

Фурье переходит в гамильтониан *Стонера модели* [8]:

$$H = \sum_{k, \sigma} [t(k) - \sigma Um/2] a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma}$$

где k — импульс, $t(k)$ — закон дисперсии взаимодействующих электронов (Фурье-образ интеграла переноса t_{ij}), m — ср. намагниченность на атом. Именно с этой моделью связаны осн. представления о З. м.

Для того чтобы система коллективизированных электронов обладала намагниченностью, необходимо, чтобы подзоны электронов с проекциями спинов $+1/2$ и $-1/2$ были по-разному заполнены. В рамках данной модели это достигается простейшим способом: предполагается, что кулоновское взаимодействие между электронами приводит лишь к раздвижке подзон электронов с разными проекциями спина, причём закон дисперсии и плотность состояний не изменяются. Схематически это изображено на рис. 2.

Ср. число электронов с ориентацией спина σ и импульсом k определяется ф-цией распределения Ферми:

$$n_k^\sigma = \langle a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma} \rangle = [\exp \beta (\epsilon_k^\sigma - \epsilon_F) + 1]^{-1},$$

где $\beta = (kT)^{-1}$, $\epsilon_k^\sigma = t(k) - \sigma Um/2$. Намагниченность m системы d -электронов определяется разностью числа электронов с ориентацией спинов по намагниченности и числа электронов с ориентацией спинов против намагниченности:

$$m = n^+ - n^- = \sum_k (n_k^+ - n_k^-).$$

Это уравнение определяет величину суммарного магн. момента d -электронов металла при любой темп-ре. Среди его решений всегда имеется тривиальное решение $m=0$, а темп-ра, при к-рой появляется нетривиальное решение $m \neq 0$, представляет собой темп-ру Кюри (T_c) в данной модели. Значение T_c определяют из уравнения, к-рое получается при дифференцировании левой и правой частей уравнения для магн. момента по m в точке $m=0$. Существование ферромагнетизма возможно, если $T_c > 0$. Полагая $T_c = 0$, получим критич. условие возникновения ферромагнетизма в данной модели — критерий Стонера:

$$U\rho(\epsilon_F) > 1,$$

где $\rho(\epsilon_F)$ — значение плотности электронных состояний на ферми-уровне. Как видно из этого условия, для возникновения ферромагнетизма в модели Стонера необходимо, чтобы достаточно большими были как энергия взаимодействия d -электронов, так и плотность состояний на уровне Ферми. Т. о., уже для самой простой модели ферромагн. металла оказывается, что темп-ра перехода и само существование ферромагн. состояния определяется структурой энер-

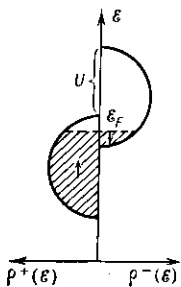


Рис. 2. Схематическое изображение зонного расщепления для модели Стонера: $\rho^+(\epsilon)$ — плотность уровней в подзоне, где спины электронов ориентированы по направлению намагниченности; $\rho^-(\epsilon)$ — плотность уровней в подзоне антипараллельных спинов.

гетич. зон электронов, значением плотности состояний вблизи поверхности Ферми и раздвижкой подзон электронов с разл. проекцией спина.

Детальное исследование модели Хаббарда показывает, что раздвижка зон при росте U , достигнув величины W , перестаёт увеличиваться и форма электронных зон существенно меняется при переходе из парамагн. состояния в ферромагнитное [9]. Схематически это изображено на рис. 3. Структура энергетич. зон определяет и осн. состояние, и равновесные термодинамич. свойства системы, такие, напр., как зависимость магн. момента от темп-ры, к-рая связана с одноэлектронными воз-

буждениями. Дополнит. вклад в термодинамич. характеристики дают коллективные возбуждения типа спиновых волн. Наиб. успешно для количеств. расчёта свойств З. м. в осн. состоянии применяется метод функционала спиновой плотности. В рамках этого подхода точный гамильтониан системы взаимодействующих электронов заменяется гамильтонианом газа взаимодействующих частиц в эфф. нелокальном потенциале. В приближении локальной спиновой плотности удаётся показать, что критерий Стонера справедлив только

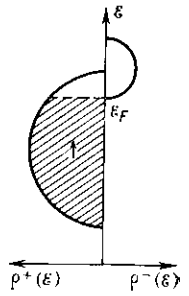


Рис. 3. Схематическое изображение зонного расщепления при последовательном учёте межэлектронного кулоновского взаимодействия.

для ферромагн. переходных металлов Fe, Co, Ni (при $T=0$) [10]. Однако при конечных темп-рах свойства З. м. описать на основе теории Стонера не удаётся. В рамках этой теории невозможно согласовать большие (~ 1 эВ) значения энергии межзонного расщепления, необходимые для создания измеряемого на эксперименте магн. момента насыщения, и низкие (~ 1000 К) темп-ры Кюри переходных металлов. Кроме того, не удаётся объяснить наблюдаемое экспериментально кюривейсовское поведение восприимчивости при темп-рах выше темп-ры Кюри (см. *Кюри — Вейса закон*). Слишком высокое по сравнению с экспериментальным значение темп-ры Кюри, получаемое в рамках теории Стонера, свидетельствует о том, что осн. ферромагн. состояние разрушается не стонеровскими возбуждениями (т. е. возбуждениями, создаваемыми при переходе одного электрона из зоны с ориентацией спина $+1/2$ в зону с ориентацией спина $-1/2$), а коллективными флуктуациями спиновой плотности.

На основе преобразования Стратоновича — Хаббарда [11] Т. Мория (Т. Moriya) с соавторами развил теорию спиновых флуктуаций [11]. С помощью этого преобразования они замесили систему взаимодействующих спинов системой не взаимодействующих спинов в произвольно флуктуирующих полях. Рассчитанное в рамках этой теории значение темп-ры Кюри хотя и выше эксперим. значения, но значительно ниже рассчитанного в рамках теории Стонера. Температурная зависимость восприимчивости χ при повышении темп-ры в согласии с экспериментом переходит от кюривейсовской [$\chi = C/(T - \theta)$] к паулиевской ($\chi = \text{const}$). Однако спин-флуктуационная теория далека от завершения и во многом дискуссионна. В целом до настоящего времени полное и адекватное описание термодинамич. свойств ЗМ отсутствует.

В ЗМ может возникать не только ферромагн. порядок. Эксперименты по рассеянию нейтронов в Сг, α -фазе Mn и γ -фазе Fe показывают, что в спектрах рассеяния возникает ряд пиков, свидетельствующих о существовании в этих материалах антиферромагн. упорядочения. Наиб. интересен с точки зрения магнетизма коллективизированных электронов хром, существенно отличающийся от обычных антиферромагнетиков. Во-первых, в чистом Сг длина волны спиновой плотности несоизмерима с периодом кристаллической решётки. Волновой вектор этой структуры Q с компонентами $[2\pi(1 - \delta)/a; 0; 0]$ (a — постоянная решётки, $\delta = 0,05$) направлен вдоль одной из осей типа [100] и слабо зависит от темп-ры. Во-вторых, выше *Нееля точки* Сг ($T_N = 312$ К) не существует локализованных магн. моментов. Ср. магн. момент на атом Сг равен $0,46 \mu_B$. При 120 К в Сг происходит магнитный фазовый переход (*спин-флип переход* с переориентацией магн. моментов). Поперечная модуляция магн. моментов сменяется продольной. Существование антиферромагн. структуры, несоизмеримой с постоянной кристаллич. решётки,