

УДК 539.2  
ББК 22.37+34.2  
И84



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту № 08-02-07002.

**Ирхин В. Ю., Ирхин Ю. П.**

И84 Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в *d*- и *f*-металлах и их соединениях. — 2-е изд., испр. и доп. — М.—Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2008. — 476 с.: ил.

ISBN 978-5-93972-684-9

Монография включает рассмотрение всех основных физических свойств *d*- и *f*-переходных металлов и изложение соответствующих теоретических концепций. Подробно обсуждаются некоторые нетрадиционные вопросы: влияние особенностей плотности состояний на электронные свойства; многоэлектронное описание сильного коллективизированного магнетизма; механизмы магнитной анизотропии; микроскопическая теория аномальных кинетических явлений в ферромагнетиках. Помимо классических проблем физики твердого тела в применении к переходным металлам, рассмотрены современные достижения в теории электронных корреляций *d*- и *f*-систем в рамках многоэлектронных моделей.

Книга рассчитана на широкий круг физиков-твердотельщиков любого возраста — как теоретиков, так и экспериментаторов.

УДК 539.2  
ББК 22.37+34.2

ISBN 978-5-93972-684-9

© В. Ю. Ирхин, Ю. П. Ирхин, 2004, 2008

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008

# Оглавление

<b>Предисловие ко второму изданию</b> . . . . .	8
<b>Предисловие к первому изданию</b> . . . . .	10
<b>1. Общие представления физики переходных металлов</b> . . . . .	14
1.1. Частично заполненные атомные оболочки и электронная локализация в переходных металлах . . . . .	14
1.2. Атомный и зонный подходы в теории переходных элементов . . . . .	19
1.3. Кристаллическое поле и орбитальные моменты в твердых телах . . . . .	25
<b>2. Зонная теория</b> . . . . .	33
2.1. Основные представления . . . . .	33
2.2. Метод ортогонализированных плоских волн и псевдопотенциал . . . . .	36
2.3. Методы присоединенных плоских волн и Корринги—Кона—Ростокера . . . . .	39
2.4. Методы Хартри—Фока—Слэтера и функционала плотности в проблеме электронных корреляций . . . . .	43
2.5. Обсуждение результатов вычисления зонной структуры . . . . .	51
2.6. Экспериментальные исследования зонной структуры: спектральные данные . . . . .	64
2.7. Вычисления зонной структуры редкоземельных элементов и актиноидов . . . . .	81
2.8. Поверхность Ферми . . . . .	86
2.8.1. Методы исследования поверхности Ферми и эффект де Гааза—ван Альфена . . . . .	87
2.8.2. Экспериментальные и теоретические результаты для поверхностей Ферми . . . . .	90
<b>3. Термодинамические свойства</b> . . . . .	102
3.1. Энергия связи и определяемые ею свойства . . . . .	102
3.2. Кристаллическая структура . . . . .	120
3.3. Теплоемкость . . . . .	129
3.3.1. Решеточная теплоемкость . . . . .	129
3.3.2. Электронная теплоемкость . . . . .	134
3.3.3. Теплоемкость магнитных металлов . . . . .	140
<b>4. Магнитные свойства</b> . . . . .	144
4.1. Обменные взаимодействия и модель Гейзенберга для локализованных спинов . . . . .	144
4.2. Магнитная восприимчивость парамагнитных переходных металлов . . . . .	148
4.3. Ферромагнетизм коллективизированных электронов и теория Стонера . . . . .	157
4.4. Теория спиновых флуктуаций . . . . .	165
4.5. Электронная структура и свойства полуметаллических ферромагнетиков . . . . .	171

4.6. Магнетизм сильно коррелированных $d$ -систем . . . . .	181
4.7. Магнетизм редкоземельных элементов и актинидов . . . . .	187
4.8. Магнитная анизотропия . . . . .	194
4.8.1. Замораживание орбитальных моментов периодическим потенциалом решетки и магнитная анизотропия $d$ -металлов . .	196
4.8.2. Магнитная анизотропия редкоземельных элементов . . . . .	199
<b>5. Кинетические свойства . . . . .</b>	<b>203</b>
5.1. Общая классификация явлений переноса . . . . .	204
5.2. Вычисление кинетических коэффициентов . . . . .	207
5.3. Сопротивление . . . . .	210
5.3.1. Электрон-электронное рассеяние . . . . .	213
5.3.2. Механизм $s$ - $d$ -рассеяния Мотта . . . . .	221
5.3.3. Сопротивление магнитных металлов . . . . .	222
5.3.4. Сопротивление сплавов переходных металлов . . . . .	227
5.3.5. Двухтоковая модель ферромагнитных металлов . . . . .	228
5.4. Термоэлектродвижущая сила . . . . .	233
5.5. Эффект Холла . . . . .	238
5.6. Магнитосопротивление . . . . .	245
5.7. Аномальные кинетические эффекты в ферромагнитных металлах .	251
5.7.1. Аномальный эффект Холла . . . . .	251
5.7.2. Магнитосопротивление в присутствии спонтанной намагниченности . . . . .	261
5.7.3. Магнитооптические эффекты . . . . .	263
5.7.4. Термомагнитные эффекты . . . . .	266
<b>6. Эффект Кондо и аномальные свойства <math>d</math>- и <math>f</math>-соединений . . . . .</b>	<b>268</b>
6.1. Эффект Кондо на одном центре . . . . .	269
6.2. Температура Кондо для $d$ -примесей . . . . .	276
6.3. Спиновая динамика и электронные свойства решеток Кондо . . . .	280
6.4. Основное состояние решеток Кондо . . . . .	284
6.5. Системы с промежуточной валентностью . . . . .	288
6.6. Магнитное упорядочение в решетках Кондо и соединениях с тяжелыми фермионами . . . . .	295
6.7. Носители тока в двумерном антиферромагнетике . . . . .	306
6.8. Состояние спиновой жидкости в системах со спиновыми и зарядовыми степенями свободы . . . . .	311
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>317</b>
<b>Приложения . . . . .</b>	<b>320</b>
<b>А. Многоэлектронные операторы рождения для атомных конфигураций и операторы Хаббарда . . . . .</b>	<b>320</b>
<b>В. Операторы углового момента и двойные неприводимые тензорные операторы . . . . .</b>	<b>327</b>
<b>С. Многоэлектронный гамильтониан кристалла . . . . .</b>	<b>333</b>

<b>D. Межатомное электростатическое взаимодействие и вывод гамильтониана Гейзенберга . . . . .</b>	<b>340</b>
<b>E. Спиновые волны в гейзенберговских магнетиках и метод функций Грина . . . . .</b>	<b>347</b>
<b>F. Метод операторов Хаббарда в модели Гейзенберга . . . . .</b>	<b>353</b>
<b>G. Электрон-магнонное взаимодействие в магнитных металлах . . . . .</b>	<b>358</b>
G.1. Ферромагнетики . . . . .	359
G.2. Антиферромагнетики . . . . .	370
<b>H. Модель Хаббарда с сильными корреляциями . . . . .</b>	<b>379</b>
<b>I. <math>s</math>—<math>d</math>-обменная модель с узкими зонами и <math>t</math>—<math>J</math>-модель . . . . .</b>	<b>386</b>
<b>J. Электронные состояния и спиновые волны в хаббардовском ферромагнетике с узкими зонами . . . . .</b>	<b>390</b>
<b>K. <math>s</math>—<math>f</math>-обменная модель и косвенное обменное взаимодействие в редких землях . . . . .</b>	<b>395</b>
<b>L. Спин-орбитальное взаимодействие . . . . .</b>	<b>398</b>
<b>M. Вывод кинетических уравнений методом матрицы плотности и теории аномального эффекта Холла . . . . .</b>	<b>403</b>
M.1. Примесное рассеяние . . . . .	407
M.2. Рассеяние фононами . . . . .	410
M.3. Рассеяние спиновыми неоднородностями . . . . .	412
<b>N. Вырожденная модель Андерсона . . . . .</b>	<b>418</b>
<b>O. Приближение среднего поля для основного состояния магнитных решеток Кондо . . . . .</b>	<b>424</b>
<b>P. Представления Швингера и Дайсона—Малеева в теории двумерных гейзенберговских антиферромагнетиков . . . . .</b>	<b>430</b>
<b>Литература . . . . .</b>	<b>437</b>
<b>Предметный указатель . . . . .</b>	<b>460</b>