

УДК 537.9, 538.956

О.І. Крамар, к.фіз.-мат.н., доц.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

## МОДИФІКОВАНА ПРОЦЕДУРА РОЗРАХУНКУ ТЕМПЕРАТУРИ КЮРІ ВУЗЬКОЗОННОГО ФЕРОМАГНЕТИКА

О.І. Kramar, Ph.D, Assoc. Prof.

### MODIFIED PROCEDURE OF CURIE TEMPERATURE CALCULATION FOR NARROW-BAND FERROMAGNET

Як уже зазначалося у наших попередніх роботах [1,2], застосування чисельних методів дозволяє досягти суттєвого прогресу при аналізі станів з магнітним впорядкуванням у системах з сильними електронними кореляціями та особливостями густини електронних станів. У випадку ферромагнітних матеріалів оптимальним підходом виявляється поєднання перевіреної аналітичної моделі з модифікованою самоузгодженою процедурою розв'язування системи інтегральних рівнянь для намагніченості  $m$  та хімічного потенціалу (через концентрацію носіїв  $n$ ), залежних від абсолютної температури  $T$ , ефективного ферромагнітного обміну  $J_{ef}$  та густини станів.

Умовою переходу з ферромагнітного стану у парамагнітний для рівняння виду  $m = f(m, n, kT, J_{ef})$  будемо вважати  $df/dm|_{m \rightarrow 0} = 1$ . Після розрахунків на основі енергетичних спектрів  $E_{\sigma}(\vec{k})$  носіїв з різними спінами  $\sigma$ , отриманих в роботі [2], маємо набір самоузгоджених інтегральних рівнянь виду:

$$I_0 = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t) dt}{ch^2(E^*/2kT)}, \quad I_1 = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t)t dt}{ch^2(E^*/2kT)}, \quad I_2 = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t)t^2 dt}{ch^2(E^*/2kT)}, \quad (1)$$
$$J_0 = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t) dt}{\exp(E^*/kT)+1}, \quad J_1 = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t)t dt}{\exp(E^*/kT)+1}.$$

$$\Delta\beta = \partial\beta_{\downarrow}(m)/\partial m|_{m \rightarrow 0} - \partial\beta_{\uparrow}(m)/\partial m|_{m \rightarrow 0} = (-4J_1/(2-n) + (1-n^2/(2-n)^2)I_2 - zJ_{ef}I_1)/(1+I_1)$$

В підсумку вираз для розрахунку температури Кюрі:

$$\left(1 - \frac{n}{2}\right) \left(\frac{n^2}{(2-n)^2} - 1\right) I_1 + (\Delta\beta + zJ_{ef})I_0 + \frac{n}{2-n} = 1, \quad (2)$$

причому концентрація носіїв в залежності від форми функції густини електронних

$$\text{станів } \rho(t): \frac{n}{2} = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t) dt}{\exp(E^*/kT)+1}.$$

У підсумку відзначимо, що механізм стабілізації ферромагнітного впорядкування базується на наявності спин-залежних зсувів центрів підзон  $\beta_{\sigma}$ , значення яких визначається формою густини електронних станів, та ефективного обміну.

#### Література.

1. Крамар О. І. Використання чисельних методів для розв'язування задач фізики сильноскорельованих електронних систем / Матер. конф. ІМСТ.- ТНТУ, 2014 — С. 52.
2. Didukh L., Kramar O. Metallic ferromagnetism in the systems with strongly correlated electrons // Condensed Matter Physics.- 2005.- Vol. 8, No. 3(43).- pp. 547–564.