

ния атомов или молекул, перемещающиеся по кристаллу, образуют *Френкеля экситоны*. Волновая функция экситона удовлетворяет ψ -ле (1); области разрешенных значений энергии экситона называются экситонными зонами.

Условие в) выполняется практически во всех металлах, где электрон-фононное взаимодействие ослабляется в результате его экранирования свободными электронами, и во мн. полупроводниках. В полярных диэлектриках и полупроводниках с достаточно большой степенью ионной связи и большой эфф. массой носителей последние, поляризуя решётку, образуют автолокализ. состояния — *поляроны*. Различают поляроны большого радиуса, у к-рых область локализации R_p намного превышает постоянную решётки a , и малого радиуса с $R_p \approx a$. Автолокализ. состояния малого радиуса образуются и в неполярных диэлектриках, напр. в кристаллах инертных газов (см. *Автолокализация*), при этом, как правило, происходит автолокализация только дырок. Движение поляронов малого радиуса при низких темп-рах осуществляется по очень узкой полярной зоне, а при более высоких — путём активированных перескоков от узла к узлу.

Лит.: 1) Бете Г., Зоммерфельд А., Электронная теория металлов, пер. с нем., Л.—М., 1938; 2) Абрикосов А. А., Основы теории металлов, М., 1987; 3) Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел, пер. с англ., М., 1967; 4) Каллауэй Дж., Теория энергетической зонной структуры, пер. с англ., М., 1969; 5) Бир Г. Л., Пикус Г. Е., Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, М., 1972; 6) Dimmock J. O., The calculation of electronic energy bands by the augmented plane wave method, «Solid State Phys.», 1971, v. 26, p. 129; 7) Харрисон У. А., Электронная структура и свойства твердых тел, пер. с англ., т. 1—2, М., 1983; 8) Хейне В., Коэн М., Уайр Д., Теория псевдопотенциала, пер. с англ., М., 1973; 9) Заيمان Дж., Принципы теории твердого тела, пер. с англ., М., 1974; 10) Цидильковский И. М., Зонная структура полупроводников, М., 1978; 11) Heine V., Electronic structure from the point of view of the local atomic environment, «Solid State Phys.», 1980, v. 35, p. 1; 12) Bullett D. W., The Renaissance and quantitative development of the tight-binding method, там же, p. 129. Г. Е. Шкуры.

ЗОННЫЙ МАГНЕТИЗМ — магнетизм металлов и сплавов, интерпретируемый в рамках моделей, основанных на *зонной теории*. Типичные представители зонных магнетиков (ЗМ) — переходные металлы Fe, Co, Ni, Cr, Mn, их сплавы и соединения.

Энергетич. спектр переходных металлов представляет собой широкую *sp*-зону, в к-рую погружена система пяти узких пересекающихся *d*-зон (рис. 1) [1]. По срав-

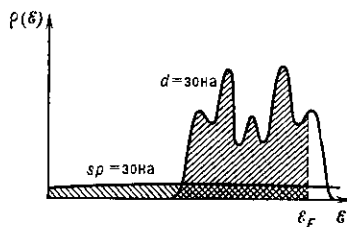


Рис. 1. Схематическое изображение плотности состояний переходных металлов. В условиях, когда ферми-уровень ϵ_F лежит в пределах *d*-зоны, плотность уровней $\rho(\epsilon)$ вблизи ϵ_F гораздо выше, чем в *sp*-зоне.

нению с типичными зонами проводимости *sp*-электронов *d*-зоны имеют меньшую ширину, но плотность энергетич. уровней в них оказывается гораздо выше плотности уровней *sp*-электронов в той же области энергий, где расположены *d*-зоны. Об этом свидетельствует существенный вклад *d*-электронов в низкотемпературную теплоемкость $C_{эл} = \gamma T$, где $\gamma \sim \rho(\epsilon_F)$, т. е. значению плотности состояний на *ферми-уровне*. Коэф. γ у переходных металлов на порядок величины больше, чем у нормальных [2]; *d*-электроны переходных металлов по своим свойствам занимают промежуточное положение между локализованными и коллективизированными электронами. Оценки энергии связи электронов в кристалле и исследование *ферми-поверхности* свидетельствуют о значит. степени коллективизации *d*-электронов. Так, ср. магн. моменты на атом в переходных металлах в единицах μ_B (μ_B — магнетон Бора)

являются дробными, в то время как магн. моменты изолированных атомов в единицах μ_B — целые числа; кроме того, измеренное значение *g-фактора* у переходных металлов близко к 2 (значение $g=2$ отвечает модели свободных электронов). Напр., магн. момент у Ni составляет $0,583\mu_B$, у Fe — $2,177\mu_B$, у Co — $1,707\mu_B$ [3]; дробность значения магн. момента свидетельствует о том, что спонтанная намагниченность в этих металлах создается коллективизированными электронами. Рассеяние медленных нейтронов на *спиновых волнах* в этих веществах хорошо описывается как в рамках *Гейзенберга модели*, основанной на представлении о локализованных магн. моментах [4], так и в рамках модели коллективизированных электронов [5].

Распределение зарядовой плотности в ферромагн. металлах (Fe, Ni, Co) близко к атомному [3]. Двойств. характер поведения *d*-электронов обусловлен тем, что перекрытие *d*-орбиталей соседних атомов в переходных металлах оказывается значительным, и электроны имеют возможность перемещаться по всему образцу. В результате атомный *d*-уровень уширяется и образуется *d*-зона. В то же время между *d*-электронами существует кулоновское взаимодействие. Наиб. значит. вклад в энергию взаимодействия вносит кулоновское отталкивание электронов с противоположными направлениями проекции спина, находящихся вблизи одного и того же узла кристаллич. решётки. Энергия взаимодействия двух таких электронов

$$U = e^2 \int \Phi_i^*(r) \Phi_i(r) |r-r'|^{-1} \Phi_i^*(r') \Phi_i(r') dr dr',$$

где $\Phi_i(r)$ — функция Ванье для *d*-электрона, локализованного вблизи иона, расположенного в узле *i* кристаллич. решётки. Оценки показывают, что для двух электронов, находящихся на расстоянии $r \sim a_0$, т. е. *Бора радиуса*, $U \sim 10$ эВ. Для электронов, локализованных на соседних узлах решётки, эта энергия на порядок меньше [6, 7].

Наиб. существенным обстоятельством для появления магн. порядка в переходных металлах является то, что энергия U в этих металлах больше ширины *d*-зоны ($U \geq W$, где $W \sim 1$ эВ — ширина *d*-зоны). В этом случае кулоновское межэлектронное взаимодействие существенно влияет на движение *d*-электронов и в силу этого радикально меняет их плотность состояний. Как будет показано ниже, именно это взаимодействие приводит к раздвижке энергетич. зон электронов с разными направлениями спина и возникновению спонтанной намагниченности [7]. Простейшим образом, не учитывая орбитального вырождения и пренебрегая взаимодействиями, проявляющими себя на больших расстояниях, гамильтониан \hat{H} можно записать в след. виде (см. *Хаббарда модель*):

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} U n_i^{\sigma} n_i^{-\sigma}.$$

Здесь t_{ij} — интеграл переноса электрона между узлами *i* и *j*, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с проекцией спина $\sigma/2$ на узле *i* (*j*), $n_i^{\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа электронов с ориентацией спина σ на узле *i*, σ принимает значения $+1$ и -1 [5]. Первый член гамильтониана описывает переходы электронов с узла на узел, а второй — кулоновское взаимодействие электронов с противоположными направлениями проекций спина на одном узле решётки. В рамках *среднего поля* приближения $n_i^{\sigma} n_i^{-\sigma}$ заменяется на $n_i^{\sigma} \langle n_i^{-\sigma} \rangle$, т. е. считается, что на электрон, находящийся в узле *i* и обладающий проекцией спина $\sigma/2$, действует ср. поле $U \langle n_i^{-\sigma} \rangle$, создаваемое электронами с противоположной ориентацией спина. В этом случае гамильтониан модели Хаббарда после преобразования