ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 235 (2024). С. 78–86
DOI: 10.36535/2782-4438-2024-235-78-86

УДК 51–72, 511.331.1, 537.611.44

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ И ХИМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

© 2024 г. **Н. Б. МЕЛЬНИКОВ, Б. И. РЕЗЕР**

Аннотация. Получены явные выражения коэффициентов в законе T^2 для магнитного момента и химического потенциала в теории Стонера для случая произвольной плотности электронных состояний. Дано обобщение критерия ферромагнтизма Стонера в терминах спин-поляризованных плотностей электронных состояний. В основе доказательства лежит асимптотическое разложение интеграла с функцией Ферми, которое ранее использовалось для свободных электронов.

Ключевые слова: намагниченность, температурная зависимость, ферромагнитные металлы, интеграл Ферми, разложение Зоммерфельда, дзета-функция Римана.

ASYMPTOTIC FORMULAS FOR MAGNETIZATION AND CHEMICAL POTENTIAL OF FERROMAGNETIC METALS AT LOW TEMPERATURES

© 2024 **N. B. MELNIKOV, B. I. RESER**

Abstract. Explicit expressions for the coefficients in the T^2-law for the magnetic moment and chemical potential in Stoner's theory are obtained in the case of an arbitrary electron density of states. A generalization of Stoner's ferromagnetism criterion is given in terms of spin-polarized electron densities of states. The proof is based on the asymptotic expansion of the integral with the Fermi function, which was previously used for free electrons.

Keywords and phrases: magnetization, temperature dependence, ferromagnetic metals, Fermi integral, Sommerfeld expansion, Riemann zeta function.

AMS Subject Classification: 41A60, 82D40

1. Введение. Описание температурной зависимости намагниченности в ферромагнитных металлах и сплавах остается открытой проблемой (см., напр., [3]). При низких температурах основной вклад в намагниченность дают спиновые флуктуации (закон $T^{3/2}$) и стонеровские возбуждения (закон T^2). Анализ экспериментальной кривой намагниченности в железе показывает, что закон $T^{3/2}$ выполняется лишь на небольшом интервале низких температур, при более высоких температурах кривая намагниченности хорошо аппроксимируется законом T^2, но точку перехода указать довольно сложно [4]. Явное выражение для коэффициента в законе $T^{3/2}$ для магнетиков с коллективизированными электронами было получено сначала для свободных электронов

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Электрон», номер госрегистрации 122021000039–4).

в рамках приближения случайных фаз [8], а затем для ферромагнитных металлов и сплавов в рамках динамической теории спиновых флуктуаций (ДСФТ) [4, 9] [1].

Закон T^2 был выведен Стонером в рамках теории среднего поля для свободных электронов с плотностью электронных состояний (ПЭС), пропорциональной $\sqrt{\varepsilon}$ [12]. Явный вид коэффициента при T^2 был получен в двух предельных случаях: сильных и слабых ферромагнетиков. В этих же предельных случаях явный вид коэффициента при T^2 был получен Томпсоном и др. [13] для электронов с произвольной ПЭС. Однако многие ферромагнитные металлы и сплавы не описываются ни одним из этих предельных случаев.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы обосновать закон T^2 для электронов с *произвольной* ПЭС и получить выражение для коэффициента при T^2 в общем случае. Для вывода низкотемпературного разложения для намагниченности и химического потенциала в теории Стонера мы используем асимптотическую формулу для интеграла с функцией Ферми, называемую разложением Зоммерфельда [11] (методы численных расчетов таких интегралов см. в [10]). Применение этой асимптотической формулы к *немагнитной* ПЭС, дает известное асимптотическое разложение химического потенциала *свободных электронов* (см., напр., [1, 7]). Мы применяем разложение Зоммерфельда для интегралов *спин-поляризованных* ПЭС с функцией Ферми.

Работа организована следующим образом. В разделе 2 приведены уравнения теории среднего поля Стонера. В разделе 3 дан краткий вывод разложения Зоммерфельда, введены необходимые понятия и обозначения. В разделе 4 разложение Зоммерфельда использовано для вывода асимптотического разложения химического потенциала *свободных электронов*. В разделе 5 получено асимптотическое разложение для намагниченности и химического потенциала в теории Стонера для электронов с *произвольной* ПЭС. Проведен анализ полученных результатов в двух предельных случаях: сильных и слабых ферромагнетиков. В Заключении коротко сформулированы основные результаты и указаны возможные приложения.

2. Уравнения теории Стонера. Магнитный момент в ферромагнитных металлах пропорционален среднему спину: $m_z = 2\mu_{\mathrm{B}}\bar{s}_z$, где μ_{B} — магнетон Бора. Теория среднего поля Стонера строится с помощью приближения Хартри—Фока в гамильтониане Хаббарда (см., напр., [9]). Средний спин в теории среднего поля Стонера получается из решения системы уравнений

$$\bar{s}_z = \frac{1}{2}\big(\bar{n}_\uparrow - \bar{n}_\downarrow\big), \quad \bar{n}_{\mathrm{e}} = \bar{n}_\uparrow + \bar{n}_\downarrow, \tag{1}$$

где среднее число электронов $\bar{n}_\sigma$ со спином $\sigma = \uparrow, \downarrow$ или ± 1 вычисляется по формуле

$$\bar{n}_\sigma = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \nu_\sigma(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{2}$$

Здесь $\nu_\sigma(\varepsilon) \equiv \nu(\varepsilon + \sigma U \bar{s}_z)$ — спин-поляризованная ПЭС, U — константа взаимодействия, $\nu(\varepsilon)$ — немагнитная ПЭС, а

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1} \tag{3}$$

— функция Ферми, зависящая от двух параметров: химического потенциала μ и температуры T (в энергетических единицах). Спин-поляризованные ПЭС в теории Стонера получаются жестким сдвигом немагнитной ПЭС $\nu(\varepsilon)$ в противоположных направлениях: $\nu_\uparrow(\varepsilon) \equiv \nu(\varepsilon + U\bar{s}_z)$ — сдвигом $\nu(\varepsilon)$ *влево* на $U\bar{s}_z$, а $\nu_\downarrow(\varepsilon) \equiv \nu(\varepsilon - U\bar{s}_z)$ — сдвигом $\nu(\varepsilon)$ *вправо* на $U\bar{s}_z$.

Предполагаем, что все величины нормированы на один атом и одну d-полосу, а немагнитная ПЭС нормирована на один атом, d-полосу и спин:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = 1. \tag{4}$$

[1] Для магнетиков с локализованными спинами закон $T^{3/2}$ был получен Блохом [6] (см., напр., [2]).

Средне число электронов $\bar{n}_{\mathrm{e}}$ не зависит от температуры и может быть вычислено по немагнитной ПЭС:

$$\bar{n}_{\mathrm{e}} = 2 \int\limits_{-\infty}^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{5}$$

Энергия ε_{F} называется *уровнем Ферми* и имеет смысл наибольшей энергии, на которой электронные состояния заполнены при $T = 0$. Значение $\mu(T = 0)$ равно ε_{F}. Значение $\bar{s}_z(T = 0)$ и константа взаимодействия U должны удовлетворять системе уравнений (1) при $T = 0$ для заданных $\nu(\varepsilon)$, ε_{F} и $\bar{n}_{\mathrm{e}}$.

Система уравнений (1) решается относительно двух неизвестных $\bar{s}_z$ и μ при каждом значении параметра $T > 0$. Входными данными являются немагнитная ПЭС $\nu(\varepsilon)$, константа взаимодействия U и уровень Ферми ε_{F} конкретного металла.

3. Асимптотика интеграла с функцией Ферми. Как видно из уравнений (1), нам необходимо получить асимптотическое разложение интегралов с функцией Ферми (2) при низких температурах. Ниже мы даем краткий вывод такого разложения в общем случае.

Теорема 1. *Пусть $g(\varepsilon)$ — произвольная гладкая функция, имеющая первообразную*

$$G(\varepsilon) \equiv \int\limits_{-\infty}^{\varepsilon} g(\varepsilon')\,\mathrm{d}\varepsilon',$$

которая растет при $\varepsilon \to \infty$ не быстрее некоторой степени ε. Тогда для интеграла с функцией Ферми (3) при $T \to 0$ справедливо разложение в ряд Тейлора

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = \sum_{m=0}^{\infty} 2(1 - 2^{1-2m})\zeta(2m) G^{(2m)}(\mu) T^{2m}, \tag{6}$$

где $\zeta(s)$ — дзета-функция Римана. В частности, ограничиваясь слагаемыми до четвертого порядка включительно, имеем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6} G''(\mu) T^2 + \frac{7\pi^4}{360} G^{(4)}(\mu) T^4 \ldots \tag{7}$$

Доказательство. Интегрируя по частям интеграл с функцией Ферми, получаем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = G(\varepsilon) f(\varepsilon)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{8}$$

Внеинтегральные члены в правой части выражения исчезают. Действительно, при $\varepsilon \to -\infty$ имеем $G(-\infty) = 0$ и $f(-\infty) = 1$. При $\varepsilon \to \infty$ функция $f(\varepsilon)$ убывает к нулю экспоненциально, а $G(\varepsilon)$ растет не быстрее некоторой степени. Следовательно, для доказательства формулы (6) необходимо получить разложение второго слагаемого в правой части (8) в ряд Тейлора по T в нуле:

$$-\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} T^n \frac{\partial^n}{\partial T^n} \int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathrm{d}\varepsilon \Big|_{T=0}. \tag{9}$$

Сначала исследуем первое слагаемое в правой части (9). При $T \to 0$ производная функции Ферми (3), взятая с обратным знаком, стремится к дельта-функции, сдвинутой на μ:

$$-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{T} \frac{\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^2} \to \delta(\varepsilon - \mu). \tag{10}$$

Действительно, при $T \to 0$ верно

$$-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{T}\frac{\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}+1)^2} \sim \begin{cases} \frac{1}{T}\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}, & \varepsilon < \mu, \\ \frac{1}{T}\mathrm{e}^{-(\varepsilon-\mu)/T}, & \varepsilon > \mu, \\ \frac{1}{T}, & \varepsilon = \mu. \end{cases} \tag{11}$$

Отсюда при $T \to 0$ имеем

$$-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{T}\frac{\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/T}+1)^2} \to \begin{cases} 0, & \varepsilon \neq \mu, \\ \infty, & \varepsilon = \mu. \end{cases}$$

Кроме того, используя $f(-\infty) = -1$ и $f(\infty) = 0$, имеем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon = 1.$$

Следовательно, выполнено (10). Тогда первое слагаемое в (9) принимает вид

$$-\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon\bigg|_{T=0} = G(\mu).$$

Далее, рассмотрим n-ю производную интеграла при $T = 0$ в левой части (9):

$$\frac{\partial^n}{\partial T^n}\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon\bigg|_{T=0}.$$

Делая замену переменной $x = (\varepsilon - \mu)/T$ в интеграле, получаем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon = \int\limits_{-\infty}^{\infty} G(Tx+\mu)\frac{\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x.$$

Дифференцирование дает

$$\frac{\partial^n}{\partial T^n}\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n G^{(n)}(Tx+\mu)\frac{\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x.$$

Возвращаясь к исходной переменной, получаем

$$\frac{\partial^n}{\partial T^n}\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon = \int\limits_{-\infty}^{\infty} G^{(n)}(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)\left(\frac{\varepsilon-\mu}{T}\right)^n \mathrm{d}\varepsilon. \tag{12}$$

Теперь покажем, что при $T \to 0$ справедливо

$$\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)\left(\frac{\varepsilon-\mu}{T}\right)^n \to \begin{cases} I_n\delta(\varepsilon-\mu), & n \text{ — четное}, \\ 0, & n \text{ — нечетное}. \end{cases} \tag{13}$$

Действительно, как видно из (11), степенной множитель в левой части (13) не меняет предела производной функции Ферми при $T \to 0$. Чтобы найти нормировочную константу I_n в (13), необходимо вычислить интеграл

$$I_n = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)\left(\frac{\varepsilon-\mu}{T}\right)^n \mathrm{d}\varepsilon.$$

Делая замену переменной $x = (\varepsilon - \mu)/T$ в интеграле, получаем

$$I_n = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^x x^n}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x.$$

Разбиваем этот интеграл на два:

$$I_n = \int_{-\infty}^{0} \frac{\mathrm{e}^x x^n}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^x x^n}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x.$$

Делая замену переменной $t = -x$ в первом интеграле, имеем

$$\int_{-\infty}^{0} \frac{\mathrm{e}^x x^n}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x = (-1)^n \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^t t^n}{(\mathrm{e}^t+1)^2}\,\mathrm{d}t.$$

Следовательно, для четных $n = 2m$ справедливо

$$I_{2m} = 2\int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^x x^{2m}}{(\mathrm{e}^x+1)^2}\,\mathrm{d}x,$$

а для нечетных $n = 2m-1$ интеграл равен нулю: $I_{2m-1} = 0$. Интегрируя по частям, находим

$$I_{2m} = 4m\int_{0}^{\infty} \frac{x^{2m-1}}{\mathrm{e}^x+1}\,\mathrm{d}x. \tag{14}$$

Как известно, интеграл (14) связан с дзета-функцией Римана

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}$$

соотношением (см., напр., [5])

$$\zeta(s) \equiv \frac{1}{\Gamma(s)}\int_{0}^{\infty} \frac{x^{s-1}}{\mathrm{e}^x-1}\,\mathrm{d}x, \quad s > 1, \tag{15}$$

где $\Gamma(s)$ — гамма-функция Эйлера. Используя свойства дзета- и гамма-функций:

$$\zeta(s) = \frac{1}{(1-2^{1-s})\Gamma(s)}\int_{0}^{\infty} \frac{x^{s-1}}{\mathrm{e}^x+1}\,\mathrm{d}x$$

и $\Gamma(n) = (n-1)!$, записываем интеграл (14) в виде

$$I_{2m} = 4m(1-2^{1-2m})(2m-1)!\zeta(2m) = 2(1-2^{1-2m})(2m)!\zeta(2m). \tag{16}$$

Значения $\zeta(2m)$ даются выражением (см., напр., [5])

$$\zeta(2m) = \frac{(2\pi)^{2m}}{2(2m)!}|B_{2m}|.$$

Здесь B_{2m} — $2m$-е число Бернулли, где числа Бернулли B_n определяются соотношением[1]

$$\frac{t}{e^t-1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{t^n}{n!}.$$

Наконец, подставляя (13) в (12), получаем

$$\frac{\partial^n}{\partial T^n}\int_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\mathrm{d}\varepsilon = \begin{cases} I_{2m}G^{(2m)}(\mu), & n = 2m, \\ 0, & n = 2m-1. \end{cases} \tag{17}$$

[1] В [1] использованы другие обозначения для чисел Бернулли (подробнее см. [14]).

С учетом (16) имеем

$$\frac{\partial^{2m}}{\partial T^{2m}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right) \mathrm{d}\varepsilon = 2(1 - 2^{1-2m})(2m)!\zeta(2m)G^{(2m)}(\mu). \tag{18}$$

Подставляя (17) и (18) в (9), получаем формулу (6). Ограничиваясь в (6) слагаемыми до четвертого порядка включительно, с учетом $\zeta(0) = -1/2$, $\zeta(2) = \pi^2/6$ и $\zeta(4) = \pi^4/90$ приходим к выражению (7). □

В дальнейшем в качестве $g(\varepsilon)$ используются ПЭС. В этом случае можно считать, что $g(\varepsilon)$ — гладкая функция, отличная от нуля лишь на конечном отрезке, поэтому условия теоремы 1 выполнены.

4. Асимптотика химического потенциала для свободных электронов. Для свободных электронов среднее число электронов (не зависящая от T величина) дается выражением

$$\bar{n}_{\mathrm{e}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}).$$

Заменяя суммирование по волновому вектору $\mathbf{k}$ интегрированием по энергии, имеем

$$\bar{n}_{\mathrm{e}} = 2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \nu(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon.$$

Асимптотическое разложение химического потенциала для свободных электронов, получается, если положить $g(\varepsilon) = \nu(\varepsilon)$ в теореме 1. Тогда согласно (7) имеем

$$\bar{n}_{\mathrm{e}}/2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \nu(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6} N''(\mu) T^2 + \ldots$$

где $N(\mu) = \int_{-\infty}^{\mu} \nu(\varepsilon')\,\mathrm{d}\varepsilon'$ — число электронных состояний с энергией, не превосходящей μ. При $T = 0$ выполнено $\bar{n}_{\mathrm{e}}/2 = N(\varepsilon_{\mathrm{F}})$. Отсюда следует

$$N(\varepsilon_{\mathrm{F}}) = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6} N''(\mu) T^2 + \ldots \tag{19}$$

Искомое разложение $\mu(T)$ в ряд Тейлора имеет вид

$$\mu(T) = \mu_0 + \mu_1 T + \mu_2 T^2 + \ldots, \tag{20}$$

где μ_i — коэффициенты разложения, которые необходимо определить. Коэффициент при нулевой степени $\mu_0 \equiv \mu(T = 0)$ равен уровню Ферми ε_{F}. Подставляя (20) в (19), получаем

$$0 = \nu(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_1 T + \left(\frac{1}{2}\nu'(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_1^2 + \nu(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_2 + \frac{\pi^2}{6}\nu'(\varepsilon_{\mathrm{F}})\right) T^2 + \ldots \tag{21}$$

Приравнивая нулю коэффициенты разложения в правой части, получаем уравнения для коэффициентов μ_1 и μ_2:

$$\begin{aligned} &\nu(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_1 = 0, \\ &\frac{1}{2}\nu'(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_1^2 + \nu(\varepsilon_{\mathrm{F}})\mu_2 + \frac{\pi^2}{6}\nu'(\varepsilon_{\mathrm{F}}) = 0. \end{aligned}$$

Учитывая, что для свободных электронов $\nu(\varepsilon_{\mathrm{F}}) \neq 0$, записываем разложение для химического потенциала в виде

$$\mu(T) = \varepsilon_{\mathrm{F}} - \frac{\pi^2}{6} \frac{\nu'(\varepsilon_{\mathrm{F}})}{\nu(\varepsilon_{\mathrm{F}})} T^2 + \ldots \tag{22}$$

5. Асимптотики в теории Стонера для произвольной ПЭС. Переходим к низкотемпературному разложению для намагниченности и химического потенциала в теории Стонера.

Теорема 2. *Пусть выполнено условие*

$$U\frac{2\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})}{\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})+\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})} > 1. \tag{23}$$

Тогда справедливы разложения

$$\bar{s}_z(T) = \bar{s}_z(0) - \alpha T^2 + \ldots, \quad \mu(T) = \varepsilon_\mathrm{F} - \beta\, T^2 + \ldots,$$

где коэффициенты имеют вид

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\pi^2}{6}\,\frac{\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu'_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F}) - \nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu'_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})}{\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})+\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F}) - 2U\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})}, \\ \beta &= \frac{\pi^2}{6}\,\frac{\nu'_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})+\nu'_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F}) - U[\nu'_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F}) + \nu'_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})]}{\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})+\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F}) - 2U\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F})\nu_\downarrow(\varepsilon_\mathrm{F})}. \end{aligned} \tag{24}$$

Доказательство. Решение системы уравнений (1) при низких температурах имеет вид

$$\bar{s}_z(T) = s_0 + s_1 T + s_2 T^2 + \ldots, \quad \mu(T) = \mu_0 + \mu_1 T + \mu_2 T^2 + \ldots, \tag{25}$$

где s_i и μ_i — коэффициенты, которые необходимо определить.

В качестве $g(\varepsilon)$ берем спин-поляризованную ПЭС: $g(\varepsilon) = \nu_\sigma(\varepsilon)$. Тогда $G(\varepsilon) = N_\sigma(\varepsilon)$ — число состояний электронов со спином σ и энергией не больше ε при температуре T. Используя формулу (7), с учетом $N'_\sigma(\varepsilon) = \nu_\sigma(\varepsilon)$ имеем

$$\bar{n}_\sigma = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \nu_\sigma(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = N_\sigma(\mu) + \frac{\pi^2}{6}\nu'_\sigma(\mu)T^2 + \ldots \tag{26}$$

Подставляя (25) в (26) и разлагая это выражение в ряд Тейлора до второго порядка по T, находим

$$\begin{aligned} \bar{n}_\sigma = N_\sigma(\mu_0) &+ (\mu_1 + \sigma U s_1)\nu_\sigma(\mu_0) T + \\ &+ \left[(\mu_2 + \sigma U s_2)\nu_\sigma(\mu_0) + \left(\frac{1}{2}(\mu_1 + \sigma U s_1)^2 + \frac{\pi^2}{6}\right)\nu'_\sigma(\mu_0)\right] T^2 + \ldots \end{aligned} \tag{27}$$

Подставляя (27) и (25) в первое уравнение теории Стонера (1), и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях T в правой и левой частях, получаем три соотношения

$$s_0 = \frac{1}{2}(N_\uparrow(\mu_0) - N_\downarrow(\mu_0)), \tag{28}$$

$$s_1 = \frac{1}{2}\Big[\mu_1(\nu_\uparrow(\mu_0) - \nu_\downarrow(\mu_0)) + U s_1(\nu_\uparrow(\mu_0) + \nu_\downarrow(\mu_0))\Big], \tag{29}$$

$$\begin{aligned} s_2 = \frac{1}{2}\bigg[&\mu_2(\nu_\uparrow(\mu_0) - \nu_\downarrow(\mu_0)) + U s_2(\nu_\uparrow(\mu_0) + \nu_\downarrow(\mu_0)) \\ &+ \left(\frac{1}{2}(\mu_1^2 + U^2 s_1^2) + \frac{\pi^2}{6}\right)(\nu'_\uparrow(\mu_0) - \nu'_\downarrow(\mu_0)) + \mu_1 U s_1(\nu'_\uparrow(\mu_0) + \nu'_\downarrow(\mu_0))\bigg]. \end{aligned} \tag{30}$$

Действуя аналогично со вторым уравнением теории Стонера (1), получаем еще три соотношения:

$$\bar{n}_\mathrm{e} = N_\uparrow(\mu_0) + N_\downarrow(\mu_0), \tag{31}$$

$$0 = \mu_1(\nu_\uparrow(\mu_0) + \nu_\downarrow(\mu_0)) + U s_1(\nu_\uparrow(\mu_0) - \nu_\downarrow(\mu_0)), \tag{32}$$

$$\begin{aligned} 0 = {}&\mu_2(\nu_\uparrow(\mu_0) + \nu_\downarrow(\mu_0)) + U s_2(\nu_\uparrow(\mu_0) - \nu_\downarrow(\mu_0)) \\ &+ \left(\frac{1}{2}(\mu_1^2 + U^2 s_1^2) + \frac{\pi^2}{6}\right)(\nu'_\uparrow(\mu_0) + \nu'_\downarrow(\mu_0)) + \mu_1 U s_1(\nu'_\uparrow(\mu_0) - \nu'_\downarrow(\mu_0)). \end{aligned} \tag{33}$$

Система уравнений (28) и (31) дает спин $s_0 \equiv \bar{s}_z(0)$ и химический потенциал $\mu_0 \equiv \mu(0)$ при $T = 0$:

$$s_0 = \frac{1}{2}(N_\uparrow(\mu_0) - N_\downarrow(\mu_0)), \quad \bar{n}_\mathrm{e} = N_\uparrow(\mu_0) + N_\downarrow(\mu_0). \tag{34}$$

При условии (23) система уравнений (29) и (32) имеет единственное решение

$$s_1 = 0, \quad \mu_1 = 0. \tag{35}$$

Оставшиеся соотношения (30) и (33) после упрощений принимают вид

$$-\nu_\uparrow(\mu_0)\mu_2 + (1 - U\nu_\uparrow(\mu_0))s_2 = \frac{\pi^2}{6}\nu'_\uparrow(\mu_0),$$
$$-\nu_\downarrow(\mu_0)\mu_2 - (1 - U\nu_\downarrow(\mu_0))s_2 = \frac{\pi^2}{6}\nu'_\downarrow(\mu_0).$$

Решая эту систему и подставляя $\mu_0 = \varepsilon_\mathrm{F}$, получаем формулы (24). □

Действуя аналогично, из теоремы 1 можно получить разложения намагниченности и химического потенциала в теории Стонера и для более высоких степеней, чем T^2.

Проанализируем полученные формулы в двух предельных случаях. Сначала рассмотрим случай, когда значение $\bar{s}_z$ при $T = 0$ настолько велико, что все d-состояния электронов со спином вверх заполнены («сильный ферромагнетик»). Тогда условие (23) не выполнено, а формальная подстановка соотношений $\nu_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F}) = 0$ и $\nu'_\uparrow(\varepsilon_\mathrm{F}) = 0$ в (24) дает $\alpha = 0$. В действительности, как было показано в работе [13], в случае «сильного ферромагнетика» намагниченность имеет экспоненциальную асимптотику

$$\bar{s}_z(T)/\bar{s}_z(0) = 1 - ce^{-a/T} + \dots \tag{36}$$

Рассмотрим теперь другой случай, когда средний спин $s_0 \equiv \bar{s}_z(0)$ мал: $Us_0 \ll \varepsilon_\mathrm{F}$ («слабый ферромагнетик»). Тогда подставляя разложения

$$\nu_\sigma(\varepsilon_\mathrm{F}) \equiv \nu(\varepsilon_\mathrm{F} + \sigma U s_0) = \nu(\varepsilon_\mathrm{F}) + \sigma U s_0 \nu'(\varepsilon_\mathrm{F}) + \dots,$$
$$\nu'_\sigma(\varepsilon_\mathrm{F}) \equiv \nu'(\varepsilon_\mathrm{F} + \sigma U s_0) = \nu'(\varepsilon_\mathrm{F}) + \sigma U s_0 \nu''(\varepsilon_\mathrm{F}) + \dots.$$

в (24), получаем, что разложение химического потенциала в случае «слабого ферромагнетика» превращается в разложение (22) для свободных электронов, а коэффициент в разложении намагниченности в случае «слабого ферромагнетика» принимает вид

$$\alpha = \frac{\pi^2}{6}\frac{U\left[(\nu'(\varepsilon_\mathrm{F}))^2 - \nu(\varepsilon_\mathrm{F})\nu''(\varepsilon_\mathrm{F}))\right]}{\nu(\varepsilon_\mathrm{F})(1 - U\nu(\varepsilon_\mathrm{F}))}. \tag{37}$$

Нетрудно видеть, что условие (23) в случае «слабого ферромагнетика» есть не что иное, как критерий ферромагнетизма Стонера: $U\nu(\varepsilon_\mathrm{F}) > 1$. В общем случае условие (23) можно рассматривать как обобщение критерия Стонера в терминах спин-поляризованных ПЭС.

6. Заключение. В теории Стонера обоснован закон T^2 для магнитного момента и химического потенциала в случае произвольной плотности электронных состояний. Получены явные формулы (24) для коэффициентов при T^2 в терминах спин-поляризованных плотностей электронных состояний. Указано условие (23), при котором закон T^2 справедлив. Это условие обобщает критерий Стонера. Получено выражение (37) для коэффициента в законе T^2 для намагниченности в случае «слабых ферромагнетиков».

Результаты работы позволят провести качественный анализ влияния электронной структуры на магнитный момент в ферромагнитных металлах и сплавах при низких температурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979.
2. *Киттель Ч.* Квантовая теория твердых тел. — М.: Наука, 1967.
3. *Мельников Н. Б., Гуленко А. С., Резер Б. И.* Связь магнетизма сплавов 3d-металлов с электронной структурой в теории Стонера и в ДТСФ// Физ. мет. металловед. — 2024. — *125.* — С. 56–61.
4. *Мельников Н. Б., Резер Б. И.* Поперечная восприимчивость и закон $T^{3/2}$ в динамической теории спиновых флуктуаций// Теор. мат. физ. — 2024. — *181.* — С. 358–373.

5. *Abramowitz M., Stegun I. A.* Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. — New York: Wiley, 1972.
6. *Bloch F.* Zur Theorie des Austauschproblems und der Remanenzerscheinung der Ferromagnetika// Z. Phys. — 1932. — *74.* — P. 295–335.
7. *Fetter A. L., Walecka J. D.* Quantum Theory of Many-Particle Systems. — New York: McGraw-Hill, 1971.
8. *Izuyama T., Kim D. J., Kubo R.* Band theoretical interpretation of neutron diffraction phenomena in ferromagnetic metals// J. Phys. Soc. Jpn. — 1963. — *18.* — P. 1025–1042.
9. *Melnikov N. B., Reser B. I.* Dynamic Spin Fluctuation Theory of Metallic Magnetism. — Berlin: Springer, 2018.
10. *Reser B. I.* Numerical method for calculation of the Fermi integrals// J. Phys.: Condens. Matter — 1996. — *8.* — P. 3151–3160.
11. *Sommerfeld A.* Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik// Z. Phys. — 1928. — *47.* — P. 1–32.
12. *Stoner E. C.* Collective Electron Ferromagnetism// Proc. Roy. Soc. A: Math. — 1938. — *165.* — P. 372–414.
13. *Thompson E. D., Wohlfarth E. P., Bryan A. C.* The low temperature variation of the saturation magnetization of ferromagnetic metals and alloys// Proc. Phys. Soc. — 1964. — *83.* — P. 59–70.
14. *Titchmarsh E.C.* The Theory of the Riemann Zeta-Function. — Oxford: Clarendon Press, 1986.

ДЕКЛАРАЦИЯ АВТОРОВ

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Электрон», номер госрегистрации 122021000039–4).

Финансовые интересы. Авторы заявляют об отсутствии подлежащих раскрытию финансовых или нефинансовых интересов, связанных с публикуемым материалом.

Мельников Николай Борисович (Mel'nikov Nikolai Borisovich)
Факультет вычислительной математики и кибернетики,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
(Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics,
M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia)
E-mail: melnikov@cs.msu.ru

Резер Борис Ильич (Reser Boris Ilyich)
Отдел теоретической и математической физики,
Институт физики металлов им. М. Н. Михеева
Уральского отделения РАН, Екатеринбург
(Department of Theoretical and Mathematical Physics,
M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch
of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia)
E-mail: reser@imp.uran.ru