

С. к. ф. указывает на благоприятные условия для возникновения магн. упорядочения при больших величинах параметра обменного взаимодействия U и при больших значениях $\rho(\mathcal{E}_F)$. Он показывает, почему магн. упорядочение возникает в группе 3d-металлов (металлы с незаполненной 3d-оболочкой). В периодической таблице Менделеева в ряду переходных металлов (слева направо) число электронов возрастает, что приводит к увеличению \mathcal{E}_F , а также к росту $\rho(\mathcal{E}_F)$. С другой стороны, в столбце (сверху вниз) из-за роста общего числа электронов возрастает экранировка потенциала кулоновского взаимодействия, т. е. величина U уменьшается. В итоге, согласно С. к. ф., в ряду 3d-металлов вероятность ферромагнетизма зонных электронов должна уменьшаться слева направо. Т. к. модель Стонера неинвариантна относительно вращений, С. к. ф. оказывается завышен в пользу ферромагн. состояния из-за того, что существование выделенной оси сильно ограничивает спектр возбуждений, а следовательно, и энергию системы.

Дальнейшее обобщение С. к. ф. (иногда наз. также обобщенным критерием Стонера — Хаббарда) возникает при переносе выражения (2) на случай неоднородной статической восприимчивости $\chi(q)$, q — волновой вектор. Если топология «ферми-поверхности» допускает максимум $\chi_0(q)$ при $q \neq 0$, то обобщённый С. к. ф. $\alpha\chi_0(q) \geq 1$ может описывать неустойчивость системы электронов относительно перехода из однородного парамагн. состояния в неоднородное антиферомагн. (в обоих состояниях усреднённый магн. момент равен нулю). В металлах, где поверхность Ферми обладает свойством «истинга» (имеются конгруэнтные участки при трансляции на вектор Q , напр. в одномерном случае $Q = 2k_F$, где k_F — ферми-импульс), $\chi_0(q)$ при $q \rightarrow Q$ имеет логарифмич. особенность, $\chi_0(Q) \sim \chi_0(0) \ln(\mathcal{E}_F/T)$ при $T \rightarrow 0$. Тогда обобщённый С. к. ф. выполняется при сколь угодно малом значении α , что указывает на абсолютную неустойчивость парамагн. состояния относительно возникновения спиральной плотности волн. Тот же эффект, описываемый с помощью обобщённого С. к. ф. для электронной поляризуемости, проявляется в неустойчивости системы электронов относительно возникновения волн зарядовой плотности при учёте наряду с прямым кулоновским и обменным также и электрон-фононного взаимодействия.

Лит. см. при ст. Стонера модель.

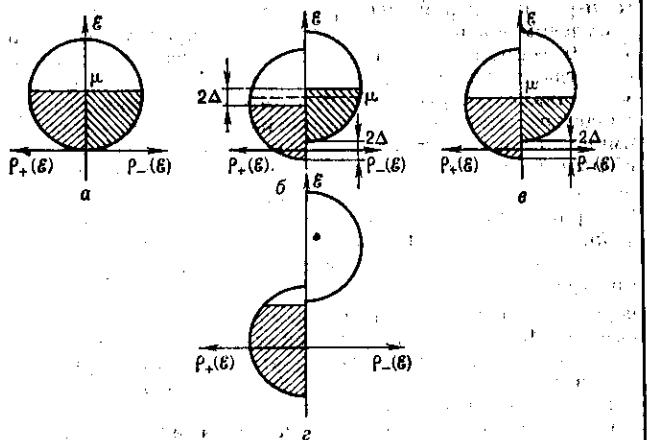
А. В. Бедлев, О. А. Котельников

СТОНЕРА МОДЕЛЬ — простейшая модель, описывающая возникновение ферромагн. упорядочения в переходных металлах, их сплавах и соединениях в рамках зонного магнетизма. С. м. представляет систему коллективизированных электронов металлического магнетика в виде идеального газа блоговских электронов (предполагается, что стационарные состояния этих систем совпадают). Эфф. гамильтониан этой системы $\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} e_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}$, где $e_{k\sigma}$ — энергия электрона в одиночном приближении, $a_{k\sigma}^+$ ($a_{k\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с импульсом k , значения $\sigma = \pm 1$ соответствуют направлениям магн. момента вдоль (+) и против (-) намагниченности (ось Oz). В отличие от немагн. металлов, энергия $e_{k\sigma}$ учитывает межэлектронное обменное взаимодействие и в С. м. записывается в виде [1—3]:

$$e_{k\sigma} = t(k) - \sigma\Delta, \quad (1)$$

$$\Delta = k\theta m + \mu_B H. \quad (2)$$

Здесь $t(k)$ — закон дисперсии невзаимодействующих электронов. Расщепление зоны электронов определяется величиной 2Δ (рис.), H — напряжённость магн. поля, $m = m(H, T) = M(H, T)/nN\mu_B$ — относит. намагниченность, $M(H, T)$ — намагниченность системы, содержащей N атомов и n коллективизированных электронов



Обменное расщепление подзон с направлением магнитного момента вдоль (+) и против (-) намагниченности: a — парамагнетизм; b — разрывка подзон, возникшая из-за обменного взаимодействия (случай слабого зонного магнетизма). В результате верхний уровень подзон (-) оказался выше первоначального значения на величину Δ , а верхний уровень подзоны (+) ниже на Δ . При установлении равновесного состояния из подзоны (-) в подзону (+) переходит около бы $n_+ - n_-$ электронов на атом; c — равновесное состояние в случае слабого зонного магнетизма; d — равновесное состояние в случае сильного зонного магнетизма.

на каждый атом, μ_B — магнетон Бора, $k\theta = nU/2$ — энергетич. параметр взаимодействия, U — параметр обменного взаимодействия между электронами с противоположно направленными спинами.

В рамках С. м. феноменологич. описание обменного взаимодействия электронов с противоположно направленными спинами может быть учтено с помощью введения аналога молекулярного поля Вейса, определяемого величиной $k\theta$, не зависящей от импульса электрона k . Вклад от взаимодействия электронов с параллельными спинами не зависит от k и он может быть учтён сдвигом начала отсчёта энергии на пост. величину. В С. м. энергия межэлектронного взаимодействия зависит только от z -компоненты полного спина, что делает модель неинвариантной относительно вращений. В рамках микроскопич. описания С. м. можно рассматривать как среднег. поля приближение для Хаббарда модели.

Подное число коллективизированных электронов nN и намагниченность $M = mN\mu_B$ в С. м. определяются самосогласованно:

$$Nn = \int d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) [f(\mathcal{E} + \Delta) + f(\mathcal{E} - \Delta)], \quad (3)$$

$$Nm = \int d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) [f(\mathcal{E} + \Delta) - f(\mathcal{E} - \Delta)], \quad (3)$$

где Ф-ция Ферми — Дирака

$$f(x) = \{\exp[(x - \mu)/kT] + 1\}^{-1}. \quad (4)$$

Здесь $\rho(\mathcal{E})$ — плотность электронных состояний, \mathcal{E} — энергия, μ — хим. потенциал. Для упрощения расчётов $\rho(\mathcal{E})$ обычно аппроксимируется простой Ф-цией, не зависящей от темп-ры и концентрации электронов [2—4].

В зависимости от заполненности подзон с противоположными направлениями магн. моментов электронов различают сильный и слабый зонный магнетизм (рис.). В случае слабого зонного ферромагнетизма спонтанная намагниченность мала и, воспользовавшись разложением входящих в выражения (3) и (4) Ф-ций в ряд по степеням малых параметров $\mu_B H/\mathcal{E}_F$, kT/\mathcal{E}_F , $m\theta/\mathcal{E}_F$ (здесь \mathcal{E}_F — ферми-энергия, при $T = 0$ хим. потенциал $\mu = \mathcal{E}_F$), легко можно получить значение темп-ры Кюри T_C (см. Кюри точка), определяемой в С. м. как