

УДК 539.1(045)

DOI: 10.17223/00213411/63/9/102

Ф.Г. КИЖАЕВ, Н.Н. МЕДВЕДЕВ, О.В. СТАРЫГИНА

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В 3d-ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

В рамках двухзонной s - d -модели на основе обобщенного кристаллического гамильтониана рассматривается образование магнитного момента, энергетического спектра и плотность состояний d -электронов в переходных металлах. Показано, что учет кратности вырождения s - d -электронов в гамильтониане приводит к возникновению дополнительного обменно-корреляционного взаимодействия ($U - K$), которое совместно с корреляционным взаимодействием определяет электронную структуру d -металлов. При этом возникает трехпиковая плотность состояний, которая превращается в двухпиковую, если исключить обменно-корреляционное взаимодействие.

Ключевые слова: уравнения движения для функций Грина, плотность состояний, энергетический спектр, локализованный магнитный момент.

Введение

Центральной проблемой теоретического описания магнитных свойств переходных металлов и их сплавов является проблема возникновения локализованного магнитного момента в узлах кристаллической решетки.

Сложность теории магнитных явлений заключается в том, что за магнетизм отвечают 3d-электроны, которые занимают промежуточное положение между валентными 4s-электронами и электронами аргоновой оболочки. В твердом теле первые коллективизированы, образуя зону проводимости, а вторые остаются локализованными и образуют ионный остов решетки. При этом 3d-электроны могут проявлять как локализованные, так и коллективизированные свойства.

Теоретическими и экспериментальными исследованиями установлено, что формирование локализованного магнитного момента зависит от множества параметров и носит кооперативный характер. При этом основная роль отводится корреляционному взаимодействию электронов с противоположно-направленными спинами. В 70-х годах XX в. благодаря работам Хаббарда [1] и Андерсона [2] была создана фундаментальная теория корреляционных систем. В последующие годы предложено множество вариантов усовершенствования этих теорий, основные положения которых изложены в обзорах [3–6].

Тем не менее все они наталкиваются на значительные трудности при описании реальных кристаллических веществ, что связано, по-видимому, с упрощенной формой гамильтониана и способом решения уравнений движения функций Грина.

Как показывают расчеты (см. обзоры [7, 8]), s - d -гибридизация несколько размывает электронную плотность d -электронов и состояния, из которых образуется d -зона, становятся виртуально связанными [3, 7, 9, 10].

Очевидно, что сложность энергетического спектра зависит от сложности гамильтониана. Учет кратности вырождения для d -состояний примесных атомов рассматривался в работе [8], а влияние s - d -гибридизации на электронную структуру переходных металлов – в работах [9–12].

В данной работе учтена кратность вырождения для d -состояний. Ее включение разделяет d -электроны на две подгруппы. Первую образуют электроны с параллельными спинами с энергией ($U - K$) и вторую подгруппу образуют электроны с антипараллельными спинами с энергией взаимодействия (U). В рамках двухзонной s - d -модели рассматривается образование локализованного магнитного момента, энергетического спектра и проводится вычисление плотности состояний d -электронов в переходных металлах.

Расчет электронной структуры переходных металлов методом функции Грина

Как известно, однопиковая плотность состояния соответствует хартри-фоковскому приближению.

Будем описывать электронную структуру 3d-переходных металлов с помощью двухвременной функции Грина $\langle\langle d_{m\sigma} | d_{nj\sigma}^+ \rangle\rangle$. Здесь $d_{m\sigma}$ и $d_{nj\sigma}^+$ – операторы уничтожения и рождения

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>