

**Зонный магнетизм: от теории Стонера к описанию локальных моментов**

Доктор физико-математических наук Катанин Андрей Александрович  
(Институт физики металлов УрО РАН)

Описание зонных (почти) ферромагнитных систем привлекает к себе повышенное внимание в связи с теоретической и практической важностью систем с сильными магнитными корреляциями. К указанному классу систем относятся как переходные металлы (железо, никель, кобальт), так и соединения  $ZrZn_2$ ,  $UGe_2$ ,  $Sr_{2-x}La_xRuO_4$ , активно изучаемые в настоящее время.

В первой части доклада рассматриваются свойства систем, в которых имеются хорошо определенные фермиевские квазичастицы с пиком плотности состояний (сингулярностью ван Хофа) вблизи уровня Ферми. Классические теории Стонера, Канамори и Мории основываются на объяснении возникновения ферромагнетизма указанных систем на основе уменьшения потенциальной энергии в ферромагнитном состоянии в результате обменного межэлектронного взаимодействия. Однако наличие в рассматриваемых системах пика плотности состояний, а также других сингулярностей вершин межэлектронного взаимодействия приводит к резкому отклонению их свойств от предсказаний теории Стонера и важной роли перенормировки (экранирования) кулоновского взаимодействия, аналогичной теории Канамори.

В качестве примера в докладе рассматриваются магнитные свойства слоистых рутенатов  $Sr_{2-x}La_xRuO_4$ . Хотя указанные соединения имеют три листа ферми-поверхности, их вклад в магнитные свойства можно разделить, и вклад наибольшего листа  $\gamma$  оказывается наиболее существенным для описания тенденции к ферромагнитному упорядочению. При этом  $\gamma$ -лист ферми-поверхности этих систем описывается перескоком между ближайшими  $t$  и следующими за ближайшими  $t'$  соседями с  $t'/t \sim 0.45$ . Ферромагнитное упорядочение в рутенатах оказывается предпочтительным в интервале допирований  $x \sim 0.2$ , поскольку при этом критерий Стонера легко удовлетворяется, а другие, конкурирующие с ферромагнетизмом неустойчивости, являются более слабыми.

Для описания возможных магнитных и сверхпроводящих неустойчивостей слоистых рутенатов в докладе рассматривается метод функциональной ренормгруппы, в котором производится анализ эволюции вершин межэлектронного взаимодействия с изменением выбранного параметра обрезания (например, температуры). Решение ренормгрупповых уравнений позволяет определить зависимость вершин взаимодействия от выбранного параметра, а также получить результаты для восприимчивостей, связанных с различными типами магнитного и сверхпроводящего порядка. Сравнение восприимчивостей приводит к фазовой диаграмме, содержащей область сильных ферромагнитных корреляций вблизи ван-хововского заполнения, парамагнитную область ниже ван-хововского заполнения, а также узкую область несоизмеримых

корреляций выше ван-хововского заполнения. При этом в основном состоянии возникает достаточно узкая область ферромагнитного состояния, переходящая в парамагнитную (несоизмеримую) фазу с уменьшением (увеличением) химического потенциала путем перехода первого (второго) рода. Указанный результат может быть воспроизведен в теории Стонера с «перенормированным» улоновским взаимодействием, но отличается от предсказаний стандартной теории Стонера, приводящей к гораздо более широкой области ферромагнетизма. В докладе также рассматривается случай плоской зоны с  $t'/t=1/2$ , при котором теория Стонера приводит к качественно правильным результатам.

Вторая часть доклада посвящена описанию веществ с частично сформированными локальными моментами. К таким веществам относится, в частности, железо. Известно, что d-электроны в стандартном (ОЦК) железе (также, как в некоторых других переходных металлах) проявляют локализованные черты. В частности, отношение магнитного момента  $\mu_{CW}$ , извлеченного из закона Кюри-Вейса в парамагнитной фазе к магнитному моменту на атом в ферромагнитной фазе,  $\mu_{CW}/\mu_{exp} = 1.05$  близко к единице, что согласно критерию Родеса-Вольфарта указывает на наличие локальных моментов.

Для исследования возможности формирования локальных моментов и магнитных свойств железа применен метод LDA+DMFT, при этом особое внимание уделяется орбитально-разрешенным вкладам в одно- и двухчастичные свойства. Результирующая обратная статическая локальная восприимчивость  $\chi_g$  состояний линейна с температурой, а динамические локальные восприимчивости имеют пик при  $\omega=0$ , что свидетельствует о наличии локальных моментов. При этом возникновение локальных моментов обусловлено некогерентными электронными состояниями в  $e_g$  подзоне, существование которых связано с обобщенной сингулярностью ван Хофа в этой подзоне. Показано, что хундовский обмен служит главным источником формирования локальных моментов в железе.

Аналогичные вычисления для ГЦК (гамма-) модификации железа показывают, что хотя пики динамической восприимчивости имеют несколько большую ширину, их ширина также сравнима с температурой, а обратная восприимчивость оказывается линейной функцией температуры при  $T > 1000\text{K}$ . Таким образом, в указанном интервале температур эта модификация также может быть описана в терминах локальных моментов. В то же время, при низких температурах гамма-железо более естественным образом описывается в рамках зонной картины. В частности, антиферромагнетизм преципитатов ГЦК железа в меди согласуется с пиком неоднородной восприимчивости вблизи точки  $X=(2\pi,0,0)$ , связанным с нестингом одного из листов ферми-поверхности, указывающем на зонную природу магнетизма в этом случае.