

Электронная структура и магнитная восприимчивость почти магнитных металлов (на примере палладия и платины)

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, А.Н. Филанович

Уральский государственный технический университет — УПИ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: povz@kf.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 13 января 2010 г.

В окончательной редакции 11 марта 2010 г.)

В рамках обобщенной $s(p)d$ -модели Хаббарда развивается самосогласованный подход к расчету электронной структуры и магнитной восприимчивости почти магнитных металлов на примере палладия и платины. Расчеты зонной структуры осуществляются с помощью *ab initio* метода $LDA + U + SO$ с дополнительным учетом междоузельного $s(p)d$ -обменного взаимодействия и спин-флуктуационных перенормировок электронных спектров, возникающих при конечных температурах. Развитый подход позволяет количественно описать плотность электронных состояний и необычные температурные зависимости магнитной восприимчивости рассматриваемых почти магнитных металлов, оценить основные параметры электрон-электронных взаимодействий. При этом указывается на усиление роли спин-орбитального взаимодействия в формировании электронных и магнитных свойств при переходе от палладия ($4d$ -период) к платине ($5d$ -период). Обнаружены эффекты температурного перераспределения электронов между $s(p)$ - и d -состояниями.

1. Аномальные электронные свойства почти магнитных d , f -металлов, таких как Pd, Pt, Ce, Pu, Np, на протяжении многих лет остаются предметом дискуссий [1]. С одной стороны, давно известно, что при легировании небольшим количеством магнитной примеси они претерпевают концентрационный фазовый переход в магнитоупорядоченное состояние [2]. С другой стороны, ряд почти магнитных металлов обнаруживает неустойчивость по отношению к формированию сверхпроводящего состояния (см., например, [1,3]). Однако до сих пор окончательно не выяснено, с какими особенностями электронной структуры конкретных почти магнитных металлов связаны эти неустойчивости (см., например, [1,4–7]). Во многом это обусловлено тем, что *ab initio* расчеты электронного спектра и параметров взаимодействия электронов почти магнитных металлов сталкиваются со значительными вычислительными трудностями [4]. Эти трудности частично устраняются в методе функционала плотности с использованием приближения локальной плотности (LDA) [5–7]. Однако при изучении зонной структуры рассматриваемых сильно коррелированных электронных систем необходимо учесть многоэлектронные взаимодействия, прежде всего параметр внутриатомного кулоновского взаимодействия U . Один из методов, позволяющих учесть электронные корреляции, реализуется в схеме $LDA + U$ [4,8]. Кроме того, в работе [8] был использован модернизированный вариант метода $LDA + U$, позволяющий учесть спин-орбитальное взаимодействие — $LDA + U + SO$, и на примере плутония показано, что спин-орбитальное взаимодействие может приводить к определенной компенсации обменного взаимодействия. При этом следует иметь в виду, что любая модификация теории функционала плотности пригодна только для основного состояния и не позволяет исследовать температурную зависимость магнитной

восприимчивости почти магнитных металлов, которая является важнейшей физической характеристикой их электронной подсистемы.

Магнитная восприимчивость почти магнитных металлов в области низких температур является паулиевской, но претерпевает значительное обменное усиление, а при высоких температурах описывается законом Кюри–Вейсса. Качественное объяснение температурных зависимостей восприимчивости палладия и платины было сделано в рамках спин-функциональных теорий [9,10], построенных в однозонной модели Хаббарда, где наряду с зонным движением d -электронов учитывается их внутриатомное кулоновское отталкивание с параметром U . При этом получено, что с возрастанием температуры амплитуда спиновых флуктуаций растет и возникают поперечные флуктуации обменных полей. Последнее трактуется как образование температурно-индуцированных локальных магнитных моментов, магнитная восприимчивость которых основывается законом Кюри–Вейсса. Важнейшим параметром развитой теории также является фактор S стонеровского усиления паулиевской восприимчивости

$$S = (1 - U g_0(\epsilon_F))^{-1} \gg 1,$$

значение которого чрезвычайно чувствительно к изменениям параметров электронной структуры.

В настоящей работе проведен количественный анализ электронной структуры и магнитной восприимчивости почти магнитных d -металлов на примере палладия и платины. При этом рассматривается обобщенная $s(p)d$ -модель, в которой наряду с зонным движением $s(p)$ - и d -электронов учитывается внутриузельное хаббардовское dd -взаимодействие и $s(p)d$ -обменное взаимодействие. Ранее в работах [11,12] в рамках такой модели были рассмотрены спин-флуктуационные перенорми-

ровки плотности электронных состояний и электронной проводимости обменно-усиленных сильно парамагнитных систем. Однако существующая схема оказывается неприменимой для расчета спин-спиновых корреляторов и, в частности, магнитной восприимчивости.

2. Рассмотрим гамильтониан обобщенной $s(p)d$ -модели, дополненный слагаемыми, которые описывают зеемановский сдвиг электронных энергий, возникающий при включении внешнего магнитного поля,

$$H = H_0 + H_{\text{int}} + H_h. \quad (1)$$

Здесь

$$H_0 = \sum_{l,k,\sigma} \varepsilon_{l,k,\sigma} a_{l,k,\sigma}^+ a_{l,k,\sigma} \quad (2)$$

— гамильтониан невзаимодействующих $s(p)$ - ($l=1$)- и d - ($l=2$)-электронов, $\varepsilon_{l,k,\sigma}$ — зонные энергии, определяемые в дальнейшем в рамках метода LDA + U + SO (см. раздел 3), $a_{l,k,\sigma}^+$ ($a_{l,k,\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) $s(p)$ - ($l=1$)- или d - ($l=2$)-электронов, k — электронный квазиимпульс, σ — спиновое квантовое число,

$$H_{\text{int}} = \sum_q (J_q \mathbf{S}_{q1} \mathbf{S}_{q2} + \text{h.c.}) + U \sum_q |S_{q2}^{(z)}|^2 - \frac{1}{4} U \sum_q |N_{q2}|^2 \quad (3)$$

— гамильтониан электрон-электронного взаимодействия, включающий слагаемые, описывающие обменное взаимодействие s - d -электронов и хаббардовское отгалкивание d -электронов на узле, записанное через операторы Фурье-образов зарядовой ($N_{q1} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} N_{q1\sigma}$, где

$N_{q1\sigma} = \sum_k a_{l,k,\sigma}^{(+)} a_{l,k,+q,\sigma}$) и z -проекции операторов спиновой ($S_{q1}^{(z)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma N_{q1\sigma}$) плотности d - ($l=2$)-электронов,

$$H_h = \sum_q \mathbf{h}_q \mathbf{S}_{q1} \quad (4)$$

— гамильтониан зеемановского сдвига энергий, \mathbf{h}_q — неоднородное магнитное поле в единицах $2\mu_B$ (μ_B — магнетон Бора), $\mathbf{S}_{q1} = (S_{q1}^{(z)}, S_{q1}^{(+)}, S_{q1}^{(-)})$ — оператор Фурье-образа вектора спиновой плотности $s(p)$ ($l=1$)- или d ($l=2$)-электронов,

$$S_{q1}^{(+)} = \sum_k a_{l,k,\uparrow}^{(+)} a_{l,k+q,\downarrow}.$$

Выражения для статистической суммы рассматриваемой $s(p)d$ -электронной системы найдем на основе развитой в [13] процедуры. Диагонализовав H_{int} по операторам Фурье-образов компонент вектора спиновой плотности $s(p)$ - и d -электронов и воспользовавшись преобразованием Стратоновича–Хаббарда, сведем исследуемую многочастичную задачу к одночастичной задаче о движении невзаимодействующих $s(p)$ - и d -электронов во флуктуирующем в пространстве и во времени случайных полях.

Затем воспользуемся теорией возмущения по оператору H_{int} и выполним квантово-статистическое усреднение. После суммирования полученного ряда в приближении однородных локальных полей [14] найдем выражение для статистической суммы, аналогичное установленному в [13], но с учетом подмагничивания одной электронной подсистемы другой

$$Z/Z_0 = \int (d\xi d\eta) \exp \left\{ - \sum_{ql} |\xi_{ql} + \mathbf{h}_q/c_{ql}|^2 + 8 \sum_q J_q A_q \prod_l (\xi_{ql} + \mathbf{h}_q/c_{ql}) + \sum_l \Psi_l(\xi_l, \eta) \right\}. \quad (5)$$

В рамках приближения однородных локальных полей (позволяющего описать длинноволновый и локальный режимы спиновых флуктуаций) в соответствии с [13] для случая почти и слабоферромагнитных металлов, характеризующихся фактором обменного усиления в подсистеме d -электронов — $|S| \gg 1$, который резко изменяется с изменением квазиимпульса и частоты, имеем

$$\Psi(\xi, \eta) = - \sum_q X_q |\xi_{q2}|^2 + \sum_q X_q |\eta_q|^2 + \sum_{v,l} L^{(l)} (|\xi_{vl}|, \eta_{vl}), \quad (6)$$

где $\sum_v (\dots) = T \sum_v \int_0^{T^{-1}} d\tau (\dots)$, $v = (v, \tau)$, $\xi_{vl} = N_0^{-1/2} \times \sum_q c_{ql} \xi_{ql} \theta(q - q_c) \exp(iqv)$,

$$\eta_{vl} = \begin{cases} (UT/N_0)^{1/2} \sum_q \eta_q \theta(q - q_c) \exp(iqv), & l = 2, \\ 0, & l = 1, \end{cases}$$

q_c — четырехмерный вектор „обрезания“, определяемый из аппроксимации (\mathbf{q}, ω) -зависимости паулиевской восприимчивости в приближении эффективной массы ($q_c \approx (2\mathbf{k}_F, V_F |\mathbf{q}|)$) [15], а \mathbf{k}_F и V_F — квазиимпульс и скорость электронов на поверхности Ферми, $X_q = (c_{q2}^2/T) (\chi_d^{(0)}(0) - \chi_d^{(0)}(q))$, $\chi_d^{(0)}(\mathbf{q})$ — паулиевская восприимчивость d -электронов,

$$L^{(l)} (|\xi_{vl}|, \eta_{vl}) = - N_0^{-1} \sum_k \ln [(\omega_{2k-1} - \varepsilon_{k,l} + \mu + \eta_{vl})^2 - |\xi_{vl}|^2],$$

$$c_{q2} = \sqrt{(U - J_q)T}, \quad c_{q1} = \sqrt{\frac{J_q^2}{4U - 5J_q} T},$$

$$A_q = \left(\frac{U - J_q}{5J_q^2(4U - 5J_q)} \right)^{1/2},$$

μ — химический потенциал, определяемый из условия электронейтральности.

Математически эффект подмагничивания электронных $s(p)$ - и d -системами друг друга сводится к замене

$$\xi_{ql} \rightarrow \xi_{ql} + \mathbf{h}_q$$

и учитывается в первом и третьем слагаемых показателя экспоненты (5). Однако при корректном вычислении

такая замена не является тривиальной и не может быть выполнена до квантово-статистического усреднения в приближении однородных полей и преобразований к новым переменным интегрирования. При этом, как показано далее, подмагничивание приводит к обменному усилению магнитной восприимчивости $s(p)$ -электронов обменным полем, возникающим в подсистеме d -электронов (см. формулы (8) и (9)).

Вычисление функциональных интегралов в (5) по случайным обменным и зарядовым полям выполним методом перевала по переменным $r_{ql}^{(\gamma)} = |\xi_{ql}^{(\gamma)}|$ и $\vartheta_{ql}^{(\gamma)} = \arg(\xi_{ql}^{(\gamma)})$, $\xi_{0,l}^{(\gamma)}$, η_0 , η_q . При этом, используя (5), учитывая определение магнитной восприимчивости через статистическую сумму

$$\chi_q^{(\gamma)} = -T\partial^2 \ln Z / \partial h_q^{(\gamma)} \partial h_{-q}^{(\gamma)} \quad (7)$$

и устремляя $h_q^{(\gamma)}$ к нулю в условиях $U \gg J_q$ [16], найдем выражение для однородной продольной магнитной восприимчивости всей рассматриваемой электронной системы, сохраняя слагаемые первого порядка по (J/U) ,

$$\chi = \chi^{(d)} + \chi^{(s)} + J\chi^{(s)}\chi^{(d)}, \quad (8)$$

где

$$\chi^{(s)} = 2g_0^{(s)}(\mu) / \left[1 - (J^2/(4U)) g_0^{(s)}(\mu) \right], \quad (9a)$$

$$\chi^{(d)} = 2 \left(\frac{2}{3} \chi_{\perp}^{(d)} + \frac{1}{3} \chi_{\parallel}^{(d)} \right) / \left(1 - \frac{2}{3} U\chi_{\perp}^{(d)} - \frac{1}{3} U\chi_{\parallel}^{(d)} \right) \quad (9b)$$

— парамагнитная восприимчивость s , p - (9a) и d -электронов (9b). Здесь J — однородная часть междоузельного $s(p)d$ -обменного взаимодействия,

$$\chi_{\perp}^{(d)} = \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha \int d\epsilon g_0^{(d)}(\epsilon) f(\epsilon - \mu - U\eta_0 - \alpha Um) / (2Um) \quad (10)$$

соответствует поперечной компоненте, а

$$\chi_{\parallel}^{(d)} = 2 \left(\prod_{\alpha=\pm 1} g_0^{(d)}(\mu + U\eta_0 + \alpha Um) \right) / \sum_{\alpha=\pm 1} g_0^{(d)}(\mu + U\eta_0 + \alpha Um) \quad (11)$$

— продольной компоненте парамагнитной восприимчивости невзаимодействующих d -электронов, перенормированным спиновыми флуктуациями,

$$\eta_0 = - \sum_{\alpha=\pm 1} \int g_0^{(d)}(\epsilon) f(\epsilon - \mu - \alpha Um - U\eta_0) d\epsilon / 2, \quad (12)$$

$$m = (BT/U) [\delta(\delta + 2X)]^{-1/2}, \quad (13)$$

$$\delta = 1 - \frac{2}{3} U\chi_{\perp}^{(d)} - \frac{1}{3} U\chi_{\parallel}^{(d)}. \quad (14)$$

Здесь параметры B и X являются коэффициентами разложения паулиевской восприимчивости d -электронов

в приближении эффективной массы [15]

$$\chi_d^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{cases} \chi_d^{(0)}(0) + \frac{2X}{U} \left(\frac{\mathbf{q}}{q_c} \right)^2 - i \frac{B\omega}{U^2} \frac{q_c}{\mathbf{q}}, & \mathbf{q} < \mathbf{q}_c, \quad \omega < V_F |\mathbf{q}|, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

$g_0^{(l)}(\epsilon)$ — одноэлектронная плотность состояний $s(p) - (l=1)$ - и $d - (l=2)$ -электронов. Отметим также, что при вычислении среднеквадратичного магнитного момента m (см. (13)) учет слагаемых, связанных с неоднородной частью междоузельного sd -обмена, может приводить к поправкам, пропорциональным степени (третьей и выше) отношения (T/U) . Поэтому в выражении (13) отсутствуют вклады, обусловленные междоузельным $s(p) - d$ -обменным взаимодействием.

При $T \rightarrow 0$ и $(J^2/U)g_0^{(s)}(\mu) \ll 1$ выражение (8) совпадает с найденным в работе [17], а (14) — со стонеровским фактором обменного усиления. С увеличением температуры амплитуда спиновых флуктуаций растет и при

$$T > T^* = (\mu^* - Un_d^*) / [B(1 + X + 9J^4/(2U)^4)] \quad (15)$$

имеет место ее насыщение

$$m \approx n_d^* (1 + X + 9J^4/(2U)^4)^{-1}, \quad (16)$$

где μ^* — значение химического потенциала при $T = T^*$, определяемое из условия совпадения $\mu + Um$ с верхним либо $\mu - Um$ с нижним краем d -зоны, $2n_d^*$ — число незаполненных либо заполненных состояний исходной ($T = 0$) d -зоны при заполнении больше или меньше половинного соответственно. При этом температурная зависимость восприимчивости d -электронов описывается законом Кюри–Вейса ($\chi^{(d)} = C/(T - \theta_C)$) с парамагнитной температурой θ_C и постоянной Кюри C , равными

$$\theta_C = U(X + 9J^4/(2U)^4) p_{\text{ef}}^2 / 4,$$

$$C = N_0 p_{\text{ef}}^2, \quad \text{где } p_{\text{ef}} = n_d^* / B. \quad (17)$$

В этих условиях продольная компонента восприимчивости $\chi_{\parallel}^{(2)}$ обращается в нуль и в выражении (9a) остается только поперечная компонента. В результате исчезают продольные спиновые флуктуации, что трактуется как возникновение состояния с температурно-индуцированными локальными магнитными моментами [18].

3. Переходя к самосогласованному расчету магнитной восприимчивости и плотности электронных состояний почти ферромагнитных металлов на примере палладия и платины, прежде всего отметим, что развитый в [13] метод производящего функционала для расчета электронной функции Грина позволяет описать спин-флуктуационные перенормировки электронного спектра,

которые необходимо учитывать при расчетах плотности состояний $s(p)d$ -электронов,

$$\varepsilon_{kd} \rightarrow \varepsilon_{kd} + Un_d(T) + \alpha Um(T),$$

$$\varepsilon_{ks} \rightarrow \varepsilon_{ks} + \alpha Jm(T),$$

где $2n_d(T) (= -2U\eta_0)$ — заполнение d -зоны, зависящее в силу спин-флуктуационного расщепления от температуры. Особо отметим, что при расчетах плотности электронных состояний методом LDA + U [4,8] учитывается хаббардовский сдвиг энергий $Un_d(0)$. При расчете плотности состояний и энергетического спектра d -электронов при $T \neq 0$ учитывается дополнительная поправка (Δn), обусловленная возможностью температурного изменения заполнения d -зоны.

Химический потенциал μ и число d -электронов n_d являются функциями амплитуды спиновых флуктуаций m , которая в свою очередь зависит от температуры. При этом необходимо численно решить систему интегральных уравнений, представляющих собой условие электронейтральности для всей рассматриваемой системы $s(p)$ - и d -электронов и выражение для определения числа заполненных состояний d -полосы.

$$\sum_{\alpha=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} g_0^{(d)}(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu - \alpha Um + U\Delta n) d\varepsilon + \sum_{\alpha=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} g_0^{(s)}(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu - \alpha Jm) d\varepsilon = 2n, \quad (18)$$

$$\sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} g_0^{(d)}(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu - \alpha Um + U\Delta n) d\varepsilon - 2n_d(0) = 2\Delta n, \quad (19)$$

где $2n$ — полное число электронов, а $2n_d(0)$ — исходное (при $T = 0$) число d -электронов в системе, Δn — изменение (по сравнению с $T = 0$) заполнения d -зоны.

Как видно из приведенных выше уравнений, параметрами модели являются константа U внутриузельного кулоновского взаимодействия d -электронов, однородная часть междоузельного sd -обмена J , а также константы B и X . Параметр U определяется на первом этапе вычислений путем проведения самосогласованного расчета плотности электронных состояний с использованием метода LDA + U + SO [19,20] с учетом экспериментальных данных о магнитной восприимчивости [21] и формулы (8) при $T \rightarrow 0$ в рамках единой итерационной процедуры. Параметр J на первом этапе самосогласованного расчета оказывается слабо влияющим на результат расчета по сравнению с U , так как $J/U \sim 0.1$ [13]. На втором этапе расчета рассматривается состояние металла при конечных температурах и производится оценка параметров B и X с предварительным учетом данных из [9]. Наконец, на третьем этапе учитывается параметр J и расчетные температурные зависимости восприимчивости при $J = 0$ и $J \neq 0$ сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными.

В ходе итерационных расчетов основного состояния использовалась k -сетка с плотностью $32 \times 32 \times 32$ точек, параметры кристаллической решетки были заимствованы из экспериментальных данных и равны 3.876 \AA для палладия [22] и 3.912 \AA [23] для платины. Остальные параметры зонных расчетов подобраны путем проведения детального анализа сходимости.

В результате проведения самосогласованных расчетов были получены следующие значения параметров электронной структуры: $U = 1.005 \text{ eV}$, $J = 0.1 \text{ eV}$, $B = 0.352/U$, $X = 0.02$ для палладия и $U = 1.07 \text{ eV}$, $J = 0.1 \text{ eV}$, $B = 0.981/U$, $X = 0.03$ для платины. Запол-

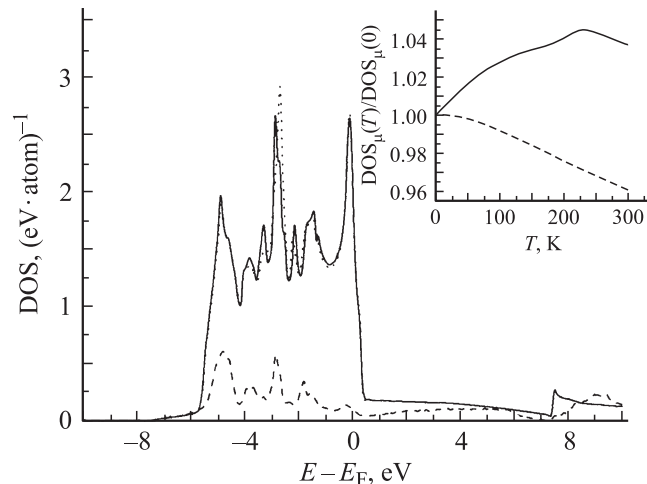


Рис. 1. Плотность электронных состояний палладия. Сплошная кривая — плотность d -состояний, штриховая кривая — плотность $s(p)$ -состояний, пунктир — плотность d -состояний, рассчитанная без учета спин-орбитального взаимодействия. На вставке — температурная зависимость плотности состояний при энергии химического потенциала: сплошная кривая — d -электронов, штриховая кривая — $s(p)$ -электронов.

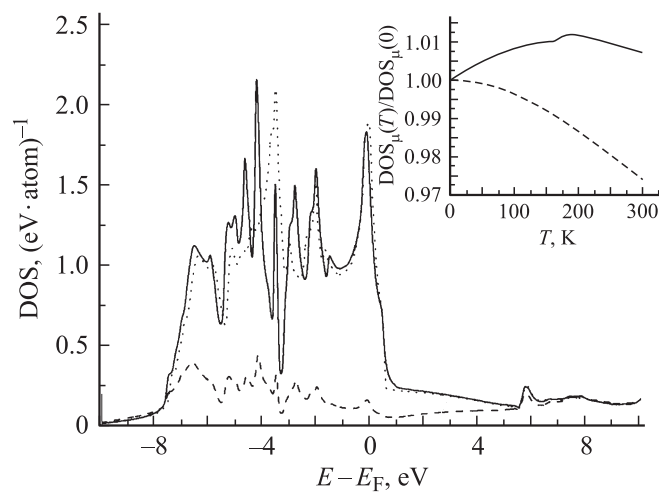


Рис. 2. Плотность электронных состояний платины. На вставке — температурная зависимость плотности состояний при энергии химического потенциала. Обозначения те же, что на рис. 1.

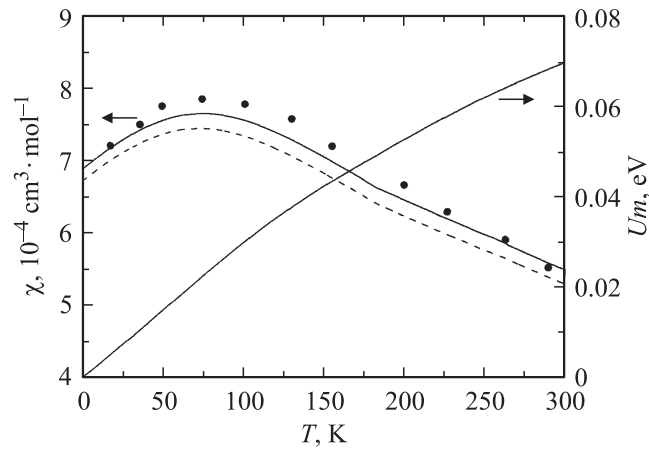


Рис. 3. Температурные зависимости магнитной восприимчивости и среднеквадратичного магнитного момента палладия. Сплошная кривая — расчет настоящей работы, штриховая кривая — расчет без учета температурного перераспределения электронов между $s(p)$ - и d -состояниями, точки — экспериментальные данные [19].

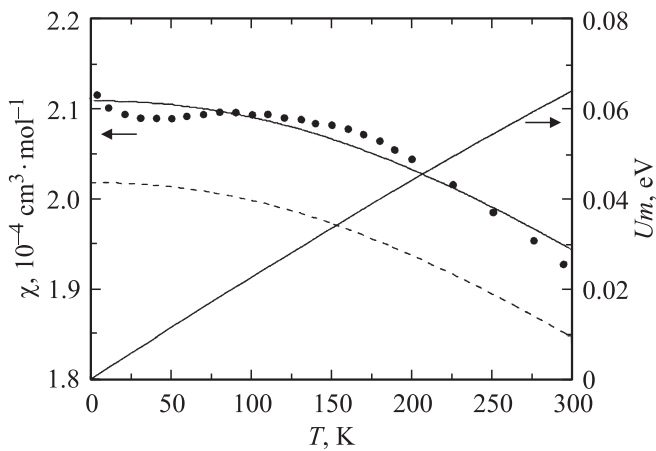


Рис. 4. Температурные зависимости магнитной восприимчивости и среднеквадратичного магнитного момента платины. Обозначения те же, что на рис. 3.

нение $4d$ -полосы оказалось равным 8.6 электронов/атом для палладия и 8.2 электронов/атом для платины. Результаты расчетов плотностей состояний показаны на рис. 1 и 2. При этом эффекты спин-орбитального взаимодействия оказывают большее влияние на зонную структуру платины, чем палладия, что отражает их положение в Периодической системе. Так, для платины плотность d -состояний на уровне Ферми с учетом спин-орбитального взаимодействия равна $g_d^{(0)}(\epsilon_F) = 1.42 \text{ eV}^{-1}$, а без учета спин-орбитального взаимодействия $g_d^{(0)}(\epsilon_F) = 1.87 \text{ eV}^{-1}$, аналогичные значения для палладия составляют $g_d^{(0)}(\epsilon_F) = 1.82$ и 1.81 eV^{-1} соответственно. Самосогласованно рассчитанный параметр спин-орбитального взаимодействия получился равным 0.19 eV для палладия и 0.57 eV для платины. Кроме

того, в соответствии с формулами (18) и (19) рассчитаны величины Δn , характеризующие перераспределения электронов между $s(p)$ - и d -состояниями за счет увеличения температуры. Получено, что в интервале температур от 0 до 300 К для обоих металлов число d -электронов уменьшается (а $s(p)$ — увеличивается) на величину порядка 10^{-3} в среднем на один узел. Это приводит к сдвигу химического потенциала на 10^{-3} eV для палладия и на 10^{-2} eV для платины. Связанные с этим эффектом изменения магнитной восприимчивости приводятся на рис. 3, 4.

На рис. 3 и 4 показаны результаты расчета температурных зависимостей магнитной восприимчивости палладия и платины, выполненные в рамках единой итерационной процедуры, в сопоставлении с экспериментальными данными. Видно, что рассмотренная модель дает хорошее согласие с экспериментальными данными для обоих металлов; в частности, удается воспроизвести низкотемпературный пик магнитной восприимчивости палладия. Эти результаты получены за счет спин-флуктуационной перенормировки фактора обменного усиления (см. (9b)), возникающего вследствие расщепления электронного спектра во флуктуирующих обменных полях в энергетической окрестности химического потенциала, что и приводит к температурной зависимости плотности состояний, приведенной на вставках к рис. 1, 2. Штриховые кривые на рис. 3 и 4 соответствуют результатам расчета, полученным в рамках однозонной модели Хаббарда. На рис. 3 и 4 также показаны температурные зависимости амплитуды спиновых флуктуаций (формула (16)), откуда видно, что спиновые флуктуации играют более значительную роль в палладии, чем в платине.

Кроме того, отметим, что ряд теории возмущения по операторам H_{int} , приводящий к (6), сходится при выполнении условия

$$(BT/U) (\delta(\delta + 2X))^{-1/2} UG_k^{(0)} < 1.$$

При найденных выше значениях параметров электронной структуры ряд теории возмущения сходится для палладия в интервале температур $T < 3400 \text{ K}$, а в случае платины при $T < 2400 \text{ K}$.

4. Таким образом, в рамках единой схемы выполнен расчет плотности электронных $s(p)d$ -состояний, химического потенциала, параметров спин-орбитальных и электрон-электронных взаимодействий, среднеквадратичных спиновых магнитных моментов и магнитной восприимчивости почти магнитных d -металлов на примере палладия и платины при конечных температурах. Плотность d - и $s(p)$ -электронных состояний рассчитана на основе модификации *ab initio* метода LDA + U + SO, самосогласованно дополненного учетом междоузельного $s(p)d$ -обмена, расчетом температурной зависимости магнитной восприимчивости и среднеквадратичного магнитного момента. При этом в рамках развитого самосогласованного подхода установлено, что

спин-орбитальное взаимодействие уменьшает фактор обменного усиления почти ферромагнитных палладия и платины. Фактор Стонера для палладия оказался равным 12.1, а для платины 4.2, что хорошо согласуется с известными для этих металлов значениями — 10 и 4 соответственно [24]. В то же время пренебрежение эффектами спин-орбитального взаимодействия в случае платины приводит к явно завышенным значениям фактора Стонера.

Кроме того, в настоящей работе показано, что особенностью почти магнитных металлов является возникающая при конечных температурах спин-флуктуационная перенормировка плотности электронных состояний. Несмотря на то что эта перенормировка не столь заметна на фоне кривой зависимости плотности состояний от энергии, она вносит определяющий вклад в формирование температурной зависимости обменно-усиленной магнитной восприимчивости (а возможно и других электронных свойств). При этом в результате спин-флуктуационного расщепления энергетических спектров электроны перераспределяются между $s(p)$ - и d -зонами.

Наконец, отметим, что спиновые флуктуации индуцируют зарядовые флуктуации, которые описываются флуктуирующими η -полями (см. (6)). Можно показать, что флуктуации η -полей связаны с продольными флуктуациями обменного поля соотношением

$$\delta\eta_{v2} \approx \frac{\sum_{\alpha=\pm 1} \alpha g_0^{(d)} (\mu - U\Delta n + \alpha Um)}{m \sum_{\alpha=\pm 1} g_0^{(d)} (\mu - U\Delta n + \alpha Um)} \delta\xi_{v2}^2,$$

$$\delta\xi_{v2}^2 = \xi_{v2}^2 - (Um)^2,$$

учет которого может оказаться важным при описании неустойчивостей систем на основе почти магнитных металлов к формированию сверхпроводящего и магнитоупорядоченного состояний. Однако исследование этого вопроса требует отдельного рассмотрения.

Список литературы

- [1] K.T. Moore, G. van der Laan. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1, 235 (2009).
- [2] Y.S. Shi, D. Qian, G.S. Dong, X.F. Jin, D. Wang. *Phys. Rev. B*, **65**, 172410 (2002).
- [3] D.A. Papaconstantopoulos, B.M. Klein. *Phys. Rev. Lett.* **35**, 2, 110 (1975).
- [4] Ю.А. Изюмов, В.И. Анисимов. *Электронная структура соединений с сильными корреляциями*. М.–Ижевск (2008), 376 с.
- [5] I.Yu. Sklyadneva, A. Leonardo, P.M. Echenique, S.V. Ereemeev, E.V. Chulkov. *J. Phys.: Cond. Matter* **18**, 7923 (2006).
- [6] T. Jarlborg. *Physica C* **385**, 4, 513 (2003).
- [7] F. Ladstadter, U. Hohenester, P. Pusching, C. Ambrosch-Draxl. *Phys. Rev. B* **70**, 235125 (2004).
- [8] A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov. *Phys. Rev. B* **72**, 024458 (2005).
- [9] А.А. Повзнер, А.Г. Волков. *ФММ* **66**, 6, 1073 (1988).
- [10] В.И. Гребенников, Ю.И. Прокопьев. *ФММ* **57**, 3, 483 (1984).
- [11] К.А. Шумихина, А.Г. Волков, А.А. Повзнер. *ФТТ* **45**, 6, 996 (2003).
- [12] А.Г. Волков, А.Г. Андреева, О.В. Аношина, А.А. Повзнер. *ФТТ* **44**, 12, 2217 (2002).
- [13] А.Г. Волков, А.А. Повзнер, В.В. Крюк, П.В. Баянкин. *ФТТ* **41**, 10, 1792 (1999).
- [14] J.A. Hertz, M.A. Klenin. *Phys. Rev. B* **10**, 3, 1084 (1974).
- [15] И.Е. Дзялошинский, П.С. Кондратенко. *ЖЭТФ* **70**, 1987 (1976).
- [16] В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирихин. *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d - и f -металлах и их соединениях*. М.–Ижевск (2008), 476 с.
- [17] S.N. Evangelou, D.M. Edwards. *J. Phys. C* **16**, 11, 2121 (1983).
- [18] Т. Мория. *УФН* **135**, 1, 117 (1981).
- [19] A.G. Petukhov, I.I. Mazin, L. Chioncel, A.I. Lichtenstein. *Phys. Rev. B* **67**, 153106 (2003).
- [20] J.P. Perdew, Y. Wang. *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
- [21] H.C. Jamieson, F.D. Manchester. *J. Phys. F* **2**, 323 (1972).
- [22] R.N. Schmid, E. Engel, R. Dreizler, P. Blaha, K. Schwarz. *Adv. Quantum Chem.* **33**, 209 (1999).
- [23] Ю.Н. Смирнов, В.М. Тимошенко. *Письма в ЖЭТФ* **15**, 8, 473 (1972).
- [24] A. Schindler, R. Konig, T. Herrmannsdorfer, H.F. Braun, G. Eska, D. Gunther, M. Meissner, M. Mertig, R. Wahl, W. Pompe. *Europhys. Lett.* **58**, 885 (2002).