

*Письма в ЖЭТФ, том 11, стр. 206 – 209*

*5 февраля 1970 г.*

## О ВОЗМОЖНОСТИ ОРБИТАЛЬНОГО МАГНЕТИЗМА

*В.Л.Покровский, Г.В.Уймин*

Обычно обменное взаимодействие локализованных атомных электронов рассматривается на примере электронов  $s$ -оболочки. Гамильтониан обменного взаимодействия в этом случае выражается через операторы спинов электронов известным образом:

$$\mathcal{H}_{H-L} = I S_1 S_2. \quad (1)$$

Формула (1) служит основой теории химической связи Гайтлера—Лондона и с другой стороны приводит к теории спинового магнетизма, связанной с именем Гайзенберга.

Возможны, однако, ситуации, когда обменное взаимодействие связывает электроны с отличными от нуля орбитальными моментами.

Обычно считается, что орбитальные моменты в кристалле заморожены. Однако, если кристаллические поля, действующие на электрон, малы по сравнению с обменной энергией, то момент электрона слабо связан с решеткой. Спин-орбитальное взаимодействие мы также считаем слабым по сравнению с обменным.

Для его описания воспользуемся модельным гамильтонианом Хаббарда [1]

$$\mathcal{H}_H = v \sum_{r m \sigma} a_{r m \sigma}^+ a_{r+a m \sigma} + V \sum_r \frac{1}{2} (\sum_{m \sigma} n_{r m \sigma}) (\sum_{m \sigma} n_{r m \sigma} - 1) \quad (2)$$

$a_{r m \sigma}^+$  ( $a_{r m \sigma}$ ) – операторы рождения (уничтожения) электрона на узле  $r$  с проекцией момента  $m$  и проекцией спина  $\sigma$  (для определенности будем рассматривать  $p$ -электроны). Второе слагаемое в гамильтониане (2) описывает кулоновское отталкивание электронов на одном атоме. Будем считать  $v \ll U$  и рассматривать первое слагаемое в (2) как возмущение. Мы считаем, что число электронов совпадает с числом атомов. Основное состояние невозмущенного гамильтониана сильно вырождено. В нем на каждом атоме находится один электрон с произвольными проекциями момента и спина. Возмущение снимает вырождение, так что во втором порядке теории возмущений можно получить эффективный гамильтониан вида

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{эфф}} = & l \sum_{r a} \{ [(L_r L_{r+a})^2 + (L_r L_{r+a}) - 2] + \\ & + (2S_r S_{r+a} - \frac{1}{2}) [(L_r L_{r+a})^2 + (L_r L_{r+a}) - 1] \}, \\ & (l = \frac{v^2}{V}), \end{aligned} \quad (3)$$

зависящий от операторов спина и орбитального момента электронов на каждом узле. Аналогичное вычисление для  $s$ -электронов приводит к обычному гайзенберговскому гамильтониану (см., например, [2, 3]).

В системе, описываемой гамильтонианом  $\mathcal{H}_{\text{эфф}}$  сохраняется полный орбитальный момент, спин и их проекции. Строгое построение ос-

новного состояния так же трудно, как и в гайзенберговской модели антиферромагнетика. Поэтому мы рассмотрим простейшие возможности для конфигураций систем орбитальных и спиновых моментов. Пусть, например, спиновая система ферромагнитна. Тогда из (3) следует, что орбитальные моменты образуют антиферромагнитную систему. Полагая  $\langle L_0 L_a \rangle \approx -1$ , находим энергию состояния на атом  $E_1 \approx -2I z$  ( $z$  — число ближайших соседей). Рассмотрим другое состояние, в котором  $L$  образуют ферромагнитную систему. Тогда система спинов оказывается антиферромагнитной. Энергия такого состояния на атом  $E_2 \approx -I z$ . Таким образом, в рамках рассматриваемой модели первое состояние энергетически более выгодно. По своим магнитным свойствам описываемая система похожа на ферромагнетик (имеет большой спонтанный момент). Картина нейтронной дифракции, однако, сильно напоминает ту, которая получается в антиферромагнетике. Именно, при достаточно сильном магнитном рассеянии нейтронные рефлекссы будут расположены вдвое чаще, чем рентгеновские.

Нет никаких оснований считать, что спиновый и орбитальный порядки разрушаются при одинаковой температуре. Грубые оценки показывают, что скорее всего спиновое упорядочение разрушается при меньшей температуре, чем орбитальное. Это означает, что система совершает переход из описанного нами состояния в антиферромагнитное, где упорядочены орбитальные моменты, а затем в парамагнитное.

Действительная картина может оказываться более сложной, так как наши оценки носят предварительный характер. Мы хотели бы подчеркнуть, что модель, использующая  $p$ -электроны не является реалистической, и описываемое нами явление может реализоваться на  $d$ - или  $f$ -оболочках. Вычисления для этих случаев сильно усложняются, но качественная картина остается прежней.

Экспериментально орбитальный магнетизм следует искать либо в плохих металлах с узкой зоной проводимости, либо в ферродиэлектрических соединениях с большими температурами перехода.

Мы благодарны И.Е.Дзялошинскому и А.П.Казанцеву за полезное обсуждение.

Институт теоретической физики  
им. Л.Д.Ландау  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
5 января 1970 г.

## Литература

- [ 1] Hubbard. Proc. Roy. Soc., A276, 238, 1963.
- [ 2] Д.Маттис. Теория магнетизма. М, 1967.
- [ 3] Л.П.Будяевский, Д.И.Хомский. ЖЭФ, 52, 1603, 1968.