (22)$$

Используя условие ортогональности, а также соотношение (22), находим связь между вариациями концевых множителей:

$$\delta f_1^\sigma (1 - K_p) + \delta f_2^\sigma (1 + K_p) = 0. \quad (23)$$

Уравнения (19), (20), (22) и (23) позволяют определить три независимых вариации концевых множителей. Условия разрешимости этой системы уравнений при  $\delta H = 0$  позволяют найти условие возникновения ферромагнитной неустойчивости ( $n_e < 1, 1 < n_p < 2$ ):

$$K_p(1 - K_p)(1 - K_e) = f_e K_p(1 - K_p)D_e + f_p g_p^2(1 - K_e)D_p \left(\frac{1}{3} + K_p\right) - f_p g_p^2 f_e \left(\frac{1}{3} + K_p\right) (D_p D_e - D_{p,e} D_{e,p}). \quad (24)$$

При этом  $f_e = 1/(3K_e + 1), f_p = 1/(4 - K_p), g_p^2 = 3/2$ . При  $T = 0$ , когда  $D_e D_p - D_{p,e} D_{e,p} = 0$ , удается также найти поправку, отвечающую однопетлевому приближению для  $d$ -электронов:

$$K_p(1 - K_p)(1 - K_e)(1 - S_e) = f_e K_p(1 - K_p)D_e + g_p^2 f_p(1 - K_e) \left(\frac{1}{3} + K_p\right) D_p, \quad (25)$$

где

$$S_e = \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon_e} = \frac{1}{f_e} \left\{ y \rho(y) \left[ 1 + \text{sign}(r+v) \frac{1}{\sqrt{1+sy^2}} \right] - \frac{1}{4} \text{sign}(r+v) s \int_y^1 \frac{x^2 \rho(x) dx}{(1+sx^2)^{3/2}} \right\}, \quad (26)$$

где в нашем случае  $\rho(y) = (4/\pi) \sqrt{1-y^2}$ .

Учет однопетлевых поправок для  $p$ -электронов приводит к весьма громоздким, частично сокращающимся поправкам, которые ниже не учитываются.

В случае  $\text{CrB}_2$ , когда  $1 < n_z < 2, 1 < n_p < 2$ , условие ферромагнитной неустойчивости имеет следующий вид:

$$K_p K_z (1 - K_p) = g_p^2 f_p K_z D_p \left(\frac{1}{3} + K_p\right) + f_z K_p (1 - K_p) D_z - f_z g_p^2 f_p \left(\frac{1}{3} + K_p\right) (D_p D_z - D_{p,z} D_{z,p}). \quad (27)$$

Здесь

$$K_\nu = \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)), \quad (28)$$

$$K_p = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\mathbf{p}} \left[ n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p})) + \sum_{p_z, \lambda} A^\lambda(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right] \right\}, \quad (29)$$

$$D_\nu = \frac{\delta K_\nu}{\delta f_\nu}, \quad D_p = \frac{\delta K_p}{\delta (g^2 f_p)}, \quad (30)$$

$$D_{\nu,p} = \frac{\delta K_\nu}{\delta (g_p^2 f_p)}, \quad D_{p,\nu} = \frac{\delta K_p}{\delta f_\nu},$$

где  $\nu = e$  или  $z$ .

В общем случае условия возникновения ферромагнетизма находим через вариации концевых множителей, которые входят в уравнения состояния, записанные в приближении Хаббард I:

$$n_p = [n_p] + R_p f_p \left\{ \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_\nu(\mathbf{p})) + \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda} A_\nu^{(-\lambda)}(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right\}, \quad (31)$$

$$n_z = [n_z] + R_z f_z \left\{ \sum_{p_z, \mathbf{p}, \lambda} A^\lambda(\mathbf{p}, p_z) n_F(\xi^\lambda(\mathbf{p}, p_z)) \right\}. \quad (32)$$

Здесь  $R_{p,z}$  — кратности вырождения  $([n_{p,z}] + 1)$ -частичных состояний,  $f_{p,z}$  — концевые множители, которые определены для каждого целочисленного интервала и сведены в таблицу.

Область	$g_p^2$	$f_p$	$K_p$	$n_p$	$\Gamma_p$	$R_p$
$0 < n_p < 1$	1	$\frac{4 - 3n_p}{4}$	$\frac{n_p}{4 - 3n_p}$	$\frac{4K_p}{1 + 3K_p}$	0	4
$1 < n_p < 2$	$\frac{3}{2}$	$\frac{2 + n_p}{12}$	$\frac{4(n_p - 1)}{2 + n_p}$	$\frac{2(2 + K_p)}{4 - K_p}$	$\frac{1}{3}$	3
$2 < n_p < 3$	$\frac{3}{2}$	$\frac{6 - n_p}{12}$	$\frac{3(n_p - 2)}{6 - n_p}$	$\frac{6(1 + K_p)}{3 + K_p}$	$-\frac{4}{3}$	4
$3 < n_p < 4$	1	$\frac{3n_p - 8}{4}$	$\frac{4(n_p - 3)}{3n_p - 8}$	$\frac{4(3 - 2K_p)}{4 - 3K_p}$	-1	1
Область	$g_z^2$	$f_z$	$K_z$	$n_z$	$\Gamma_z$	$R_z$
$0 < n_z < 1$	1	$\frac{2 - n_z}{2}$	$\frac{n_z}{2 - n_z}$	$\frac{2K_z}{1 + K_z}$	0	2
$1 < n_z < 2$	1	$\frac{n_z}{2}$	$2 - \frac{2}{n_z}$	$\frac{2}{2 - K_z}$	-1	1

Условия возникновения ферромагнетизма для области  $n_{p,z} < 1$  нетрудно получить с помощью простого дифференцирования уравнений состояния.

При  $T = 0$  общее уравнение для определения границы парамагнитной и ферромагнитной фаз имеет следующий вид:

$$K_p K_z (1 - K_p)(1 - K_z) - L_z K_p (1 - K_p)(\Gamma_z + K_z) - L_p K_z (1 - K_z)(\Gamma_p + K_p) = 0. \quad (33)$$

Фигурирующие здесь  $\Gamma_{p,z}$  — безразмерные амплитуды рассеяния высокоспиновых возбуждений, вычисленные для каждого целочисленного интервала изменения средних чисел заполнения  $n_{p,z}$ , приведены в таблице,  $L_p = g_p^2 f_p D_p$ ,  $L_z = f_z D_z$ . В этой же таблице представлена связь между коэффициентами  $K_{p,z}$  и средними числами заполнения. Для  $e$ -электронов имеем ту же таблицу, но с заменой индекса  $p$  на  $e$ .

Рассмотрим два случая.

А)  $0 < n_z < 1$ ,  $\Gamma_z = 0$  и  $d$ -подсистема резонирует между пустыми и одночастичными состояниями. В качестве условия возникновения ферромагнетизма получаем соотношение

$$K_p(1 - K_p)(1 - K_z) = f_z D_z K_p(1 - K_p) + g_p^2 f_p D_p (1 - K_z)(\Gamma_p + K_p). \quad (34)$$

Оно было использовано при изучении  $MnB_2$  (когда  $1 < n_p < 2$ ,  $\Gamma_p = 1/3$ ,  $K_z \rightarrow K_e < 1$ ).

В)  $1 < n_z < 2$ ,  $\Gamma_z = -1$ , а  $d$ -подсистема резонирует между одночастичными и двухчастичными состояниями. В качестве условия возникновения ферромагнетизма получаем следующее соотношение:

$$K_p K_z (1 - K_p) = -f_z D_z K_p (1 - K_p) + g_p^2 f_p D_p K_z (\Gamma_p + K_p). \quad (35)$$

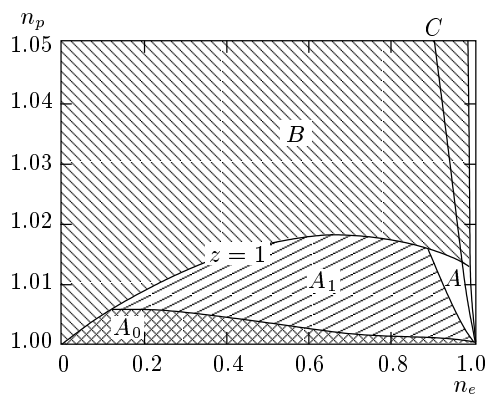
Второй случай имеет отношение к соединению  $CrB_2$ , когда  $1 < n_p < 2$ .

### 5. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Наиболее общее свойство систем с бесконечным хаббардовским отталкиванием состоит в том, что при малом числе возбуждений амплитуда рассеяния возбуждений с противоположными проекциями спинов является положительной, что соответствует тенденции к ферромагнетизму. В случае  $MnB_2$  этому обстоятельству отвечают положительные значения величин  $D_e$  и  $D_p$  как при заполнении нижней гибридной подзоны, так и при заполнении нижней половины подзоны бора.

Сравнение правой части (34) и (35) показывает, что в областях, где величины  $D_e$ ,  $D_z$  и  $D_p$  имеют одинаковые знаки, в случае  $CrB_2$  имеет место существенная компенсация.

Непосредственные вычисления показывают, что именно в той области, где числа заполнения  $n_z$  и



**Рис. 3.** Магнитная фазовая диаграмма при  $T = 0$  и в области малых  $n_p - 1$ . Ферромагнитные области заштрихованы,  $z = 1$  — граница начала заполнения  $p$ -подзоны бора;  $A_0$  — ферромагнитная область, нуль-петлевое приближение;  $A_1$  — ферромагнитная область, однопетлевое приближение;  $B$  — ферромагнитная область;  $C$  — линия электронейтральности

$n_p$  связаны через соотношение электронейтральности  $2n_p + n_z = 4$ , коэффициенты  $D_p$  и  $D_z$  имеют одинаковый порядок величины, а уравнение (35) не имеет решений.

Отсюда можно заключить, что соединение  $\text{CrV}_2$  при любых температурах остается парамагнитным.

В качестве иллюстрации в Приложении рассмотрен частный случай, при котором энергия перескока вдоль слоев бора равна энергии перескока между ближайшими слоями бора и марганца:  $t_p = t$ .

При  $T = 0$  вместо независимых параметров  $\varepsilon_p$  и  $\varepsilon_e$  используем переменные  $y = \sqrt{\varepsilon}$ ,  $s = 4g_p^2 f_p f_d t^2 / (r + v)^2$ , где  $v = g_p^2 f_p t_p$ ,  $r = \varepsilon_p - \varepsilon_e$ .

Сначала рассмотрим область энергий, где заполняется нижняя гибридная подзона, в то время как подзона бора остается пустой.

Как следует из рис. 3, в этих условиях ферромагнитное упорядочение существует в весьма узкой области отклонения числа  $p$ -электронов от единицы (область  $A_0$ ).

С увеличением энергии происходит быстрое уменьшение величины  $D_p$ , так что система остается парамагнитной (область  $A$ ) до тех пор, пока наряду с заполнением нижней подзоны не начнется заполнение боровой подзоны (область  $B$ ).

Как видно на рис. 4, линия электронейтральности  $\text{MnV}_2$  пересекает достаточно широкую область ферромагнитного упорядочения, где происходит одновременное заполнение нижней гибридной и подзоны бора. Учет однопетлевых поправок приво-

дит к расширению возможной области существования ферромагнетизма, см. рис. 4б.

Ферромагнитная область, полученная в нуль-петлевом приближении и изображенная на рис. 4а, занимает значительно меньшую часть фазовой диаграммы, однако в обоих случаях линия электронейтральности  $\text{MnV}_2$  пересекает ферромагнитную область в достаточно широкой ее части.

Как видно на рис. 3 и 4, область ферромагнитной неустойчивости находится в области малого числа возбуждений как для  $p$ -, так и для  $e$ -возбуждений.

Линия электронейтральности  $\text{MnV}_2$  пересекает ферромагнитную часть фазовой диаграммы в достаточно широкой области, которая соответствует одновременному заполнению нижней гибридной и широкой  $p$ -подзоны бора.

Таким образом, мы получаем качественное объяснение существования ферромагнетизма  $\text{MnV}_2$  — единственного ферромагнитного диборида.

## 6. ВЫВОДЫ

В обоих соединениях,  $\text{CrV}_2$  и  $\text{MnV}_2$ ,  $p$ -электроны резонируют между одночастичными ( $S = 1/2$ ) и триплетными ( $S = 1$ ) двухчастичными состояниями. По этой причине  $\text{CrV}_2$  имеет достаточно большую восприимчивость, а  $\text{MnV}_2$  оказывается ферромагнитным во всей области по числам  $n_p$ , для которых амплитуда  $p$ - $p$ -рассеяния оказывается положительной.

Что же касается гибридных  $p$ - $d$ -возбуждений, то для  $\text{MnV}_2$  и  $\text{CrV}_2$  их взаимодействия имеют совершенно различный характер.

Для  $\text{MnV}_2$  в области малых  $n_e$  амплитуда рассеяния гибридных возбуждений положительна, так что при малых  $n_p$  и  $n_e$  амплитуды рассеяния складываются и ферромагнитное упорядочение существует в достаточно широкой области переменных  $n_p$  и  $n_e$ , пересекающей линию электронейтральности  $2n_p + n_e = 3$ , см. рис. 4б.

В случае  $\text{CrV}_2$ , где одновременно с  $p$ -электронами происходит заполнение верхней половины хаббардовской подзоны  $(3z^2 - r^2)$ -электронов, при малых  $n_z - 1$  амплитуда рассеяния имеет отрицательный знак. Поэтому при малых  $n_p$  и  $n_z - 1$  происходит существенная компенсация полной амплитуды рассеяния, а в области пересечения с линией электронейтральности  $2n_p + n_z = 4$  система остается парамагнитной.

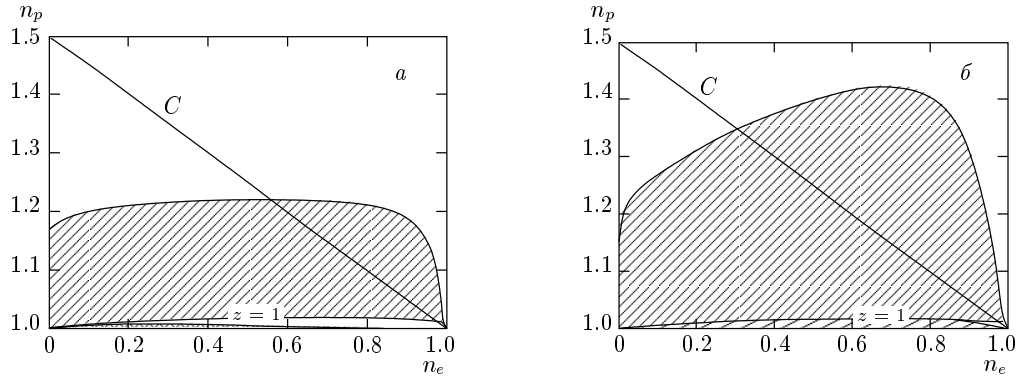


Рис. 4. Магнитная фазовая диаграмма для  $MnB_2$  при  $T = 0$ ;  $C$  — линия электронейтральности:  $a$  — нуль-петлевое приближение;  $b$  — однопетлевое приближение

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-02-17388).

**ПРИЛОЖЕНИЕ**

Рассмотрим специальный случай, когда интегралы перескока вдоль слоев бора по абсолютной величине равны интегралам перескока между слоями марганца и бора, которые ниже будут положены равными единице.

В этом случае  $v = g_p^2 f_p$ , а величина  $r$  выражается через  $s$  с помощью следующего соотношения:

$$r = -v + \text{sign}(r + v) 2 \sqrt{\frac{g_p^2 f_p f_e}{s}},$$

так что  $\xi_p^\pm = \frac{v}{2} \pm \frac{|r + v|}{2} \sqrt{1 + sy^2} - \mu,$  (II.1)

$$\xi_p = \frac{r}{2} - vz - \mu.$$

Параметр  $s$ , введенный вместо энергетической разности  $r$ , изменяется в пределах от нуля до бесконечности и фактически определяет расщепление энергетических подзон.

Величины  $y$  и  $z$  изменяются от нуля до единицы и определяются положением уровня Ферми внутри зоны Бриллюэна.

*Случай A:  $r > v, 0 < s < 0.68$*

При этих условиях нижней является подзона  $\xi_s^-$ , заполнение которой происходит независимо от следующей  $p$ -подзоны бора.

A1. В этих условиях при  $+v/2 - |r + v| \sqrt{1 + s}/2 < \mu < v/2 - |r + v|/2$  имеем следующее:

$$K_p = \frac{1}{2} J_s^-(y, 1), \quad K_e = J_s^+(y, 1),$$

$$\mu = \frac{v}{2} - \frac{1}{2} |r + v| \sqrt{1 + sy^2}.$$

(II.2)

Здесь и ниже введены следующие обозначения:

$$J_s^\pm(y, 1) = \frac{1}{2} \int_y^1 \rho(x) dx \left( 1 \pm \frac{1}{\sqrt{1 + sx^2}} \right),$$

$$\rho(x) = \frac{4}{\pi} \sqrt{1 - x^2}.$$

Коэффициенты, входящие в условие появления ферромагнетизма, получаем с помощью дифференцирования уравнения состояния:

$$f_e D_{ee} = -\text{sign}(r + v) \frac{s}{2\pi} J'(y, 1) + \frac{y}{\pi} \sqrt{1 - y^2} \left[ 1 + \frac{\text{sign}(r + v)}{\sqrt{1 + sy^2}} \right],$$

(II.3)

$$g_p^2 f_p D_{pp} = s \frac{\text{sign}(r + v)}{2\pi} J'(y, 1) \times \left[ 1 - \text{sign}(r + v) \sqrt{\frac{sg_p^2 f_p}{f_e}} \right] + y \frac{\sqrt{1 - y^2}}{2\pi} \left[ 1 - \frac{\text{sign}(r + v) \sqrt{sg_p^2 f_p}}{\sqrt{f_e} (1 + \text{sign}(r + v) \sqrt{1 + sy^2})} \right] \times \left[ 1 - \frac{\text{sign}(r + v)}{\sqrt{1 + sy^2}} \right],$$

(II.4)



$$S_e = \frac{1}{\pi f_e} \left\{ \text{sign}(r+v)y\sqrt{1-y^2} \left[ 1 + \frac{\text{sign}(r+v)}{\sqrt{1+sy^2}} \right] - \text{sign}(r+v)sJ'(y,1) \right\}. \quad (\text{II.5})$$

В нашем случае

$$g_p^2 = \frac{3}{2}, \quad f_p = \frac{1}{4-K_p}, \quad f_e = \frac{1}{1+3K_e}, \quad (\text{II.6})$$

$$J'(y,1) = \int_y^1 \frac{x^2\sqrt{1-x^2}}{(1+sx^2)^{3/2}} dx.$$

Возникающие здесь интегралы сводятся к эллиптическим, после чего машинные вычисления позволяют определить фазовую кривую. Рассмотрены два варианта: нуль-петлевое и однопетлевое (по  $d$ -электронам) приближения, см рис. 4.

На рисунке 3 заштрихованные области соответствуют областям ферромагнитного упорядочения. Ферромагнитная область, полученная в нуль-петлевом приближении ( $A_0$ ), находится внутри области  $A_1$ , граница которой рассчитана в однопетлевом приближении.

Можно заметить, что линия электронейтральности пересекает область  $A$  при больших энергиях, когда ферромагнитная неустойчивость не возникает.

*A2.* В условиях, когда  $r/2 - v < \mu < r/2$ , происходит заполнение широкой негибридизованной  $p$ -подзоны. Для нее выполняется условие ферромагнетизма, однако линия электронейтральности эту область не пересекает.

*Случай B:*  $0 < r < v, 0.68 < s < 2.47$

При этих условиях ниже является нижняя  $\xi_s^-$ -подзона, однако, начиная с некоторого значения химического потенциала, ее заполнение происходит одновременно с  $p$ -зоной бора.

Верхний край этой подзоны расположен выше потолка нижней гибридизованной подзоны.

*B1.* В условиях, когда  $v/2 - (r+v)\sqrt{1+s/2} < \mu < r/2 - v$ , происходит заполнение нижней гибридизованной подзоны. Этот случай практически не отличается от случая  $A1$ . По этой причине в нуль-петлевом приближении находим узкую область, примыкающую к линии  $K_p = 0$  или  $n_p = 1$ , которая является продолжением соответствующей области, относящейся к случаю  $A1$ .

Вычисления показывают, что в однопетлевом приближении вся область  $B1$  оказывается ферромагнитной.

*B2.* В условиях, когда  $r/2 - v < \mu < v/2 - |r+v|/2$  происходит одновременное заполнение  $\xi_s^-$ - и  $p$ -подзон:

$$K_p = \frac{1}{2}J_s^-(y,1) + \frac{1}{2}J_p(z,1), \quad K_d = J_s^+(y,1). \quad (\text{II.7})$$

Переменные  $y$  и  $z$  связаны между собой и с химическим потенциалом с помощью соотношения

$$\mu = \frac{v}{2} - \frac{|r+v|}{2}\sqrt{1+sy^2} = \frac{r}{2} - zv, \quad (\text{II.8})$$

$$z = \frac{r}{2v} - \frac{1}{2} + \frac{|r+v|}{2v}\sqrt{1+sy^2}, \quad 0 < y < y_*.$$

Явную зависимость величины  $z$  от  $y$  находим через определение величин

$$J_p(z,1) = \int_z^1 [\rho_p(x)] dx = 1 - z, \quad (\text{II.9})$$

$$K_p = \frac{1}{2}J_s^-(y,1) + \frac{1}{2}J_p(z,1) = \tilde{K}_p + \frac{1-z}{2}.$$

Комбинируя это соотношение с условием равенства химических потенциалов и условием  $v = f_p$ , получаем уравнение для величины  $z$ :

$$(1+z)^2 = \frac{f_d}{3s} (7-2\tilde{K}_p+z) (\sqrt{1+sy^2}+1)^2, \quad (\text{II.10})$$

откуда находим

$$z = -1 + B + \sqrt{B(B+12-4\tilde{K}_p)},$$

$$\text{где } B = \frac{(\sqrt{1+sy^2}+1)^2}{6s(1+3\tilde{K}_d)}, \quad (\text{II.11})$$

$$\tilde{K}_p = \frac{1}{2}J_s^-(y,1);$$

при этом величина  $z$  должна быть положительной и не должна превышать единицы.

В переменных  $(s, y)$  соответствующие границы можно определить из соотношения (II.8), где положено  $z = 0$  или  $z = 1$ . При этом условие  $z = 1$  отвечает началу, а  $z = 0$  концу заполнения подзоны бора.

Коэффициенты, входящие в условие появления ферромагнетизма, находим с помощью дифференцирования уравнения состояния:

$$f_e D_{ee} = -\text{sign}(r+v)\frac{s}{\pi}J'(y,1) + \frac{1}{\pi}y\sqrt{1-y^2} \left[ 1 + \frac{\text{sign}(r+v)}{\sqrt{1+sy^2}} \right],$$

$$g_p^2 f_p D_{pp} = \frac{z}{2} + \text{sign}(r+v) \frac{s}{2\pi} J'(y, 1) \times$$

$$\times \left[ 1 - \text{sign}(r+v) \sqrt{\frac{sg_p^2 f_p}{f_e}} \right] +$$

$$+ \frac{yz\sqrt{1-y^2}}{2\pi(1+z)} \left[ 1 - \frac{\text{sign}(r+v)}{\sqrt{1+sy^2}} \right],$$

$$S_e = \frac{1}{\pi f_e} \left\{ \text{sign}(r+v) y \sqrt{1-y^2} \left[ 1 + \frac{\text{sign}(r+v)}{\sqrt{1+sy^2}} \right] - \right.$$

$$\left. - \text{sign}(r+v) s J'(y, 1) \right\}. \quad (\text{П.12})$$

Эти коэффициенты необходимо подставить в условие ферромагнетизма, после чего получим фазовую кривую. Вычисления показывают, что в нуль-петлевом и однопетлевом приближениях граница ферромагнитной фазы проходит внутри области B2.

*Случай C:*  $-v < r < 0, 24 > s > 2.47$

При этих условиях нижней является нижняя  $\xi_s^-$ -подзона, однако, начиная с некоторого значения химического потенциала, ее заполнение происходит одновременно с  $p$ -зоной бора.

Нижний край этой  $p$ -подзоны расположен выше энергетического минимума нижней  $\xi_s^-$ -подзоны.

Верхний край  $p$ -подзоны бора расположен ниже потолка нижней  $\xi_s^-$ -подзоны.

C1. В условиях, когда  $v/2 - (r+v)\sqrt{1+s}/2 < \mu < r/2 - v$ , происходит заполнение нижней гибридной подзоны:

$$K_p = \frac{1}{2} J_s^-(y, 1), \quad K_d = J_s^+(y, 1),$$

$$\mu = \frac{v}{2} - \frac{|r+v|}{2} \sqrt{1+sy^2}. \quad (\text{П.13})$$

Последнее условие определяет связь величины  $y$  и химического потенциала. При этом параметр  $y$  изменяется в ограниченной области,  $y_* < y < 1$ , где величина  $y_*$  определяется из условия  $v/2 - |r+v|\sqrt{1+sy_*^2}/2 = r/2 - v$ .

Случай C1 отличается от A1 и B1 только тем, что в переменных  $n_d$  и  $n_e$  узкая ферромагнитная область заканчивается в точке (0, 0), которая соответствует  $s = 24$ , см. рис. 3.

На рисунке 3 изображена кривая, соответствующая условию  $z = 1$ , где начинается заполнение

подзоны бора и продолжается заполнение нижней гибридной подзоны. Внутри этой области выполняется условие ферромагнитной неустойчивости даже в нуль-петлевом приближении.

Можно заметить, что граница ферромагнитной области пересекает границу начала заполнения  $p$ -подзоны, внутри которой существует ферромагнитное упорядочение за счет амплитуды обменного рассеяния.

В однопетлевом приближении вся область C1 остается ферромагнитной.

C2. В условиях, когда  $r/2 - v < \mu < v/2 - |r+v|/2$ , происходит одновременное заполнение  $\xi_s^-$ - и  $p$ -подзон бора:

$$K_p = \frac{1}{2} J_s^-(y, 1) + \frac{1}{2} J_p(z, 1), \quad K_d = J_s^+(y, 1). \quad (\text{П.14})$$

Все зависимости для этого случая совпадают со случаем B2, см. формулы (П.7)–(П.11).

В однопетлевом приближении часть граничной фазовой кривой, относящейся к данному случаю, пересекает линию электронейтральности  $\text{MnB}_2$ .

Анализируя рис. 3 и 4, можно заключить, что в данной области линия электронейтральности проходит внутри ферромагнитной области.

Ферромагнитная область, полученная в нуль-петлевом приближении, находится целиком внутри ферромагнитной области, которая определена из однопетлевого приближения.

*Случай D:*  $-v < r < 0, 24 < s < +\infty$

Здесь нижней является широкая  $p$ -подзона, которая заполняется независимо от гибридных подзон.

D1. В условиях, когда  $-v+r/2 < \mu < v/2 - (r+v)\sqrt{1+s}/2$ , имеем следующее:

$$K_p = \frac{1}{2} J_p(z, 1), \quad K_d = 0, \quad \mu = \frac{r}{2} - zv. \quad (\text{П.15})$$

Последнее условие определяет связь величины  $z$  и химического потенциала.

Заполняется только подзона бора, так что здесь  $K_e = 0$ , т.е.  $n_d = 6$ , а число  $p$ -электронов изменяется от 1 до некоторого конечного значения. Условие ферромагнетизма выполняется уже для малого числа возбуждений. При  $n_p = 1$  все  $p$ -электроны находятся в состоянии со спином 1/2, а при возрастании  $n_p$  появляются новые состояния со спином 1. Таким образом, с самого начала система имеет тенденцию к ферромагнитному упорядочению.

В данном случае  $K_d = D_{ee} = D_{ep} = D_{pe} = 0$ ,

$$K_p = \frac{1}{2}(1 - z), \quad g_p^2 f_p D_{pp} = \frac{z}{2}. \quad (\text{П.16})$$

Отсюда заключаем, что ферромагнитная неустойчивость существует для всех  $1 > z > 0.47$  или  $0 < K_p < 0.27$ .

*D2.* В условиях, когда  $v/2 - (r + v)/2 < \mu < r/2$ , происходит одновременное заполнение  $\xi_s^-$ -подзоны и  $p$ -подзоны бора:

$$K_p = \frac{1}{2}J_s^-(y, 1) + \frac{1}{2}J_p(z, 1), \quad K_d = J_s^+(y, 1). \quad (\text{П.17})$$

Это и все остальные соотношения совпадают с (П.7)–(П.12).

В нуль-петлевом приближении кривая возникновения ферромагнетизма начинается при бесконечном значении параметра  $s$  и  $y = 1$ , что соответствует  $K_d = 0$  и  $K_p = 0.21$ , см. рис. 4а, где изображена вся кривая нуль-петлевого приближения.

*Случай E:*  $b < -rv, r < -v, s > 21/4 = 5.25$

Здесь низшей является широкая  $p$ -подзона, которая заполняется независимо от гибридованных подзон.

*E1.* В условиях, когда  $-v + r/2 < \mu < v/2 + (r + v) \times \sqrt{1 + s}/2$ , имеем следующее:

$$K_p = \frac{1}{2}J_p(z, 1), \quad K_d = 0, \quad \mu = \frac{r}{2} - zv. \quad (\text{П.18})$$

Последнее условие определяет связь величины  $z$  и химического потенциала.

Этот случай не отличается от *D1*:  $n_d = 0, 0.21 < n_p < 1/2$ , ферромагнитная область заключена в узком интервале  $0.21 < n_p < 0.27$ .

*E2.* В условиях, когда  $v/2 - |r + v|/2 < \mu < r/2$ , происходит одновременное заполнение  $\xi_s^-$ -подзоны и  $p$ -подзоны бора:

$$K_p = \frac{1}{2}J_s^+(y, 1) + \frac{1}{2}J_p(z, 1), \quad K_d = J_s^-(y, 1). \quad (\text{П.19})$$

Здесь происходит перекрытие нижней и широкой  $p$ -подзон. Параметры  $z$  и  $y$  связаны между собой соотношением

$$\mu = \frac{v}{2} - \frac{|r + v|}{2} \sqrt{1 + sy^2} = \frac{r}{2} - vz. \quad (\text{П.20})$$

Последнее условие определяет связь величин  $y, z$  и химического потенциала. Явную зависимость величины  $z$  от  $y$  находим через определение величин

$$J_p(z, 1) = \int_z^1 [\rho_p(x)] dx = 1 - z, \quad (\text{П.21})$$

$$K_p = \frac{1}{2}J_s^+(y, 1) + \frac{1}{2}J_p(z, 1) = \tilde{K}_p + \frac{1 - z}{2}.$$

Комбинируя это соотношение с условием равенства химических потенциалов и условием  $v = f_p$ , получаем уравнение для величины  $z$ :

$$(1 + z)^2 = \frac{f_d}{3s} (7 - 2\tilde{K}_p + z) (\sqrt{1 + sy^2} - 1)^2, \quad (\text{П.22})$$

откуда находим

$$z = -1 + C + \sqrt{C(C + 12 - 4\tilde{K}_p)},$$

где

$$C = \frac{(\sqrt{1 + sy^2} - 1)^2}{6s(1 + 3K_d)}, \quad (\text{П.23})$$

$$\tilde{K}_p = \frac{1}{2}J_s^+(y, 1).$$

При этом величина  $z$  должна быть положительной и не должна превышать единицу. В этой области ферромагнитная неустойчивость не обнаруживается ни при каких условиях.

При использовании нуль-петлевого приближения в этой области ферромагнитная неустойчивость не обнаруживается.

Полученная в однопетлевом приближении фазовая кривая начинается при тех же параметрах и в той же точке  $s = \infty, y = 1$  или  $K_d = 0, K_p = 0.21$ . Далее фазовая кривая отклоняется от линии, отвечающей  $s = \infty$ , а затем пересекает ее при  $y = 0.91$  или в точке  $K_d = 0.02, K_p = 0.32$ .

Вся кривая однопетлевого приближения изображена на рис. 4б.

*Случай F:*  $0 < s < 21/4, r < -v$

Здесь низшей является широкая  $p$ -подзона, которая заполняется независимо от гибридованных подзон.

*F1.* В условиях, когда  $-v + r/2 < \mu < r/2$ , имеем следующее:

$$K_p = \frac{1}{2}J_p(z, 1), \quad K_d = 0, \quad \mu = \frac{r}{2} - zv. \quad (\text{П.24})$$

Последнее условие определяет связь величины  $z$  и химического потенциала.

Этот случай не отличается от  $D1$ :  $n_d = 0$ ,  $0.21 < n_p < 1/2$ , ферромагнитная область заключена в узком интервале  $0.21 < n_p < 0.27$ .

$F2$ . В условиях, когда  $v/2 + (r+v)\sqrt{1+sy^2}/2 < \mu v/2 + (r+v)/2$ , происходит заполнение нижней гибридной подзоны.

Можно показать, что в этих условиях система остается парамагнитной при любом значении химического потенциала и при всех температурах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Г. В. Самсонов, Т. Н. Серебрякова, В. А. Неронов, *Бориды*, Атомиздат, Москва (1975), с. 83.
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).
3. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
4. Р. О. Зайцев, ФТТ **31**, 1725 (1989).
5. Р. О. Зайцев, Н. В. Терёхина, ЖЭТФ **117**, 1018 (2000).