

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



E17 - 11899

E.Kolley, W.Kolley, A.L.Kuzemsky

**FERROMAGNETIC SPIN WAVES  
AND THEIR STABILITY  
IN DISORDERED METALLIC ALLOYS**

**1978**

**E17 - 11899**

**E.Kolley, W.Kolley, A.L.Kuzemsky**

**FERROMAGNETIC SPIN WAVES  
AND THEIR STABILITY  
IN DISORDERED METALLIC ALLOYS**

*Submitted to "Физика твердого тела"*

Коллей Е., Коллей В., Куземский А.Л.

E17 - 11899

Спиновые волны и их устойчивость в неупорядоченных ферромагнитных металлических сплавах

На основе микроскопической теории ферми-жидкости при нулевой температуре вычислена энергия длинноволновых спиновых возмущений в ферромагнитных сплавах переходных металлов. В когерентном горизонтальном лестничном приближении для хаотической модели Хаббарда проведено самосогласованное вычисление перенормировки коэффициента жесткости  $D$  за счет электрон-электронных корреляций. Коэффициент  $D$  получен численным образом и используется для определения устойчивости ферромагнитного состояния. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов для сплавов на основе Ni.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Kolley E., Kolley W., Kuzemsky A.L.

E17 - 11899

Ferromagnetic Spin Waves and Their Stability in Disordered Metallic Alloys

The energy of long-wavelength spin waves in ferromagnetic transition metal alloys is calculated within a microscopic Fermi liquid approach at zero temperature. The renormalization of the stiffness constant  $D$  due to electron-electron correlations is performed self-consistently in the coherent horizontal ladder approximation for the random Hubbard model. The stability of ferromagnetism is studied numerically in terms of  $D$ . A comparison with neutron scattering data for Ni-based alloys is given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

## 1. INTRODUCTION

In itinerant-electron ferromagnets the stiffness constant  $D$  characterizes long-wavelength spin waves of the type  $\omega_q = Dq^2$  below the Stoner gap in the particle-hole excitation spectrum. In particular, the stability of ferromagnetism in metallic systems, for instance in transition metal alloys, is related to the condition  $D > 0$  provided that the magnetization is positive. Inelastic neutron scattering data of  $D$  for pure Ni<sup>1/</sup> and Ni-based alloys (see, e.g.<sup>2 to 5/</sup>) can be explained by an itinerant electron model. In the simplest version, the intra-atomic interaction between  $d$ -electrons produces the exchange splitting and their overlaps guarantee ferromagnetism.

The approach mostly used<sup>6 to 10/</sup> to calculate  $D$  for alloys within a random version of the Hubbard model<sup>11/</sup> is based on the random phase approximation (RPA), where the electron-electron interaction is taken into account in the Hartree-Fock (HF) approximation and the disorder in the coherent potential approximation (CPA)<sup>12/</sup>. A RPA decoupling scheme was given in<sup>13/</sup>. Beside CPA treatments there are rigid band calculations of  $D$  (cf.<sup>3, 10/</sup>) in alloys performed with an adjusted band splitting depending on the impurity concentration.

In order to include electron correlation effects on  $D$  a theoretical scheme going beyond the RPA was proposed in<sup>14/</sup>, which is based on the coherent ladder approximation (CLA)<sup>15, 16/</sup>, i.e., the self-consistent combination of the CPA and the local ladder approximation<sup>17/</sup>

in the particle-particle channel. Such a T-matrix approximation is suitable for strong short-range interactions and low carrier densities, and can therefore be applied to Ni (0.6 holes per atom), Pd and Pt (0.4 holes per atom). The replacement of the energy-dependent T-matrix by an effective interaction of the Kanamori type<sup>/18/</sup>, as used, e.g., in calculating the paramagnetic susceptibility<sup>/19/</sup> and the magnetostriction<sup>/20/</sup>, leads again to a RPA-CPA treatment of spin waves.

In the present paper we calculate explicitly the stiffness constant D for disordered alloys within a microscopic Fermi liquid description<sup>/14/</sup> at zero temperature starting from a single-band random Hubbard model. The main features of this computation of D are as follows:

(i) Simplified assumptions on the pure unperturbed band permit one to carry out k-space integrations analytically.

(ii) Correlation effects are evaluated self-consistently from bare Coulomb interactions by retaining the energy-dependence of the T-matrices.

(iii) Weak and strong ferromagnetism are treated simultaneously. Numerical CLA results of D are compared with experimental values for NiFe and NiPd alloys. Moreover, the stability of ferromagnetism is also proved in terms of RPA-CPA solutions.

## 2. STIFFNESS CONSTANT INCLUDING ELECTRON-ELECTRON CORRELATIONS

It is satisfactory to base the ferromagnetism in narrow-band alloys  $A_c B_{1-c}$  on the Hubbard Hamiltonian<sup>/11/</sup> in the random form

$$H^{\{ \nu \}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \epsilon_j^{\nu} n_{j\sigma} + \sum_i U_i^{\nu} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

where  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  ( $n_{i\sigma}$ ) is the occupation number operator for Bloch (Wannier) states with spin  $\sigma$ , and  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  is the band energy assumed to be independent of the atomic arrangement. Within the whole alloy configuration  $\{ \nu \}$  the

atomic energy  $\epsilon_i^{\nu}$  and the bare intra-atomic Coulomb interaction  $U_i^{\nu}$  take the random values  $\epsilon_i^{\nu}$  and  $U^{\nu}$  ( $\nu=A,B$ ), respectively, according to whether an A- or B-atom occupies the site i.

The spin wave energy  $\omega_q = Dq^2$  for cubic crystals can be determined by a pole of the transverse susceptibility  $\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$  giving rise to the spin wave stiffness constant

$$D = - \frac{1}{2 \langle \langle S_i^z \rangle^{\{ \nu \}} \rangle_c} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \left[ \frac{\omega^2}{q^2} (\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{2 \langle \langle S_i^z \rangle^{\{ \nu \}} \rangle_c}{\omega}) \right], \quad (2)$$

where  $2 \langle \langle S_i^z \rangle^{\{ \nu \}} \rangle_c = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$  is the magnetization per site

( $n_{\sigma}$ : average number of  $\sigma$  electrons per site),  $\langle \dots \rangle^{\{ \nu \}}$  means the ground-state expectation value within  $\{ \nu \}$ , and  $\langle \dots \rangle_c$  denotes the configuration average. Alternatively, the formula

$$D = \frac{1}{2 \langle \langle S_i^z \rangle^{\{ \nu \}} \rangle_c} \left[ \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \langle \langle [S_{\mathbf{q}}^+, qJ_{\mathbf{q}}^-] \rangle^{\{ \nu \}} \rangle_c - \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{J}^{+-}(\mathbf{q}, \omega) \right] \quad (3)$$

written down by means of the spin current-spin current response  $\chi_{J}^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$  was applied to alloys in<sup>/7,10,13/</sup> (compare the derivation for pure systems<sup>/21/</sup>). For the model (1) the transverse spin density operator in the Fourier transform  $S_{\mathbf{q}}^+$  (or  $S_{-\mathbf{q}}^- = (S_{\mathbf{q}}^+)^{\dagger}$ ) and its current operator  $J_{\mathbf{q}}^+$  (or  $J_{-\mathbf{q}}^- = (J_{\mathbf{q}}^+)^{\dagger}$ ) being here nonrandom are given by

$$\left. \begin{aligned} S_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \\ qJ_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

where  $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$  ( $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ) creates (destroys) an electron in the state  $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ , N is the number of lattice sites.

In the framework of a microscopic Fermi liquid description (cf. <sup>14/</sup>) at zero temperature the susceptibilities in (2) and (3) can be expressed with (4) in terms of causal Green functions as follows:

$$\chi^{+-}(\vec{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\vec{q}}^+, S_{-\vec{q}}^- \rangle\rangle_c^{\{\nu\}} = \frac{i}{N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \Lambda_{0\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \vec{q}) \times G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \lambda_0(-\vec{q}) G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c, \quad (5)$$

$$q^2 \chi_J^{+-}(\vec{q}, \omega) = -\langle\langle q J_{\vec{q}}^+, q J_{-\vec{q}}^- \rangle\rangle_c^{\{\nu\}} = \quad (6)$$

$$= -\frac{i}{N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \vec{q}) G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \lambda_1(-\vec{q}) G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c,$$

where

$$\Lambda_{\alpha ij}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \vec{q}) = \lambda_{\alpha ij}(\vec{q}) - \delta_{ij} \int \frac{d\bar{E}}{2\pi} i I_i^{\{\nu\}}(E, \bar{E}+\omega; \omega) \times \quad (7)$$

$$\times \sum_{mn} G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}) \Lambda_{amn}^{\{\nu\}}(\bar{E}, \bar{E}+\omega; \vec{q}) G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}+\omega); \quad (\alpha=0,1)$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{0ij}(\vec{q}) &\equiv e^{-i\vec{q}\vec{R}_i} \delta_{ij}, \quad \lambda_{1ij}(\vec{q}) = t_{ij} \left( e^{-i\vec{q}\vec{R}_i} - e^{-i\vec{q}\vec{R}_j} \right) \\ t_{ij} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \end{aligned} \right\} (8)$$

Here only the locality of the irreducible particle-hole

vertex  $I_i^{\{\nu\}}(E, \bar{E}+\omega; \omega) \equiv I_i^{\{\nu\}}(E, \bar{E}+\omega; E+\omega, \bar{E})$  has

been assumed, and the trace means the summation (without spin) over one-particle states. The prescription (3) seems to be favoured instead of (2), because the Bethe-

Salpeter-type equation (7) for  $\alpha=1$  can be solved without further assumptions on  $I_i^{\{\nu\}}$ . Then by expanding  $\lambda_1$  and the effective spin-flip current  $\Lambda_i^{\{\nu\}}$  in (6) and (7) to first order in  $\vec{q}$  and employing the cubic symmetry in the following one gets

$$\chi_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \vec{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega) G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \vec{J} G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c, \quad (9)$$

$$\vec{\Lambda}_{1ij}^{\{\nu\}}(E, E+\omega) = \vec{J}_{ij} - \delta_{ij} \int \frac{d\bar{E}}{2\pi} i I_i^{\{\nu\}}(E, \bar{E}+\omega; \omega) \sum_{mn} G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}) \times \Lambda_{1mp}^{\{\nu\}}(\bar{E}, \bar{E}+\omega) G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}+\omega);$$

$$\vec{J}_{ij} = -it_{ij}(\vec{R}_i - \vec{R}_j), \quad (10)$$

where the notations  $\lambda_1(\vec{q}) = \vec{q} \cdot \vec{J}$  and  $\Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \vec{q}) = \vec{q} \cdot \vec{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega)$  have been introduced; under the trace  $\vec{J}$  and  $\vec{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}$  form a scalar product.

Separating diagonal and off-diagonal parts of  $\vec{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}$  in (9) and (10) we obtain

$$\chi_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \vec{J} G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \vec{J} G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c + \quad (11)$$

$$+ \tilde{\chi}_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega),$$

where

$$\tilde{\chi}_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \sum_i \vec{\Lambda}_{1ii}^{\{\nu\}}(E, E+\omega) \vec{K}_{ii}^{\{\nu\}}(E+\omega, E) \rangle_c, \quad (12)$$

$$\vec{K}_{ii}^{\{\nu\}}(E+\omega, E) = \sum_{mn} G_{im\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \vec{J}_{mn} G_{ni\uparrow}^{\{\nu\}}(E). \quad (13)$$

Since the configurational averaging in (12) is beyond the CPA we make the factorization ansatz  $\langle \tilde{\Lambda}_1^{\nu\downarrow} \tilde{\Lambda}_1^{\nu\uparrow} \rangle_c = \langle \tilde{\Lambda}_1^{\nu\downarrow} \rangle_c \langle \tilde{\Lambda}_1^{\nu\uparrow} \rangle_c$  leading to

$$\begin{aligned} \vec{K}_{\downarrow\uparrow}(E+\omega, E) &= \langle G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega) \vec{J} G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \rangle_{\text{cii}} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}_{\vec{k}\downarrow}(E+\omega) \mathcal{G}_{\vec{k}\uparrow}(E) V_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

and  $\tilde{\chi}_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega) = 0$  due to time-reversal symmetry.  $\mathcal{G}_{\vec{k}\sigma}^{\rightarrow}$  denotes the coherent one-particle Green function including electron-electron correlations (see below). Thus we are left with the CPA result without vertex corrections, i.e.,

$$\chi_J^{+-}(\vec{q}=0, \omega) = \frac{i}{8N} \int \frac{dE}{2\pi} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}_{\vec{k}\downarrow}(E+\omega) \mathcal{G}_{\vec{k}\uparrow}(E) (V_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2. \quad (15)$$

Substituting (15) and

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \langle \langle [S_{\vec{q}}^+, q J_{-\vec{q}}^-] \rangle \rangle_c^{\{\nu\}} = \frac{1}{6N} \sum_{\vec{k}\sigma} \langle \langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle \rangle_c V_{\vec{k}}^2 \epsilon_{\vec{k}} \quad (16)$$

into (3) and going over from the causal to retarded ("r") Green functions one finds

$$D = \frac{1}{6\pi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})} \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (\mathcal{G}_{\vec{k}\uparrow}^r(E) - \mathcal{G}_{\vec{k}\downarrow}^r(E))^2 (V_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2, \quad (17)$$

where  $\mu$  is the Fermi energy. This expression for  $D$  agrees formally with the RPA-CPA result<sup>6,7,10/</sup>, which was based on the HF treatment of the electron-electron interaction.

In the present calculation, however,  $\mathcal{G}_{\vec{k}\sigma}$  is dressed in the CLA scheme<sup>16/</sup>. Then the correlation part expressed in terms of partially averaged causal functions reads

$$\Sigma_{Uii\sigma}^{\nu}(E) = \int \frac{d\bar{E}}{2\pi i} G_{ii-\sigma}^{\nu}(\bar{E}) T_i^{\nu}(E+\bar{E}), \quad (\nu = A, B), \quad (18)$$

$$T_i^{\nu}(E) = \left[ \frac{1}{U_i^{\nu}} + \int \frac{d\bar{E}}{2\pi i} G_{i1\sigma}^{\nu}(\bar{E}) G_{ii-\sigma}^{\nu}(E-\bar{E}) \right]^{-1}, \quad (19)$$

where  $T_i^{\nu}$  is the effective two-particle vertex. The local Green function  $G_{i1\sigma}^{\nu}(z)$  written as resolvent ( $z$  being the complex energy) is renormalized by

$$G_{i1\sigma}^{\nu}(z) = \frac{F_{\sigma}(z)}{1 - (\tilde{\epsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z) - \Sigma_{\sigma}(z)) F_{\sigma}(z)}, \quad (20)$$

$$\tilde{\epsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z) = \epsilon_i^{\nu} + \Sigma_{Uii\sigma}^{\nu}(z), \quad (21)$$

$$F_{\sigma}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}_{\vec{k}\sigma}(z), \quad (22)$$

$$\mathcal{G}_{\vec{k}\sigma}(z) = (z - \epsilon_{\vec{k}} - \Sigma_{\sigma}(z))^{-1}, \quad (23)$$

$$\Sigma_{\sigma}(z) = c \tilde{\epsilon}_{\sigma}^A(z) + (1-c) \tilde{\epsilon}_{\sigma}^B(z) - [\tilde{\epsilon}_{\sigma}^A(z) - \Sigma_{\sigma}(z)] F_{\sigma}(z) [\tilde{\epsilon}_{\sigma}^B(z) - \Sigma_{\sigma}(z)], \quad (24)$$

$$n = \sum_{\sigma} n_{\sigma} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\mu} dE \text{Im} F_{\sigma}^r(E). \quad (25)$$

Here  $\Sigma_{\sigma}$  is the coherent potential,  $n$  is the average number of electrons per site. Contrary to the usual CPA<sup>12/</sup>, the atomic potential  $\tilde{\epsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z)$  ( $i$  is dropped in (24)) becomes energy-dependent through the self-energy

$\Sigma_{Uii\sigma}^{\nu}(z)$  caused by correlations.

In the HF approximation the modified CPA problem (20) to (25) must be completed only, instead of (18) and (19), by the constant self-energy  $\Sigma_{Uii\sigma}^{\nu, \text{HF}} = U_i^{\nu} n_{i-\sigma}^{\nu}$ , where  $n_{i\sigma}^{\nu}$  is the average electron number with spin  $\sigma$  at  $\nu$  sites given by

$$n_{i\sigma}^{\nu} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} dE \text{Im} G_{i1\sigma}^{\nu, r}(E). \quad (26)$$

Taking into account the special vertex  $I_i^{\{\nu\}}(E, \bar{E} + \omega; \omega) = -T_i^{\{\nu\}}(E + \bar{E} + \omega) = -T_i^{\{\nu\}}(E + \bar{E} + \omega)$ , the equations (7), (18)

and (19) with  $\nu$  replaced by  $\{\nu\}$  yield the identity<sup>/14/</sup>

$$\omega \Lambda_{0i}^{\{\nu\}}(E, E + \omega; \vec{q}) \delta_{ij} - \Lambda_{1ij}^{\{\nu\}}(E, E + \omega; \vec{q}) = e^{-i\vec{q}\vec{R}_i} G_{ij\downarrow}^{\{\nu\}-1}(E + \omega) - G_{ij\uparrow}^{\{\nu\}-1}(E) e^{-i\vec{q}\vec{R}_j} \quad (27)$$

with

$$(G_{ij\sigma}^{\{\nu\}-1}(E)) = (E - \epsilon_i^\nu) \delta_{ij} - t_{ij} - \sum_{Uii\sigma} \{\nu\} (E) \delta_{ij} \quad (28)$$

where the site-diagonality of  $\Lambda_{0ij}^{\{\nu\}} = \Lambda_{0i}^{\{\nu\}} \delta_{ij}$  has

been used in (27). Hence, in the completely random version  $\{\nu\}$ , the local ladder approximation fulfils the Ward-Takahashi-type relation (27).

The stability condition of the ferromagnetic ground state against spin wave excitations

$$\hat{D} = D(n_\uparrow - n_\downarrow) > 0 \quad (29)$$

may be found from the spectral representation

$$\chi^{+-r}(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{sign } \omega'}{\omega - \omega' + i\epsilon} \hat{I}_{S_\uparrow S_\downarrow - \vec{q}}(\omega') \quad (30)$$

where the spectral density  $\hat{I}_{S_\uparrow S_\downarrow - \vec{q}}(\omega) \geq 0$  is related to a configurationally averaged system. The magnon pole

$$\chi_{\text{pole}}^{+-r}(\vec{q}, \omega) = -\frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{\omega - Dq^2 + i\epsilon} \quad (31)$$

can be separated for small  $q$  and  $\omega$  (Goldstone theorem) from the Stoner continuum, since the individual

excitations have vanishing spectral weight for  $\vec{q} \rightarrow 0$ . In (31) the damping is omitted, and the residue is written down only in the lowest order of  $q$ . The comparison of (30) and (31) leads to (29)<sup>/14/</sup>.

In the present approximation the spin wave damping  $\gamma_q$  entering into (31) instead of  $\epsilon$  can be proved to be

$$\gamma_q = \frac{q^2}{n_\uparrow - n_\downarrow} \text{Im} \chi_J^{+-r}(0, Dq^2) = \frac{Dq^4}{3\pi(n_\uparrow - n_\downarrow)N} \sum_{\vec{k}} \text{Im} \mathcal{G}_{\vec{k}\uparrow}^r(\mu) \text{Im} \mathcal{G}_{\vec{k}\downarrow}^r(\mu) (\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2 \quad (32)$$

taking the same form as in RPA-CPA<sup>/8/</sup>; however, here electron-electron scatterings are included.

### 3. NUMERICAL ANALYSIS AND CONCLUSION

To carry out part of the computation of  $D$  analytically we choose simplified expressions<sup>/22/</sup> for the unperturbed density of states (per site per spin)  $\rho_0(E)$  and the mean-square velocity over a constant-energy surface as follows:

$$\rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta(E - \epsilon_{\vec{k}}) = \frac{2}{\pi w} [1 - (\frac{E}{w})^2]^{1/2} \theta(w - |E|), \quad (33)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta(E - \epsilon_{\vec{k}}) (\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2 = \frac{2v_m^2}{\pi w} [1 - (\frac{E}{w})^2]^{3/2} \theta(w - |E|), \quad (34)$$

where  $w$  is the half bandwidth, and  $v_m$  is of order  $w$  with  $a$  being the lattice spacing. By means of (33) the  $\vec{k}$ -summation in (22) yields

$$F_\sigma(z) = \frac{2}{w} (\tilde{z}_\sigma - i\sqrt{1 - \tilde{z}_\sigma^2}), \quad \tilde{z}_\sigma = \frac{z - \sum \sigma(z)}{w} \quad (35)$$

To make (35) univalent we take that branch in the  $\tilde{z}_\sigma$ -plane with a cut along the real axis from -1 to 1, where the square root is positive on the upper lip of the cut.

Rewriting (17) as

$$D = \frac{1}{6\pi(n_\uparrow - n_\downarrow)} - \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE [\Pi_{\uparrow\uparrow}^{\text{rr}}(E, E) + \Pi_{\downarrow\downarrow}^{\text{rr}}(E, E) - 2\Pi_{\downarrow\uparrow}^{\text{rr}}(E, E)] \quad (36)$$

with the abbreviations  $\Pi_{\sigma\sigma}^{\text{rr}}(E, E) \equiv \Pi_{\sigma\sigma}^{\text{rr}}(E^+, E^+)$ ,  $E^+ = E + i0$ , and

$$\Pi_{\sigma\sigma'}(z, z') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}_{\vec{k}\sigma}(z) \mathcal{G}_{\vec{k}\sigma'}(z') (\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}})^2 \quad (37)$$

we find in performing the  $\vec{k}$ -sum with (34) by the residue method the current polarization parts

$$\Pi_{\sigma\sigma}^{\text{rr}} = \frac{2v_m^2}{w^2} (3z_\sigma^2 - \frac{3}{2} - 3iz_\sigma \sqrt{1-z_\sigma^2}), \quad z_\sigma = \frac{E^+ - \Sigma_\sigma(E^+)}{w} \quad (38)$$

$$\Pi_{\uparrow\downarrow}^{\text{rr}} = \frac{2v_m^2}{w^2} (z_\uparrow^2 + z_\downarrow^2 + z_\uparrow z_\downarrow - \frac{3}{2} + i \frac{(1-z_\uparrow^2)^{3/2} - (1-z_\downarrow^2)^{3/2}}{z_\uparrow - z_\downarrow}). \quad (39)$$

From (36), (38), and (39) it results

$$D = \frac{v_m^2}{3\pi w^2(n_\uparrow - n_\downarrow)} - \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE [(z_\uparrow - z_\downarrow)^2 - i\sqrt{1-z_\uparrow^2}(3z_\uparrow + \frac{2(1-z_\uparrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow}) - i\sqrt{1-z_\downarrow^2}(3z_\downarrow - \frac{2(1-z_\downarrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow})], \quad (40)$$

where the complex square roots are taken in the sense mentioned above.

The scalar dc conductivity  $\sigma$  at zero temperature can be calculated with the "same accuracy" as  $D$ . This leads to the modified Kubo-Greenwood formula

$$\sigma = \frac{e^2 N}{6\pi V} \sum_{\sigma} [\Pi_{\sigma\sigma}^{\text{ra}}(\mu, \mu) - \text{Re} \Pi_{\sigma\sigma}^{\text{rr}}(\mu, \mu)] \equiv \Sigma_{\sigma} \sigma \quad (41)$$

including Green functions renormalized by electron correlations within the CLA. Here  $\Pi_{\sigma\sigma}^{\text{ra}}(\mu, \mu) \equiv \Pi_{\sigma\sigma}^{\text{ra}}(\mu^+, \mu^-)$ ,  $\mu^- = \mu - i0$ ,  $V$  is the volume of the system, and  $e$  is the unit charge. By inserting (38) and (39) with the replacement  $\Pi_{\sigma\sigma}^{\text{ra}} = \Pi_{\uparrow\uparrow}^{\text{rr}} [z_\uparrow \rightarrow z_\sigma, z_\downarrow \rightarrow z_\sigma^*]$  into (41) we get

the spin-dependent dc conductivity (for  $\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+) < 0$ )

$$\sigma_{\sigma} = \hat{\sigma}_{\sigma} \pi \left[ \frac{2(\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+))^2}{w^2} + \frac{w}{\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+)} \text{Re} \{ i \sqrt{1-z_\sigma^2} (i(1-\hat{z}_\sigma^2) + \frac{3}{w} \hat{z}_\sigma \text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+)) \} \right], \quad (42)$$

where

$$\hat{z}_\sigma = \frac{\mu^+ - \Sigma_{\sigma}(\mu^+)}{w}, \quad \hat{\sigma} = \frac{e^2 v_m^2 N}{3\pi^2 V}. \quad (43)$$

The numerical analysis is performed as follows: Choose the parameters  $w, \epsilon^A, \epsilon^B = 0$  fixed,  $U^A, U^B, c$ , and  $n$ ; solve the self-consistency loop (18) to (25) with the explicit Green function (35), and use these results to obtain  $D$  from (40) via the E-integration.

Figure 1 shows the transition region between weak and strong ferromagnetism versus the strengths of the intra-atomic Coulomb repulsion  $U^V$  treated here in the HF approximation. In particular, the sets with  $U^A = 2$ ,  $U^B = 0$  and  $U^A = 2$ ,  $U^B = 2$  have been investigated in <sup>23/</sup>, but not in the context of spin waves. The RPA-CPA results (a) for the stiffness constant  $D$  (in units of  $d_0 = \frac{1}{9} w a^2$ )

refer to the instability of the ferromagnetic ground state against spin wave excitations. Note that a crossing of the spin-dependent dc conductivities  $\sigma_{\sigma}(b)$  is found (cf. <sup>24/</sup>). The component and average magnetizations  $m^V = n_\uparrow^V - n_\downarrow^V$  and  $m = n_\uparrow - n_\downarrow$ , resp., are drawn in Fig. 1d.

Figure 2 represents a confined region of stable (mainly saturated) ferromagnetism ( $D > 0$  (b),  $m^V > 0$  (a)) depending on the electron density  $n$ . The zero of  $D$  at



the lower value of  $n$  corresponds roughly to a Stoner-like criterion (cf.<sup>16/</sup>), while the other zero signals

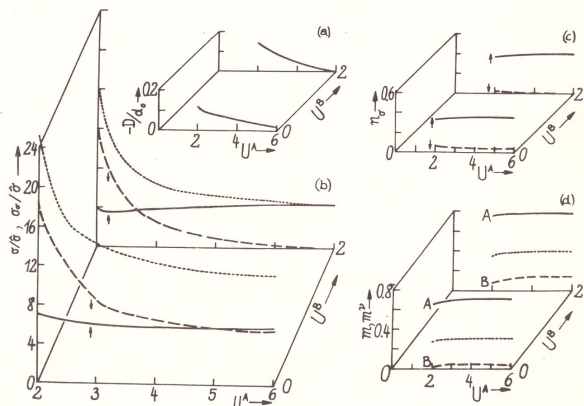


Fig. 1. a) Unstable ferromagnetism characterized by the spin wave stiffness constant  $D < 0$ , b) dc conductivities  $\sigma_\sigma$  and  $\sigma$ , c) electron densities  $n_\sigma$ , and d) magnetizations  $m^V$  and  $m$  versus  $U^V$  for an alloy with  $(w, \epsilon^A, \epsilon^B, c, n) = (1, -0.8, 0, 0.4, 0.4)$ . Hartree-Fock treatment of the electron-electron interaction.

a change of the spin arrangement. Note that the maxima of  $D$  and  $\sigma_\sigma$  (d) occur nearly at the same  $n$  values.

Most of the data on the stiffness constant  $D$  exist for NiFe alloys as reported in Fig. 3. As a test, we have taken into account electron-electron correlations, although the present scheme is more suited to describe the nickel component with 0.6 holes per atom in the  $d$  band than the iron component with a high local hole density. In Fig. 3 the  $D$  values (x) calculated on the basis of the CLA are compared with (a) results obtained in RPA-CPA<sup>7,9/</sup>, "rigid band" theory<sup>10/</sup>, in the approach<sup>13/</sup>, and with inelastic neutron scattering data<sup>1,2,3/</sup>. The small value of  $D$  at  $c = 0.4$  (b) shows

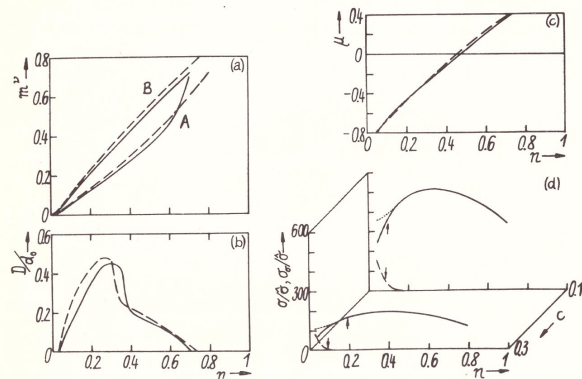


Fig. 2. a) Partial magnetizations  $m^V$ , b) spin wave stiffness constant  $D$  in the stable ferromagnetic case, c) Fermi energy  $\mu$ , and d) dc conductivities  $\sigma_\sigma$  and  $\sigma$  versus  $n$  at the alloy concentrations  $c = 0.1$  (full lines in a), b), c) and  $c = 0.3$  (dashed lines in a), b), c) for the set  $(w, \epsilon^A, \epsilon^B, U^A, U^B) = (1, 0.2, 0, 4, 3)$ . Hartree-Fock treatment of the electron-electron interaction.

that our model calculation can be justified only for small Fe concentrations. Note that for pure Ni the stiffness constant is found close to  $D_{Ni} = 555 \text{ meV } \text{\AA}^2$  measured at  $4.2 \text{ K}$ <sup>17/</sup>.

Electron correlation effects on the stiffness constant  $D$  in NiPd alloys are studied in Fig. 4, and a comparison with<sup>25/</sup> is given. This material is a good candidate for the CLA due to the small density of holes. For the pure systems the parameters are chosen as proposed in<sup>20/</sup>; in alloying one has  $n = cn^{Pd} + (1-c)n^{Ni}$ , and the different hopping integrals are taken into account by putting the bandwidth  $2w = c(2w)^{Pd} + (1-c)(2w)^{Ni}$ . Note that in reduced units  $U^{Pd}, U^{Ni}, \epsilon^{Pd} - \epsilon^{Ni}$  are scaled for all  $c$  by  $2w = 1$ . The bare  $U^V$  are dressed self-consistently yielding the two-particle vertices  $T_i^V(E+E)$ ,

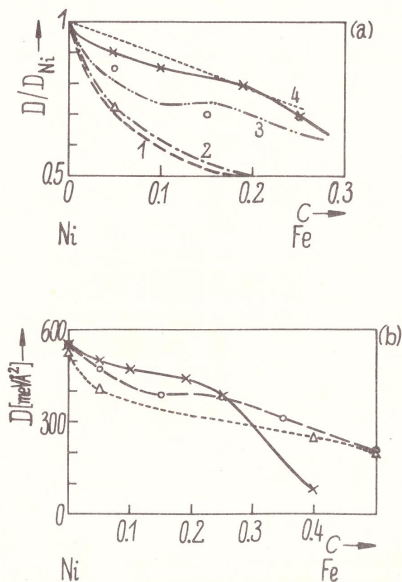


Fig. 3. Spin wave stiffness constant  $D$  versus  $c$  for  $\text{Fe}_c\text{Ni}_{1-c}$  alloys.  $D$  values (x) based on the coherent ladder approximation with  $(w, \epsilon^A, \epsilon^B, U^A, U^B, n_c) = (0.5, -0.24, 0, 2.66, 3.4, 0.6)$  ( $2w = 4.15$  eV,  $a = 4 \text{ \AA}$  in absolute units in b). Comparison with a) results computed in  $^{17/}$ (1),  $^{9/}$ (2),  $^{10/}$ (3),  $^{13/}$ (4) and a), b) experimental data given in  $^{1/}$ (□),  $^{2/}$ (Δ),  $^{3/}$ (○).

especially  $\Gamma^\nu = T_1^\nu(2\mu)$  and  $\Gamma = c\Gamma^A + (1-c)\Gamma^B$  are plotted in reduced units in Fig. 4d.

The numerical results of the present model calculation exhibit the marked influence of the electron-electron correlations on the magnon energy in the long-wavelength limit  $\omega_q = Dq^2$ . Although a single-band Hubbard model with simplified band structure and diagonal dis-

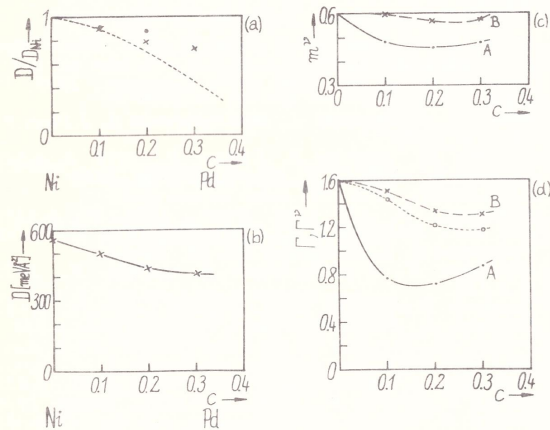


Fig. 4.  $\text{Pd}_c\text{Ni}_{1-c}$  alloys treated by using the coherent ladder approximation with the set  $((2w)_{\text{Pd}}, (2w)_{\text{Ni}}, \epsilon_{\text{Pd}}^{\text{Pd-Ni}}, U_{\text{Pd}}^{\text{Pd}}, U_{\text{Ni}}^{\text{Ni}}, n_{\text{Pd}}, n_{\text{Ni}}) = (6.05 \text{ eV}, 4.15 \text{ eV}, 0.3 \text{ eV}, 9.17 \text{ eV}, 14.11 \text{ eV}, 0.4, 0.6)$ . a) Stiffness constant  $D$  values (x) compared with results in  $^{25/}$  (---) and experimental points (●) quoted in  $^{25/}$ . b)  $D$  in absolute units ( $a = 3.8 \text{ \AA}$ ). c) partial magnetizations  $m^A$  and  $m^B$ . d) effective Coulomb interactions  $\Gamma^A$  and  $\Gamma^B$  versus  $c$ .

order only is taken into account, physically reasonable  $D$  values are found for Ni-based alloys. Beyond the RPA-CPA treatment, the approach given here is based on the coherent horizontal ladder approximation. Locality of the energy-dependent two-particle vertices is assumed which allows to preserve the single-site character of the CPA. The spin wave damping is proved to be small at least of order  $q^4$ . Thus a practicable method is proposed which retains the self-consistency to find stable ferromagnetism in transition metal alloys.

## REFERENCES

1. Mook H.A., Lynn J.W., Nicklow R.M. *Phys. Rev. Lett.*, 1973, 30, p.556.
2. Hennion M. et al. *Solid State Commun.*, 1975, 17, p.899.
3. Mikke K., Jankowska J., Modrzejewski A. *J.Phys.F*, 1976, 6, p.631.
4. Hennion M., Hennion B. *J.Phys. F*, 1978, 8, p.287.
5. Hennion B., Hennion M. *Preprint PSRM*, 1510, CEN. Saclay, 1978.
6. Fukuyama H. *AIP Conf. Proc.*, 1973, 10, p.1127.
7. Hill D.J., Edwards D.M. *J.Phys. F*, 1973, 3, p.L162.
8. Fukuyama H. *J.Physique*, 1974, 35, C4-141.
9. Riedinger R., Nauciel-Bloch M. *J.Phys. F*, 1975, 5, p.732.
10. Edwards D.M., Hill D.J. *J.Phys.F*, 1976, 6, p.607.
11. Hubbard J. *Proc. Roy. Soc.*, 1963, A276, p.238.
12. Velický B., Kirkpatrick S., Ehrenreich H. *Phys. Rev.*, 1968, 175, p.747.
13. Jezierski A. *Acta Phys. Pol.*, 1977, A51, p.839.
14. Kolley E., Kolley W. *JINR*, E17-11771, Dubna, 1978.
15. Kolley E., Kolley W. *phys. stat. sol. (b)*, 1977, 81, p.735.
16. Kolley E., Kolley W. *phys. stat. sol. (b)*, 1978, 86, p.397.
17. Бабанов Ю.А. и др. *ФММ*, 1973, 35, с.1123; *ФММ*, 1973, 35, с.1132.
18. Kanamori J. *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 1963, 30, p.275.
19. Hirooka S., Shimizu M. *J.Phys. Soc. Jap.*, 1977, 43, p.70.
20. Hirooka S., Shimizu M. *J.Phys. Soc. Jap.*, 1977, 43, p.477.
21. Edwards D.M., Fisher B. *J.Physique*, 1971, 32, C1-697.
22. Velický B. *Phys.Rev.*, 1969, 184, p.614.
23. Abito G.F., Schweitzer J.W. *Phys.Rev.*, 1975, B11, p.37.
24. Kim D.J., Schwartz B.B. *Phys. Rev.*, 1977, B15, p.377.
25. Jezierski A. *Acta Phys. Pol.*, 1977, A52, p.413.

Received by Publishing Department  
on September 19 1978.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.  
Заказ 25536. Тираж 410. Уч.-изд. листов 0,95.  
Редактор Э.В.Ивашевич. Подписано к печати 26.10.76 г.  
Корректор Т.Е.Жильцова.

ФТТ

А К А Д Е М И Я   Н А У К   С С С Р

# ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

ТОМ

21

1979

*ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК*



«НАУКА»  
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

## СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ И ИХ УСТОЙЧИВОСТЬ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

*В. Коллей, Е. Коллей, А. Л. Куземский*

На основе микроскопической теории Ферми-жидкости при нулевой температуре вычислена энергия длинноволновых спиновых волн в ферромагнитных сплавах переходных металлов. В когерентном горизонтальном лестничном приближении для модели Хаббарда со случайными параметрами проведено самосогласованное вычисление ренормировки коэффициента спин-волновой жесткости  $D$  за счет электрон-электронных корреляций. Коэффициент  $D$  получен численным образом и используется для определения устойчивости ферромагнитного состояния. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов для сплавов на основе Ni.

В зонной теории ферромагнетизма коэффициент жесткости  $D$  характеризует длинноволновые спиновые волны типа  $\omega_q = Dq^2$  ниже щели Стонера в спектре возбуждений частица—дырка. Данные по  $D$ , полученные из неупругого рассеяния нейтронов для чистого Ni [1] и сплавов на основе Ni (см., например, [2–5]), можно описать в рамках зонной модели ферромагнетизма. Подход, наиболее часто применяемый [6–10] для вычисления  $D$  для сплавов в рамках модели Хаббарда [11] со случайными параметрами, основан на приближении хаотических фаз (RPA), в котором электрон-электронное взаимодействие учитывается в приближении Хартри—Фока (HF), а разупорядочение — в приближении когерентного потенциала (CPA) [12]. Схема расщепления в RPA приведена в работе [13]. Помимо вычисления  $D$  в рамках CPA, имеются также расчеты для сплавов в модели «жесткой зоны» (см. [5, 10]).

Для учета эффектов корреляции электронов при вычислении  $D$  в [14] была предложена схема, выходящая за рамки RPA и основанная на когерентном лестничном приближении (CLA) [15, 16], т. е. на самосогласованной комбинации CPA и локального лестничного приближения [17] в канале частица—частица. Такое  $T$ -матричное приближение удобно использовать для сильных короткодействующих взаимодействий и малой плотности носителей, так что его можно применить к Ni, Pd и Pt. Если зависящую от энергии  $T$ -матрицу заменить эффективным взаимодействием типа Канамори [18], как это делалось, например, при вычислении парамагнитной восприимчивости [19] и магнитострикции [20], то снова приходим к теории спиновых волн в рамках RPA—CPA.

В настоящей статье, исходя из однозонной модели Хаббарда со случайными параметрами, мы найдем коэффициент  $D$  для неупорядоченных сплавов при нулевой температуре в рамках микроскопического Ферми-жидкостного подхода. Корреляционные эффекты вычисляются с сохранением энергетической зависимости  $T$ -матрицы. Численные результаты CLA по  $D$  сравниваются с экспериментальными данными для сплавов NiFe и NiPd. Кроме того, рассмотрена стабильность ферромагнетизма в рамках решений RPA—CPA.

# 1. Коэффициент жесткости с учетом электрон-электронных корреляций

Для описания ферромагнетизма в узкозонных сплавах  $A_c B_{1-c}$  достаточно воспользоваться гамильтонианом Хаббарда [11] со случайными параметрами

$$H^{\{v\}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i \neq j} \varepsilon_{ij}^v n_{i\sigma} + \sum_i U_i^v n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  ( $n_{i\sigma}$ ) — оператор чисел заполнения для состояний Блоха (Ванье) со спином  $\sigma$ , а  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  — зонная энергия, которая предполагается независимой от заданной конфигурации  $\{v\}$  сплава. Одночастичный потенциал  $\varepsilon_i^v$  и затравочное внутриатомное кулоновское взаимодействие  $U_i^v$  принимают случайные значения  $\varepsilon^v$  и  $U^v$  ( $v=A, B$ ) в зависимости от того, заполнен ли узел  $i$  атомом А или В.

Энергию спиновых волн  $\omega_q = Dq^2$  для кубических кристаллов можно определить по полюсу поперечной восприимчивости  $\chi^{+-}(q, \omega)$ , что приводит к следующему выражению для коэффициента жесткости

$$D = - \frac{1}{2 \langle \langle S_i^z \rangle \rangle_c} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \left[ \frac{\omega^2}{q^2} \left( \chi^{+-}(q, \omega) + \frac{2 \langle \langle S_i^z \rangle \rangle_c}{\omega} \right) \right], \quad (2)$$

где  $2 \langle \langle S_i^z \rangle \rangle_c = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$  — намагниченность на узел ( $n_{\sigma}$  — среднее число электронов на узел),  $\langle \dots \rangle_{\{v\}}$  — среднее по основному состоянию при заданной конфигурации  $\{v\}$ , а  $\langle \dots \rangle_c$  — среднее по конфигурациям. В работах [7, 10, 13] для сплавов была использована другая формула

$$D = \frac{1}{2 \langle \langle S_i^z \rangle \rangle_c} \left[ \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \langle \langle [S_{\mathbf{q}}^+, qJ_{-\mathbf{q}}^-] \rangle \rangle_c - \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{J^+}^{+-}(q, \omega) \right], \quad (3)$$

записанная в терминах функции отклика  $\chi_{J^+}^{+-}(q, \omega)$  для спинового тока (ср. [21]). В случае модели (1) Фурье-образы оператора плотности поперечного спина  $S_{\mathbf{q}}^+$  (или  $S_{\mathbf{q}}^- = (S_{\mathbf{q}}^+)^+$ ) и оператора тока  $J_{\mathbf{q}}^+$  (или  $J_{-\mathbf{q}}^- = (J_{\mathbf{q}}^+)^+$ ), которые здесь не зависят от случайных параметров, имеют вид

$$\left. \begin{aligned} S_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \\ qJ_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где  $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$  ( $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии  $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ ,  $N$  — число узлов решетки.

Восприимчивости, входящие в формулы (2), (3), могут быть выражены (ср. [14]) с помощью (4) через причинные функции Грина при нулевой температуре следующим образом

$$\begin{aligned} \chi^{+-}(q, \omega) &= - \langle \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega} \rangle_c = \\ &= \frac{i}{N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \Delta_{0\uparrow\downarrow}^{\{v\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) G_{\downarrow}^{\{v\}}(E + \omega) \lambda_0(-\mathbf{q}) G_{\uparrow}^{\{v\}}(E) \} \rangle_c, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} q^2 \chi_{J^+}^{+-}(q, \omega) &= - \langle \langle \langle qJ_{\mathbf{q}}^+, qJ_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega} \rangle_c = \\ &= - \frac{i}{N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \Delta_{1\uparrow\downarrow}^{\{v\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) G_{\downarrow}^{\{v\}}(E + \omega) \lambda_1(-\mathbf{q}) G_{\uparrow}^{\{v\}}(E) \} \rangle_c, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha ij\uparrow\downarrow}^{\{v\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) &= \lambda_{\alpha ij}(\mathbf{q}) - \delta_{ij} \times \\ &\times \int \frac{d\bar{E}}{2\pi} i I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{v\}}(E, \bar{E} + \omega; \omega) \sum_{mn} G_{im\uparrow}^{\{v\}}(\bar{E}) \Delta_{amn\uparrow\downarrow}^{\{v\}}(\bar{E}, \bar{E} + \omega; \mathbf{q}) \times \\ &\times G_{ni\downarrow}^{\{v\}}(\bar{E} + \omega), \quad (\alpha = 0, 1); \end{aligned} \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{0ij}(\mathbf{q}) &= e^{-i\mathbf{qR}_i} \delta_{ij}, \quad \lambda_{1ij}(\mathbf{q}) = t_{ij} (e^{-i\mathbf{qR}_i} - e^{-i\mathbf{qR}_j}), \\ t_{ij} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Здесь предполагалась локальность только неприводимой вершины частица—дырка  $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \bar{E} + \omega; \omega) \equiv I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \bar{E} + \omega; E + \omega, \bar{E})$ , а  $\text{tr}$  означает суммирование (без спина) по одночастичным состояниям. Как видно, формула (3) более удобна для вычислений, чем (2), так как уравнение типа Бете—Солпитера (7) для  $\alpha = 1$  можно решить без привлечения дальнейших предположений относительно  $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}$ . Разложение  $\lambda_1$  и эффективного тока  $\Lambda_1^{\{\nu\}}$  с переворотом спина, входящих в (6) и (7), в первом порядке по  $\mathbf{q}$  и учет кубической симметрии приводят к формулам

$$\chi_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ \Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega) G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E + \omega) j G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{1i\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega) &= \mathbf{j}_{ij} - \delta_{ij} \int \frac{d\bar{E}}{2\pi} i I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \bar{E} + \omega; \omega) \times \\ &\times \sum_{mn} G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}) \Lambda_{1mn\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E}, \bar{E} + \omega) G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\bar{E} + \omega), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\mathbf{j}_{ij} = -it_{ij}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j),$$

где введены обозначения  $\lambda_1(\mathbf{q}) = \mathbf{qj}$  и  $\Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) = \mathbf{q} \Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega)$ . Под знаком шпура  $\mathbf{j}$  и  $\Lambda_1^{\{\nu\}}$  образуют скалярное произведение.

Отделяя диагональные и недиагональные части  $\Lambda_1^{\{\nu\}}$  в (9) и (10), получаем

$$\chi_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \text{tr} \{ j G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E + \omega) j G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \} \rangle_c + \bar{\chi}_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega), \quad (11)$$

где

$$\bar{\chi}_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \left\langle \sum_i \Lambda_{1ii\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega) K_{ii\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E + \omega, E) \right\rangle_c, \quad (12)$$

$$\mathbf{K}_{ii\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E + \omega, E) = \sum_{mn} G_{im\downarrow}^{\{\nu\}}(E + \omega) \mathbf{j}_{mn} G_{ni\uparrow}^{\{\nu\}}(E). \quad (13)$$

Поскольку конфигурационное усреднение в (12) выходит за рамки СРА, мы воспользуемся приближением [14]  $\langle \Lambda_1^{\{\nu\}} \mathbf{K}^{\{\nu\}} \rangle_c = \langle \Lambda_1^{\{\nu\}} \rangle_c \langle \mathbf{K}^{\{\nu\}} \rangle_c$ , так что

$$\mathbf{K}_{\downarrow\uparrow}(E + \omega, E) = \langle G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E + \omega) j G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E) \rangle_{cii} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_{\mathbf{k}\downarrow}(E + \omega) \mathcal{S}_{\mathbf{k}\uparrow}(E) \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} = 0 \quad (14)$$

и  $\bar{\chi}_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega) = 0$  (т. е. нет вершинных поправок) благодаря симметрии относительно обращения времени. Здесь  $\mathcal{S}_{\mathbf{k}\sigma}$  — когерентная одночастичная функция Грина с учетом электрон-электронных корреляций (см. ниже). Таким образом, на основе СРА получается формула

$$\chi_{J^{\pm}}(\mathbf{q} = 0, \omega) = \frac{i}{3N} \int \frac{dE}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_{\mathbf{k}\downarrow}(E + \omega) \mathcal{S}_{\mathbf{k}\uparrow}(E) (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2. \quad (15)$$

Подставляя (15) и предел

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \langle \langle [S_{\mathbf{q},q}^+ J_{-\mathbf{q}}^-] \rangle^{\{\nu\}} \rangle_c = \frac{1}{6N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle^{\{\nu\}} \rangle_c \nabla_{\mathbf{k}}^2 \varepsilon_{\mathbf{k}} \quad (16)$$

в формулу (3) и переходя от причинной к запаздывающей («r») функции Грина, приходим к результату

$$D = \frac{1}{6\pi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})} \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{S}_{\mathbf{k}\uparrow}^r(E) - \mathcal{S}_{\mathbf{k}\downarrow}^r(E))^2 (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (17)$$

где  $\mu$  — энергия Ферми. Это выражение формально совпадает с тем, которое следует из РРА—СРА [6, 7, 10] на основе приближения HF.



В настоящем расчете, однако, для функции  $\mathcal{Z}_{\mathbf{k}\sigma}$  используется схема CLA [16]. Тогда корреляционная часть в терминах частично усредненных причинных функций имеет вид

$$\Sigma_{U_{ii\sigma}}^{\nu}(E) = \int \frac{d\bar{E}}{2\pi i} G_{ii-\sigma}^{\nu}(\bar{E}) T_i^{\nu}(E + \bar{E}), \quad (\nu = A, B) \quad (18)$$

$$T_i^{\nu}(E) = \left[ \frac{1}{U_i^{\nu}} + \int \frac{d\bar{E}}{2\pi i} G_{ii\sigma}^{\nu}(\bar{E}) G_{ii-\sigma}^{\nu}(E - \bar{E}) \right]^{-1}, \quad (19)$$

где  $T_i^{\nu}$  — эффективная двухчастичная вершина. Локальная функция Грина  $G_{ii\sigma}^{\nu}(z)$ , записанная в виде резольвенты (здесь  $z$  — комплексная энергия) перенормируется следующим образом

$$G_{ii\sigma}^{\nu}(z) = \frac{F_{\sigma}(z)}{1 - (\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z) - \Sigma_{\sigma}(z)) F_{\sigma}(z)}, \quad (20)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z) = \varepsilon_i^{\nu} + \Sigma_{U_{ii\sigma}}^{\nu}(z), \quad (21)$$

$$F_{\sigma}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{Z}_{\mathbf{k}\sigma}(z), \quad (22)$$

$$\mathcal{Z}_{\mathbf{k}\sigma}(z) = (z - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(z))^{-1}, \quad (23)$$

$$\Sigma_{\sigma}(z) = c\tilde{\varepsilon}_{\sigma}^A(z) + (1 - c)\tilde{\varepsilon}_{\sigma}^B(z) - [\tilde{\varepsilon}_{\sigma}^A(z) - \Sigma_{\sigma}(z)] F_{\sigma}(z) [\tilde{\varepsilon}_{\sigma}^B(z) - \Sigma_{\sigma}(z)], \quad (24)$$

$$n = \sum_{\sigma} n_{\sigma} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\mu} dE \operatorname{Im} F_{\sigma}^r(E). \quad (25)$$

Здесь  $\Sigma_{\sigma}$  — когерентный потенциал,  $n$  — среднее число электронов на узел. В отличие от обычного СРА [12] атомный потенциал  $\tilde{\varepsilon}_{i\sigma}^{\nu}(z)$  (в (24) индекс  $i$  опущен) приобретает энергетическую зависимость благодаря массовому оператору  $\Sigma_{U_{ii\sigma}}^{\nu}(z)$  за счет корреляций. В приближении HF решение систем уравнений (20)–(25) упрощается, так как вместо (18) и (19) используется собственная энергия  $\Sigma_{U_{ii\sigma}}^{\nu HF} = U_i^2 n_{i-\sigma}^{\nu}$ , где  $n_{i\sigma}^{\nu}$  — среднее число электронов со спином  $\sigma$  на узлах  $\nu$ , определяемое формулой

$$n_{i\sigma}^{\nu} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} dE \operatorname{Im} G_{ii\sigma}^{\nu r}(E). \quad (26)$$

С учетом конкретной вершины  $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \bar{E} + \omega; \omega) = -T_i^{\{\nu\}}(E + \bar{E} + \omega)$  и заменой  $\nu \rightarrow \{\nu\}$  мы находим из уравнений (7), (18) и (19) соотношение типа Уорда—Такахаша

$$\omega \Lambda_{0i\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) \delta_{ij} - \Lambda_{1ij\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E + \omega; \mathbf{q}) = e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} G_{ij\downarrow}^{\{\nu\}-1}(E + \omega) - G_{ij\uparrow}^{\{\nu\}-1}(E) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad (27)$$

причем

$$(G^{\{\nu\}-1}(E))_{ij\sigma} = (E - \varepsilon_i^{\nu}) \delta_{ij} - t_{ij} - \Sigma_{U_{ii\sigma}}^{\{\nu\}}(E) \delta_{ij}. \quad (28)$$

Условие устойчивости основного состояния ферромагнетика относительно спин-волновых возбуждений

$$\hat{D} = D(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) > 0 \quad (29)$$

можно получить из спектрального представления

$$\chi^{+-r}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{sign} \omega'}{\omega - \omega' + i\varepsilon} \hat{I}_{S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^-}(\omega'), \quad (30)$$

где спектральная интенсивность  $\hat{I}_{S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^-}(\omega) \geq 0$  относится к конфигурационно-усредненной системе. Магنونный полюс

$$\chi_p^{+-r}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{\omega - Dq^2 + i\varepsilon} \quad (31)$$

для малых  $q$  и  $\omega$  может быть выделен из континуума Стонера, поскольку спектральный вес возбуждений пар частица—дырка стремится к нулю при  $q \rightarrow 0$ . Сравнение (30) и (31) приводит к критерию (29). В данном приближении спин-волновое затухание  $\gamma_q$  (вместо  $\varepsilon \rightarrow 0$  в (31)) принимает вид

$$\gamma_q = \frac{q^2}{n_\uparrow - n_\downarrow} \text{Im} \chi_J^{+-r}(0, Dq^2) = \frac{Dq^4}{3\pi(n_\uparrow - n_\downarrow)N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} \mathcal{S}_{\mathbf{k}\uparrow}^r(\mu) \text{Im} \mathcal{S}_{\mathbf{k}\downarrow}^r(\mu) (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (32)$$

как и в RPA—CPA [8], однако здесь учитывается электрон-электронное рассеяние.

## 2. Результаты численных расчетов и обсуждение

Для проведения части расчета  $D$  в аналитической форме мы воспользовались упрощенными выражениями [22]

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\pi w} \left[ 1 - \left( \frac{E}{w} \right)^2 \right]^{1/2} \theta(w - |E|), \quad (33)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 = \frac{2v_m^2}{\pi w} \left[ 1 - \left( \frac{E}{w} \right)^2 \right]^{3/2} \theta(w - |E|), \quad (34)$$

где  $w$  — полуширина зоны,  $v_m$  — величина порядка  $wa$ ,  $a$  — параметр решетки. Суммирование по  $\mathbf{k}$  в (22) приводит с учетом невозмущенной плотности состояний (33) к функции Грина

$$F_\sigma(z) = \frac{2}{w} (z_\sigma - i\sqrt{1 - z_\sigma^2}), \quad z_\sigma = \frac{z - \Sigma_\sigma(z)}{w}. \quad (35)$$

Чтобы сделать (35) однозначным, мы выбрали ту ветвь в плоскости  $z_\sigma$  с разрезом вдоль действительной оси от  $-1$  до  $+1$ , где квадратный корень положителен на верхнем берегу разреза.

Переписывая (17) в виде

$$D = \frac{1}{6\pi(n_\uparrow - n_\downarrow)} \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} dE [\Pi_{\uparrow\uparrow}^{rr}(E) + \Pi_{\downarrow\downarrow}^{rr}(E) - \Pi_{\uparrow\downarrow}^{rr}(E)], \quad (36)$$

где введены обозначения  $\Pi_{\sigma\sigma'}^{rr}(E) \equiv \Pi_{\sigma\sigma'}(E^+, E^+)$ ,  $E^+ = E + i0$  и

$$\Pi_{\sigma\sigma'}(z, z') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_{\mathbf{k}\sigma}(z) \mathcal{S}_{\mathbf{k}\sigma'}(z') (\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (37)$$

затем применяя теорему о вычетах при суммировании по  $\mathbf{k}$  в (37) с учетом аппроксимации (34), найдем

$$\Pi_{\sigma\sigma}^{rr} = \frac{2v_m^2}{w^2} \left( 3z_\sigma^2 - \frac{3}{2} - 3iz_\sigma \sqrt{1 - z_\sigma^2} \right) \quad z_\sigma = \frac{E^+ - \Sigma_\sigma(E^+)}{w}, \quad (38)$$

$$\Pi_{\uparrow\downarrow}^{rr} = \frac{2v_m^2}{w^2} \left( z_\uparrow^2 + z_\downarrow^2 + z_\uparrow z_\downarrow - \frac{3}{2} + i \frac{(1 - z_\uparrow^2)^{3/2} - (1 - z_\downarrow^2)^{3/2}}{z_\uparrow - z_\downarrow} \right). \quad (39)$$

Следовательно,

$$D = \frac{v_m^2}{3\pi w^2 (n_\uparrow - n_\downarrow)} \text{Im} \int_0^{\mu} dE \left[ (z_\uparrow - z_\downarrow)^2 - i \sqrt{1 - z_\uparrow^2} \left( 3z_\uparrow + \frac{z(1 - z_\uparrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow} \right) - i \sqrt{1 - z_\downarrow^2} \left( 3z_\downarrow - \frac{2(1 - z_\downarrow^2)}{z_\uparrow - z_\downarrow} \right) \right]. \quad (40)$$

Скалярная статическая электропроводность  $\sigma$  вычисляется в том же приближении, что и  $D$ . В результате приходим к модифицированной формуле Кубо—Гринвуда

$$\sigma = \frac{e^2 N}{6\pi V} \sum_{\sigma} [\Pi_{\sigma\sigma}^{ra}(\mu) - \text{Re} \Pi_{\sigma\sigma}^{rr}(\mu)] \equiv \sum_{\sigma} \sigma_{\sigma}, \quad (41)$$

которая содержит функции Грина, перенормированные за счет электронных корреляций в рамках CLA. Здесь  $\Pi_{\sigma\sigma}^{ra}(\mu) \equiv \Pi_{\sigma\sigma}(\mu^+, \mu^-)$ ,  $\mu^- = \mu - i0$ ,

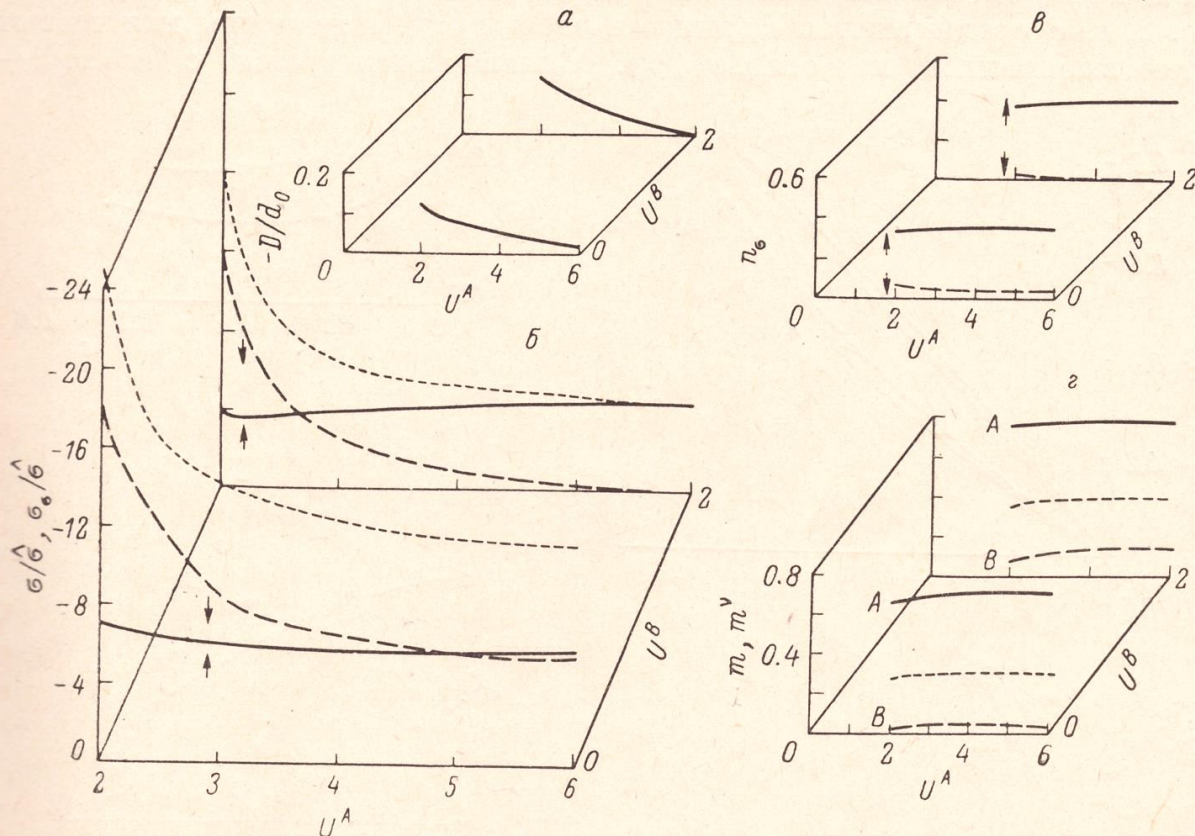


Рис. 1.

$a$  — коэффициент спин-волновой жесткости  $D < 0$  (нестабильный случай);  $б$  — статические электропроводности  $\sigma_A, \sigma_B$ ;  $в$  — плотности электронов  $n_A, n_B$ ;  $г$  — намагниченности  $m^A, m^B$  в зависимости от  $U^A$  ( $v = A, B$ ); приближение Хартри—Фока; параметры  $(w, \epsilon^A, \epsilon^B, c, n) = (1, -0.8, 0, 0.4, 0.4)$ .

$V$  — объем системы,  $e$  — единичный заряд. Вводя (38) и (39) с заменой  $\Pi_{\sigma\sigma}^{ra} = \Pi_{\uparrow\downarrow}^{rr} [z_{\uparrow} \rightarrow \hat{z}_{\sigma}, z_{\downarrow} \rightarrow \hat{z}_{\sigma}^*]$  в формулу (41), мы получим зависящую от спина электропроводность (при  $\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+) < 0$ )

$$\sigma_{\sigma} = \delta\pi \left[ \frac{2 (\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+))^2}{w^2} + \frac{w}{\text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+)} \text{Re} \left\{ i \sqrt{1 - \hat{z}_{\sigma}^2} \left( i (1 - \hat{z}_{\sigma}^2) + \frac{3}{w} \hat{z}_{\sigma} \text{Im} \Sigma_{\sigma}(\mu^+) \right) \right\} \right], \quad (42)$$

где

$$\hat{z}_{\sigma} = \frac{\mu^+ - \Sigma_{\sigma}(\mu^+)}{w}, \quad \delta = \frac{e^2 v_m^2 N}{3\pi^2 V}. \quad (43)$$

Численный анализ проводится следующим образом: сначала выбираются параметры  $w, \epsilon^A, \epsilon^B = 0, U^A, U^B, c, n$ ; затем решается самосогласованная система уравнений (18)—(25) с функцией Грина (35). Полученные результаты используются для нахождения  $D$  по формуле (40).

На рис. 1 показана переходная область между слабым и сильным ферромагнетизмом в зависимости от внутриатомного отталкивания  $U^A$ , рассматриваемого здесь в приближении HF. В частности, в работе [23] были исследованы решения с параметрами  $U^A = 2, U^B = 0$  и  $U^A = 2, U^B = 2$ , но спиновые волны не рассматривались. Расчеты коэффициента жесткости  $D$  (в единицах  $d_0 = \frac{1}{9} w a^2$ ) в RPA—CPA (рис. 1,  $a$ ) указывают на нестабильность ферромагнитного состояния относительно возбуждения

спиновых волн. Парциальные и полная средние намагниченности  $m^y = n_{\uparrow}^y - n_{\downarrow}^y$  и  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  изображены на рис. 1, г. На рис. 2 намечена ограниченная область стабильного (в основном насыщенного) ферромагнетизма ( $D > 0$  (рис. 2, б),  $m^y > 0$  (рис. 2, а)), рассчитанная в хартри-фоковском приближении в зависимости от плотности электронов  $n$ . Нуль  $D$  при наименьшем значении  $n$  соответствует приблизительно критерию Стонера [16], тогда как другой нуль говорит об изменении типа магнитного порядка.

Расчеты для сплавов NiPd были проведены в СЛА, и эти результаты (рис. 2, в, г) сравниваются с данными работы [24]. Параметры для чистых систем выбирались на основе [20]. Сплав формируется с  $n = cn^{\text{Pd}} +$

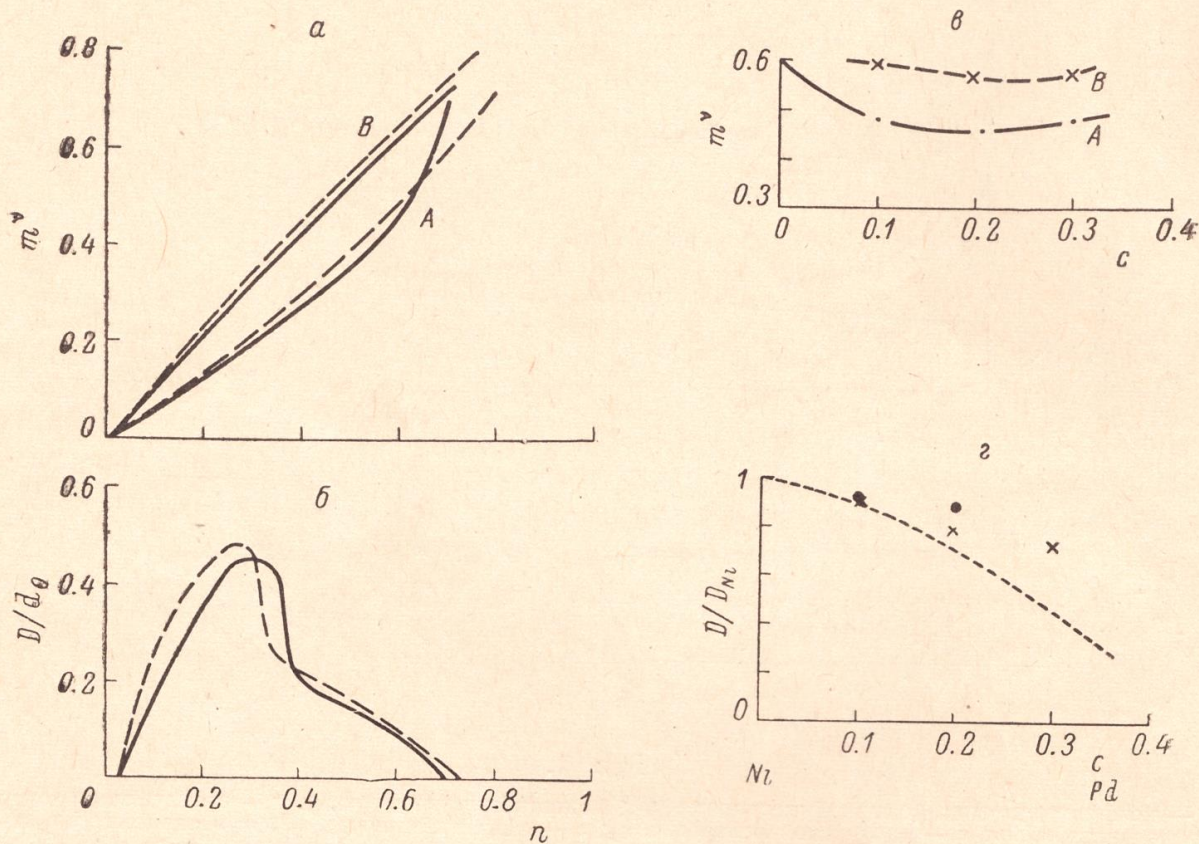


Рис. 2.

а — парциальная намагниченность  $m^y$ , б — коэффициент жесткости  $D$ , в — парциальная намагниченность  $m^y$ , г — спиноволновая жесткость  $D(x)$ .  
Графики в и г относятся к случаю сплава  $\text{Pd}_c\text{Ni}_{1-c}$ ; зависимость от  $c$  рассчитана в когерентном лестничном приближении.  $(2w)^{\text{Pd}}, (2w)^{\text{Ni}}, \epsilon^{\text{Pd}} - \epsilon^{\text{Ni}}, U^{\text{Pd}}, U^{\text{Ni}} = (6.05, 4.15, 0.3, 9.17, 14.11)$  эВ,  $n^{\text{Pd}} = 0.4, n^{\text{Ni}} = 0.6$ . На г штриховые кривые — расчет [24], пунктир — эксперимент (ср. [24]).

$+(1-c)n^{\text{Ni}}$ , а различные интегралы перескока учитываются через ширину зоны

$$2w = c(2w)^{\text{Pd}} + (1-c)(2w)^{\text{Ni}}.$$

Заметим, что в приведенных единицах величины  $U^{\text{Pd}}, U^{\text{Ni}}, \epsilon^{\text{Pd}} - \epsilon^{\text{Ni}}$  для всех  $c$  приводятся к шкале  $2w=1$ . Затравочные  $U^y$  перенормируются самоогласованным образом, в результате чего имеем двухчастичные вершины  $T_i^y(E + \bar{E})$ . Расчеты величин  $\Gamma^y = T_i^y(2\mu)$  и  $\Gamma = c\Gamma^A + (1-c)\Gamma^B$  в приведенных единицах можно найти в [25]. В той же работе [25] для случая сплавов NiFe дано сравнение расчетов  $D(x)$  на основе СЛА с результатами, полученными в рамках RPA—CPA [7, 9] теории «жесткой зоны» [10], а также с данными по неупругому рассеянию нейтронов [1-3]. Коэффициент жесткости для чистого никеля оказывается близким к величине  $D_{\text{Ni}} = 555 \text{ мэВ } \text{Å}^2$ , измеренной при 4.2 К [1].

Проведенный анализ показывает, что степень жесткости магнонной подсистемы сплава довольно чувствительно зависит от того, как мы учитываем межэлектронную корреляцию.

Численные результаты, полученные в рамках СЛА, указывают на влияние электрон-электронных корреляций на энергию магнонов в длин-

новолновом пределе  $\omega_q = Dq^2$ . Несмотря на однозонное приближение в модели Хаббарда с упрощенной структурой зоны и диагональным беспорядком, для сплавов на основе Ni получены физически разумные значения  $D$ . Для зависящих от энергии двухчастичных вершин предполагается локальность, что позволяет сохранить одноузельный характер СРА. Спин-волновое затухание оказывается малым, по крайней мере порядка  $q^4$ . Таким образом, в работе предложен самосогласованный метод для нахождения стабильного ферромагнетизма в сплавах переходных металлов.

Авторы благодарны Н. М. Плакиде за чтение рукописи и полезные советы.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] H. A. Mook, J. W. Lynn, R. M. Nicklow. Phys. Rev. Lett., 30, 556, 1973.
- [2] M. Hennion, B. Hennion, A. Castets, D. Tocchetti. Sol. St. Commun., 17, 899, 1975.
- [3] K. Mikke, J. Jankowska, A. Modrzejewski. J. Phys. F, 6, 631, 1976.
- [4] M. Hennion, B. Hennion. J. Phys. F, 8, 287, 1978.
- [5] B. Hennion, M. Hennion. Preprint PSRM, 1510, CEN. Saclay, 1978.
- [6] H. Fukuyama. AIP Conf. Proc., 10, 1127, 1973.
- [7] D. J. Hill, D. M. Edwards. J. Phys. F, 3, L162, 1973.
- [8] H. Fukuyama. J. Physique, 35, C4-141, 1974.
- [9] R. Riedinger, M. Nauciel-Bloch. J. Phys. F, 5, 732, 1975.
- [10] D. M. Edwards, D. J. Hill. J. Phys. F, 6, 607, 1976.
- [11] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., A276, 238, 1963.
- [12] B. Velický, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich. Phys. Rev., 175, 747, 1968.
- [13] A. Jezierski. Acta Phys. Pol., A51, 839, 1977.
- [14] E. Kolley, W. Kolley. Commun. JINR, E17-11771, Dubna, 1978.
- [15] E. Kolley, W. Kolley. Phys. St. Sol. (b), 81, 735, 1977.
- [16] E. Kolley, W. Kolley. Phys. St. Sol. (b), 86, 397, 1978.
- [17] Ю. А. Бабанов, В. Е. Найш, О. Б. Соколов, В. К. Финашкин. ФММ, 35, 1123, 1973; ФММ, 35, 1132, 1973.
- [18] J. Kanamori. Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 30, 275, 1963.
- [19] S. Hirooka, M. Shimizu. J. Phys. Soc. Japan, 43, 70, 1977.
- [20] S. Hirooka, M. Shimizu. J. Phys. Soc. Japan, 43, 477, 1977.
- [21] D. M. Edwards, B. Fisher. J. Physique, 32, C1-697, 1971.
- [22] B. Velický. Phys. Rev., 184, 614, 1969.
- [23] G. F. Abito, J. W. Schweitzer. Phys. Rev. B, 11, 37, 1975.
- [24] A. Jezierski. Acta Phys. Pol., A52, 413, 1977.
- [25] E. Kolley, W. Kolley, A. L. Kuzemsky. Preprint JINR, E17-11899, Dubna, 1978.

Поступило в Редакцию  
6 октября 1978 г.  
В окончательной редакции  
11 июня 1979 г.