

Письма в ЖЭТФ, том 20, вып. 11, стр. 739 - 741. 5 декабря 1974 г.

О ФЕРРОМАГНЕТИЗМЕ 3d-МЕТАЛЛОВ

И.А.Ахиезер, В.Г.Сыщенко, Е.М.Чудновский

Показано, что узость d -зоны по сравнению с s -зоной в металлах группы железа может приводить к эффективному притяжению между спинами d -электронов и тем самым к ферромагнетизму независимо от знаков затравочных обменных взаимодействий.

При построении теории ферромагнетизма металлов группы железа возникают трудности при объяснении знака и порядка величины эффективного обменного взаимодействия между спинами d -электронов (см. [1]).

Мы показываем, что простая модель двухкомпонентной ферми-жидкости s - и d -электронов при единственном требовании

$$g_d >> g_s \quad (1)$$

(g_d , g_s — плотности электронных состояний на уровне Ферми) приводит к эффективному притяжению между спинами d -электронов независимо от знаков затравочных обменных взаимодействий.

Обратим внимание, что в переходных 3d-металлах отношение g_d/g_s вследствие уменьшения радиуса 3d-оболочки возрастает с увеличением атомного номера; поэтому неравенство (1) особенно хорошо выполняется для Fe, Co, и Ni, которые, как известно, как раз и являются ферромагнетиками.

Обобщая рассмотрение [2] на случай двухкомпонентной ферми-жидкости, запишем энергию одночастичных электронных состояний в виде

$$\epsilon_\alpha(\mathbf{p}, s) = \epsilon_\alpha^{(o)}(\mathbf{p}) + 2\beta_\alpha m s; \quad \alpha = s, d. \quad (2)$$

Здесь $\epsilon_{\alpha}^{(0)}$ – энергии s - и d -электронов в парамагнитной фазе, m – намагниченность.

$$m = 2 \mu_e \operatorname{Sp} \sum_{\alpha} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_{\alpha}(p, s), \quad (3)$$

n_{α} – одиноческие фермиевские матрицы плотности, μ_e – магнетон Бора.

Согласно теории ферми-жидкости Ландау [3], вызванные возмущением намагниченности малые возмущения одиноческих энергий и матриц плотности связаны соотношениями

$$\delta \epsilon_{\alpha}(p, s) = \operatorname{Sp} \sum_{\gamma} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} 4 \psi_{\alpha\gamma}(p, p')(s, s') \delta n_{\gamma}(p', s'), \quad (4)$$

где ψ_{ss} , ψ_{dd} и $\psi_{sd} = \psi_{ds}$ – соответственно величины $s s$ - , dd - и $s d$ -обменов.

Из уравнений (3), (4) можно получить выражения для величин β_{α}

$$\beta_d = -(\mu_e g_d F)^{-1} \left[F_d + F_s F_d - F_{sd}^2 - F_{sd} \sqrt{\frac{g_d}{g_s}} \right], \quad (5)$$

$$\beta_s = (\mu_e g_s F)^{-1} \left[F_s + F_s F_d - F_{sd}^2 - F_{sd} \sqrt{\frac{g_s}{g_d}} \right], \quad (6)$$

$$F = F_d - F_s - F_{sd} \left(\sqrt{\frac{g_d}{g_s}} - \sqrt{\frac{g_s}{g_d}} \right), \quad (7)$$

где $F_d = \psi_{dd} g_d$, $F_s = \psi_{ss} g_s$, $F_{sd} = \psi_{sd} \sqrt{g_s g_d}$ – безразмерные параметры обменного взаимодействия (мы ограничиваемся для простоты нулевой гармоникой в разложении функций $\psi_{\alpha\gamma}$ по полиномам Лежандра).

Случаю однокомпонентной ферми-жидкости соответствует, очевидно, $F_s = F_d = F_{sd}$, $g_s = g_d$. Формулы (5) – (7) при этом дают неопределенность; величину $\beta = \beta_s = \beta_d$ в этом случае легко, однако, определить непосредственно из (4)

$$\beta = \frac{\psi}{\mu_e}. \quad (8)$$

Для возникновения ферромагнетизма требуется, чтобы величина β была отрицательна; поэтому в однокомпонентной модели ферромагнетизм возникает лишь при $\psi < 0$.

Иначе обстоит дело в двухзонной модели с $g_d \gg g_s$. В этом случае из (5) – (7) получим

$$\beta_d = -(\mu_e g_d)^{-1}; \quad \beta_s = (\mu_e \sqrt{g_s g_d})^{-1} \frac{F_{sd}^2 - F_s F_d - F_s}{F_{sd}}. \quad (9)$$

Мы видим, что в этом случае d -электроны (вклад которых в намагниченность является определяющим) оказываются ферромагнитными ($\beta_d < 0$) независимо от знаков затравочных обменных взаимодействий.

Интересно, что величина спинового расщепления d -полосы, $\Delta = \beta_d m$, может быть найдена без знания абсолютных величин параметров обмена, так как β_d определяется лишь плотностью d -состояний на уровне Ферми. Величина Δ для экспериментальных значений намагниченности при $T = 0$ приведена в таблице. Плотности состояний взяты из измерений теплоемкости [4] (при этом учтено неравенство (1)).

Металл	$\Delta, эВ$
Fe	1,06
Co	0,86
Ni	0,21

Харьковский
государственный университет
им. А.М.Горького

Поступила в редакцию
26 октября 1974 г.

Литература

- [1] С.В.Вонсовский. Магнетизм, М., изд. Наука, 1972.
- [2] А.А.Абрикосов, И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 35, 771, 1958.
- [3] Л.Д.Ландау. ЖЭТФ, 30, 1058, 1956.
- [4] С.А.Неминов. ФММ, 19, 550, 1965.