

## Полуметаллические ферромагнетики

В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон

*Обзор экспериментальных данных, расчетов зонной структуры и теоретических исследований в рамках многоэлектронных моделей для полуметаллических ферромагнетиков (ПМФ). Эти вещества характеризуются наличием энергетической щели для одной из проекций спина на уровне Ферми и составляют отдельный класс сильных коллективизированных магнетиков, включающий ряд гейслеровых сплавов (например, PtMnSb), CrO<sub>2</sub> и др. Некоторые ПМФ и близкие системы являются перспективными магнитными материалами, в том числе обладающими уникальными магнитооптическими свойствами. С теоретической точки зрения ПМФ интересны ярким проявлением неквазичастичных (спин-поляронных) эффектов, например в спиновой поляризации носителей тока, скорости ядерной магнитной релаксации. Представления теории ПМФ оказываются полезными и для "обычных" сильных зонных магнетиков, включая металлы группы железа.*

PACS numbers: 71.20.C, 75.50.B

### Содержание

1. Введение (705).
  2. Зонная структура и магнитооптические свойства (706).
  3. Кинетические свойства и проблема спиновой поляризации (710).
  4. Магнитные свойства (711).
  5. Теоретическое исследование энергетического спектра в рамках s-d-обменной модели и модели Хаббарда: неквазичастичные состояния (712).
  6. Неквазичастичные вклады в электронную теплоемкость и кинетические свойства (716).
  7. Ферромагнетизм систем с сильными корреляциями (717).
  8. Микроскопическая модель магнетизма переходных металлов: аналогии с полуметаллическими ферромагнетиками (719).
  9. Полуметаллические антиферромагнетики (720).
  10. Заключение (722).
- Список литературы (722).

### 1. Введение

Несмотря на значительные усилия большого числа исследователей, проблема сильного магнетизма d-металлов, их сплавов и соединений [1–3] все еще далека от окончательного решения. Это утверждение имеет как чисто теоретико-физический аспект (в частности, вопросы о происхождении локальных моментов, о применимости теории ферми-жидкости и квазичастичного описания), так и прагматический. До сих пор,

скажем, не установлены теоретические ограничения на температуру Кюри и намагниченность насыщения d-магнетиков, в то время как рекордные характеристики магнитомягких материалов (пермендюр) не улучшались существенно уже более полувека [2].

Современное состояние теории магнетизма металлов таково, что более или менее последовательное описание имеется лишь для отдельных классов магнетиков. При этом для слабых зонных магнетиков ZrZn<sub>2</sub>, Sc<sub>3</sub>In, Ni<sub>3</sub>Al [3] и ферромагнетиков с сильным межэлектронным взаимодействием типа Fe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>S<sub>2</sub> [4] используются совершенно различные физические картины — ферромагнитной ферми-жидкости и состояния с хаббардовским расщеплением зоны и локальными моментами соответственно. В 70-е годы для слабых зонных ферромагнетиков удалось построить вполне удовлетворительную, хотя и полуфеноменологическую, теорию [3, 5]. Именно она была затем с некоторыми модификациями экстраполирована на сильные зонные магнетики (например, металлы группы железа) [3], однако в общем не особенно успешно [6, 7]. В такой ситуации представляется очень полезным анализ противоположного случая предельно сильных магнетиков с большим (по сравнению с энергией Ферми) спиновым расщеплением и резко различающимися электронными состояниями со спинами вверх и вниз. В старой теории Стонера, когда речь шла о "сильных" магнетиках, имелась в виду именно такая ситуация с полностью занятой нижней или пустой верхней спиновой подзоной. Считалось, что эта картина справедлива, например, для никеля. Современные расчеты электронной структуры методом функционала спиновой плотности [8] опровергли последнее утверждение (плотность состояний со спином вверх  $N_{\uparrow}(E_F)$  оказалась малой, но конечной).

Тем не менее первопринципные зонные расчеты все же привели к открытию класса реальных соединений, подоб-

В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. Институт физики металлов  
УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18  
Тел. (3432) 49-91-38

Статья поступила 4 марта 1994 г.

ных "сильным" стонеровским магнетикам. Эти вещества характеризуются тем, что уровень Ферми лежит в щели для парциальной плотности состояний с одной из проекций спина, почему они получили название полуметаллических ферромагнетиков ("half-metallic ferromagnets", ПМФ). Впервые такая картина была получена для гейслеровых сплавов NiMnSb [9] и PtMnSb [9–11] со структурой  $C_{1b}$ , а затем для CoMnSb, FeMnSb (полуметаллический ферромагнетик) [12]; для CrMnSb предсказано состояние полуметаллического антиферромагнетика [11]. Зонный расчет для большой группы ферро- и антиферромагнитных гейслеровых сплавов другой серии  $T_2MnZ$  ( $T = Co, Ni, Cu, Pd$ ) со структурой  $L2_1$  [14] показал, что состояние, близкое к ПМФ ( $N_{\uparrow}(E_F)$  практически равно нулю) реализуется в системах  $Co_2MnZ$  с  $Z = Al, Sn$  (а согласно [15] — также с  $Z = Ga, Si, Ge$ ). Кроме того, полуметаллическое состояние было получено в зонных расчетах  $CrO_2$  (структура рутила) [16, 17], UNiSn (структура  $C_{1b}$ ) [18, 19],  $Fe_3O_4$  [11, 20],  $KCrSe_2$  (см. [21]).

Интерес к ПМФ в значительной степени был обусловлен открытием гигантского кэрровского вращения плоскости поляризации в PtMnSb [22] и высказанными тогда же соображениями о связи этого эффекта с особенностями энергетического спектра ПМФ [10, 11]. Тем самым, ПМФ рассматриваются как перспективные материалы для магнитооптической записи информации. Любопытно, что согласно расчетам к ПМФ относится и такой важный материал для магнитной записи, как  $CrO_2$  (впрочем, его преимущества с практической точки зрения напрямую связаны не с этим фактом, а скорее с механическими и адгезионными свойствами порошка).

Интуитивно ясно, что ПМФ представляют интерес с точки зрения получения максимальной намагниченности насыщения  $M_0$  (дальнейшее увеличение спинового расщепления в этом состоянии не приводит к повышению магнитного момента). Зонные расчеты сплавов Fe–Co с рекордными для d-систем значениями  $M_0$  [23], которые образуют основу современных магнитомягких технических материалов, и систем  $R_2Fe_{17}$ ,  $R_2Fe_{14}$  в [24–26] (магнитомягкие материалы) показывают, что ситуация, действительно, в некотором смысле напоминает ПМФ (уровень Ферми лежит в глубоком минимуме для одной из проекций спина). Такой минимум характерен для систем с локальными моментами и имеется также в

чистом железе. Ярко выраженный минимум для состояний со спином вниз обнаружен также в системах  $RCO_5$  ( $R = Y, Sm, Gd$ ) [27],  $GdNi_5$  [28]. Сопоставление магнитных свойств большой группы сплавов  $Y_nCo_m$ ,  $Y_nFe_m$  с результатами расчета в рамках простого метода рекурсии было выполнено в [29]; состояние, близкое к ПМФ, было найдено в  $YCo_5$ ,  $YCo_7$ ,  $Y_2Co_{17}$ .

В ферромагнетике  $Mn_4N$  плотность состояний  $N_{\uparrow}(E_F)$  равна нулю для позиций Mn(I) (которые вносят основной вклад в магнитный момент) и имеет глубокий минимум для позиций Mn(II) [30–32], так что он должен иметь свойства, близкие к полуметаллическим. К практически важным материалам с большим  $M_0$  относится широко исследуемое в последнее время изоструктурное ферромагнитное соединение  $Fe_4N$ , для которого значение  $N_{\uparrow}(E_F)$  практически равно нулю для позиции Fe(I) [30, 33] (см. также расчеты для  $NiFe_3N$  [34],  $PdFe_3N$  [35]).

Все сказанное оправдывает выделение ПМФ как нового перспективного класса зонных магнетиков с практической точки зрения.

С теоретической точки зрения ПМФ выделяются прежде всего наличием хорошо определенных локальных моментов, а также отсутствием "стонеровского континуума" электрон-дырочных возбуждений и, тем самым, малым затуханием коллективной спин-волновой моды во всей зоне Бриллюэна. Это сближает их с гейзенберговскими магнетиками, а также с вырожденными ферромагнитными полупроводниками [36–39]. Взаимодействие носителей тока на уровне Ферми с хорошо определенными магнонами приводит к совершенно другой картине энергетического спектра, чем взаимодействие с "рыхлыми" парамагнонами в слабых зонных магнетиках [3, 5, 40]. Действительно, в случае занятой подзоны с  $\sigma = \uparrow$  электроны со спином вверх свободно передвигаться не могут; оказывается, что они формируют очень экзотическую энергетическую полосу почти бестоковых спин-поляронных состояний [40, 41]. С последним обстоятельством связан ряд ярких экспериментальных аномалий в спиновой поляризации электронов проводимости, скорости продольной ядерной магнитной релаксации и т.д. [36–41]. "Спин-поляронные" эффекты, обусловленные рассеянием носителей тока на магнонах, являются существенно не ферми-жидкостными; они проявляются в ПМФ наиболее ярко, поскольку в обычных зонных магнетиках их маскируют парамагнитные вклады.

Настоящий обзор посвящен рассмотрению всего комплекса экспериментальных и в особенности теоретических проблем, связанных с ПМФ, а также анализу значения этих вопросов для общей теории магнетизма коллективизированных электронов.

## 2. Зонная структура и магнитооптические свойства

Как уже отмечалось, важнейшими представителями ПМФ являются гейслеровы сплавы  $T_2MnZ$  со структурой  $L2_1$  и  $TMnZ$  со структурой  $C_{1b}$  ( $MgAgAs$ ). Структура  $L2_1$  с кубической симметрией соответствует определенному способу заполнения атомами T, Mn и Z всех четырех подрешеток ГЦК-решетки, а структура  $C_{1b}$  отличается от нее тем, что одна из подрешеток незаполнена и симметрия понижается до тетраэдрической (центр инверсии отсутствует; рис. 1).

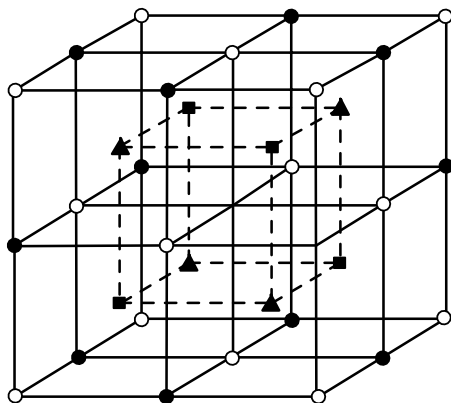


Рис. 1. Кристаллические структуры гейслеровых сплавов как результат разбиения ГЦК-решетки на четыре подрешетки. В структуре  $L2_1$  заполнены позиции всех четырех типов, а в структуре  $C_{1b}$  позиции, обозначенные черными кружками, вакантны

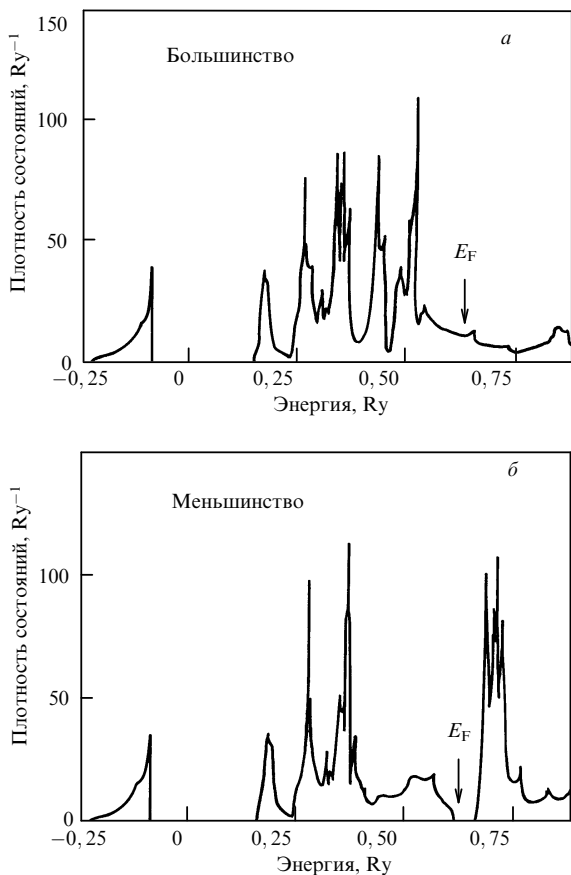


Рис. 2. Плотность состояний ( $Ry^{-1}$ ) в  $PtMnSb$  [10]. *a* — Спин вверх. *б* — Спин вниз

Общая схема формирования "полуметаллического" состояния может быть описана следующим образом: [9, 11, 14, 19]. В пренебрежении гибридизацией с состояниями атомов Т и Z d-зона марганца для этих структур характеризуется широкой энергетической щелью между связывающими и антисвязывающими состояниями. Вследствие сильного внутриатомного (хундовского) обмена для ионов марганца подзоны со спином вверх и вниз существенно раздвигаются. При этом одна из спиновых подзон близко подходит к р-зоне лигандов, благодаря чему щель в ней частично или полностью замыкается р-d-гибридизацией. В другой подзоне сохраняется щель, куда может попасть уровень Ферми, что и дает состояние ПМФ. Например, расчетные зонные структуры  $NiMnSb$  и гипотетического соединения  $NiMnSn$  [42] (система  $NiMnSb_{1-x}Sn_x$  устойчива вплоть до  $x \cong 0,7$ ) отличаются, по существу, лишь положением уровня Ферми относительно щели для состояний с  $\sigma = \downarrow$ , что просто связано с разным числом р-электронов для Sb и Sn. В то же время уменьшение на единицу числа электронов в сплавах  $Co_2MnZ$  ( $Z = Si, Ge$ ) не приводит к выходу уровня Ферми из щели [15]. Отметим, однако, что для структуры  $L2_1$  речь идет скорее о глубокой псевдощели, а для структуры  $C1_b$  — о настоящей щели. Это связано с существенным изменением характера р-d-гибридизации (особенно между состояниями р и  $t_{2g}$ ) при исчезновении центра инверсии [9]. Таким образом, структура  $C1_b$  оказывается более благоприятной для формирования состояния ПМФ.

Согласно [30] аналогичные факторы ответственны за щель в парциальной плотности состояний для одной из

позиций марганца  $Mn(I)$  в соединении  $Mn_4N$ , структура которого может быть получена из структуры  $T_2MnZ$  удалением некоторых атомов. Качественно похожий механизм, основанный на сильном хундовском обмене и гибридизации d-состояний хрома с р-состояниями кислорода, рассмотрен в [16] для соединения  $CrO_2$  со структурой рутила. Как обсуждается в [14], сама устойчивость ферромагнитного состояния есть следствие различия в р-d-гибридизации для состояний с разными проекциями спина. Авторы работы [14] ввели для описания подобной ситуации термин "ковалентный магнетизм", подчеркивая ее отличие от картины спектра в простой модели Стонера, где плотности состояний  $N_{\uparrow}(E)$  и  $N_{\downarrow}(E)$  отличаются лишь сдвигом на постоянное спиновое расщепление. Результаты расчетов зонной структуры показаны на рис. 2–5.

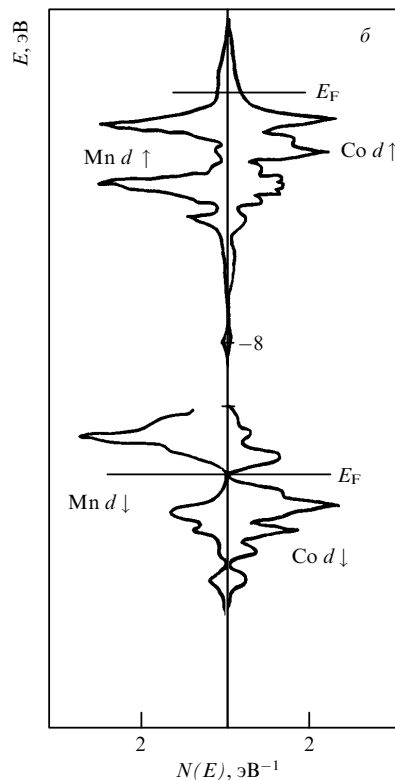
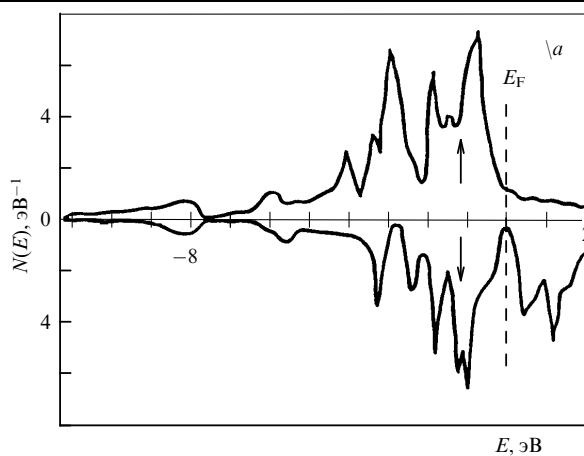


Рис. 3. Полная (*a*) и парциальная (*б*) плотности состояний для гейслеровых сплавов  $Co_2MnSn$  [14]

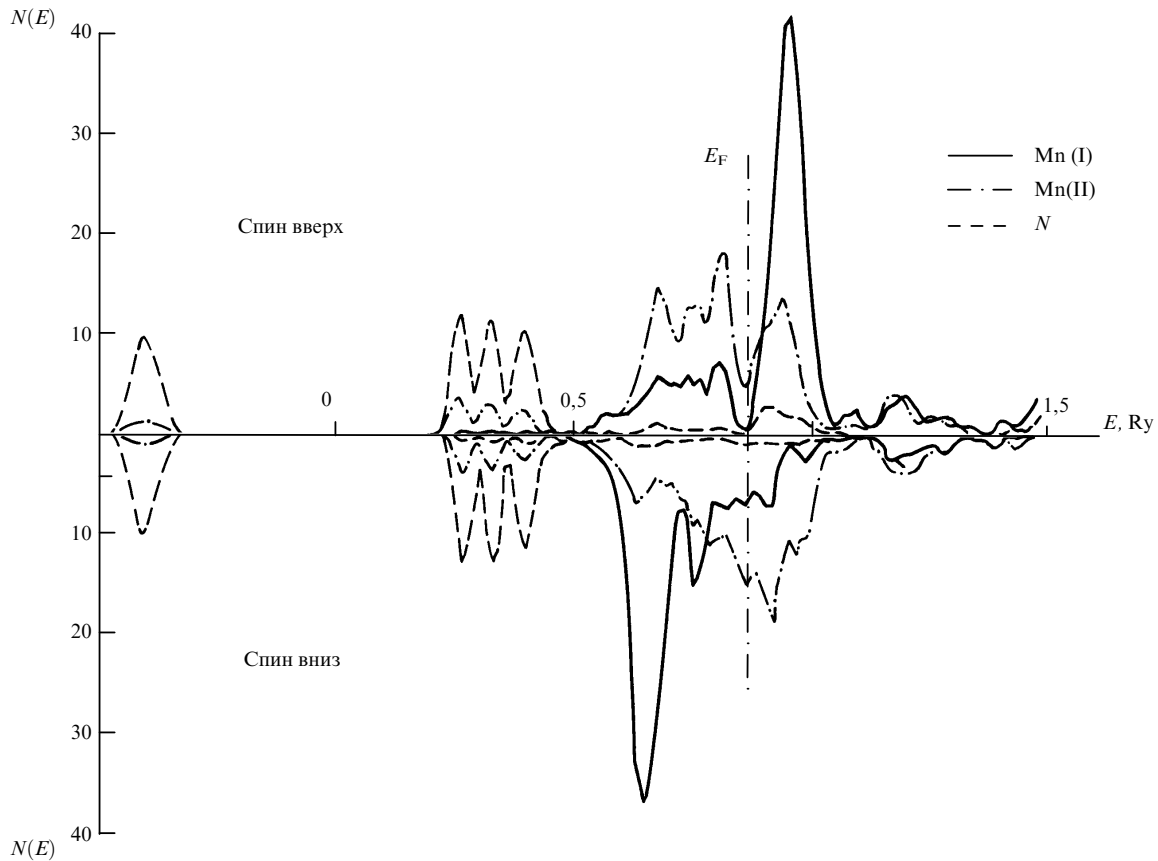


Рис. 4. Парциальные плотности состояний (1/Ry атом) для  $Mn_4N$  [30]

С самого начала исследований электронной структуры ПМФ особое внимание уделялось вопросу о ее взаимосвязи с магнитооптическими свойствами. В первых работах по ПМФ [10, 11] было отмечено, что резкое различие состояний со спином вниз и вверх вблизи уровня Ферми приводит к асимметрии оптических переходов и способствует большим значениям керровского вращения. Рассмотрим этот вопрос, основываясь на результатах более поздних работ [19, 43].

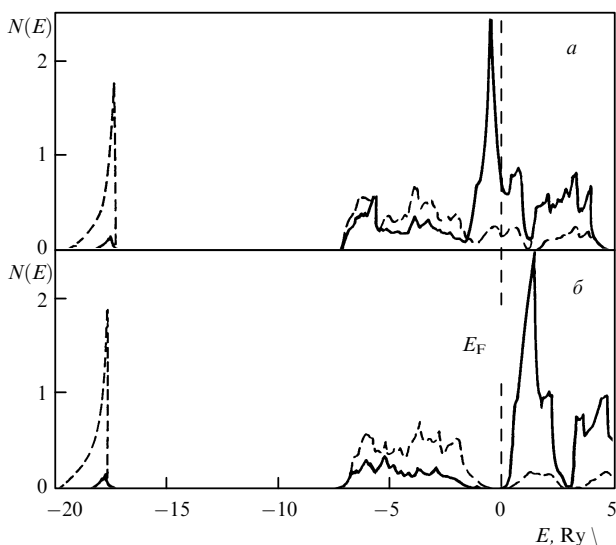


Рис. 5. Парциальные плотности состояний (1/eV атом, энергия в eV) для  $CrO_2$  [16]. Сплошная линия — 3d-состояния Cr, точки и пунктир — 2s- и 2p-состояния кислорода. а — Спин вверх. б — Спин вниз

При отражении от магнитной среды с комплексным показателем преломления  $\tilde{n} = n + ik$  и недиагональной проводимостью

$$\tilde{\sigma}_{xy} = \sigma_{1xy} + i\sigma_{2xy}$$

свет с частотой  $\omega$  меняет свою плоскость поляризации на керровский угол

$$\theta_K = \frac{4\pi}{\omega} \frac{A\sigma_{2xy} + B\sigma_{1xy}}{A^2 + B^2}, \quad (2.1)$$

где

$$A = n^3 - 3nk^2 - n, \quad B = -k^3 + 3n^2k - k.$$

Таким образом, при слабом затухании ( $k \ll n$ ) значение  $\theta_K$  определяется главным образом величиной  $\sigma_{2xy}$ , выражение для которой было получено Аргиресом [44]. Для простейшего случая кубической структуры с вектором намагниченности, параллельным плоскости [001], имеем [19]

$$\sigma_{2xy} = \frac{\pi}{\omega} \sum_{\mathbf{k}, m \neq m'} \left[ F_{m'm}^{xy}(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}m'\uparrow} (1 - n_{\mathbf{k}m\uparrow}) \delta(\omega - \omega_{mm'\uparrow}(\mathbf{k})) - F_{m'm}^{xy}(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}m\downarrow} (1 - n_{\mathbf{k}m\downarrow}) \delta(\omega - \omega_{mm'\downarrow}(\mathbf{k})) \right], \quad (2.2)$$

где используются атомные единицы,  $\mathbf{k}$  — квазиимпульс,  $\sigma$  — проекция спина,  $m$  — зонный индекс,  $\omega_{mm'\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}m\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}m'\sigma}$  — частота межзонных переходов,  $n_{\mathbf{k}m\sigma} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}m\sigma})$  — фермиевская функция распределения,

$$F_{m'm\sigma}^{xy}(\mathbf{k}) = 2i \sum_{m''} \left[ \frac{(L_{m''m}^z)^*}{\omega_{m''m}} P_{m''m}^x P_{mm''}^y + \frac{L_{m''m}^z}{\omega_{m''m}} P_{m''m}^x P_{m'm}^y \right], \quad (2.3)$$

$$p_{m'm}^\alpha = \langle m' \mathbf{k} \sigma | -i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} | m \mathbf{k} \sigma \rangle, \quad L_{m'm}^z = \langle m' \mathbf{k} \sigma | \xi L^z | m \mathbf{k} \sigma \rangle; \quad (2.4)$$

$L^z$  —  $z$ -проекция оператора орбитального момента,  $\xi = (2/rc^2)\partial V_{\text{eff}}/\partial r$ ,  $V_{\text{eff}}$  — эффективный потенциал, действующий на электроны проводимости.

Из формулы (2.2) видно, что если спектр  $\varepsilon_{km\sigma}$  слабо зависит от  $\sigma$  в слое толщиной  $\omega$  вблизи  $E_F$ , то происходит почти полная компенсация первого и второго членов в квадратных скобках. Напротив, в случае ПМФ при  $\omega \leq \Delta_\sigma$  ( $\Delta_\sigma$  — щель для проекции спина  $\sigma$ ) соответствующий член в (2.2) исчезает, так что следует ожидать больших значений  $\sigma_{2xy}$  и керровского вращения. Действительно, в системе  $\text{NiMnSb}_{1-x}\text{Sn}_x$  интенсивности пиков в частотной зависимости  $\theta_K$  резко уменьшаются с ростом  $x$ , т.е. при выходе уровня Ферми из щели [15].

В ряду гейслеровых сплавов  $\text{Co}_2\text{YZ}$  полуметаллический ферромагнетик  $\text{Co}_2\text{MnSn}$  имеет самые большие значения  $\sigma_{2xy}(\omega)$  на малых частотах [45] (рис. 6). В то же время, поскольку появление энергетической щели для состояний со спином вниз (не обязательно расположенной на  $E_F$ ), по-видимому, типично для всего ряда, при  $\omega \geq 1,5$  эВ (т.е. порядка характерного расстояния от щели до уровня Ферми) качественные отличия  $\text{Co}_2\text{MnSn}$  от остальных гейслеровых сплавов этой серии отсутствуют.

Согласно (2.3) угол  $\theta_K$  пропорционален спин-орбитальному взаимодействию, т.е. возрастает для тяжелых элементов. Поэтому можно ожидать, что ПМФ, содержащие платину, должны иметь большие величины  $\theta_K$ . Действительно, гигантские  $\theta_K \cong 2,5^\circ$  (для красного света), существенно превышающие значения для  $\text{NiMnSb}$ , наблюдались в соединении  $\text{PtMnSb}$  [11, 22] (см. результаты расчета на рис. 7). Отметим, однако, что согласно [21] основное различие в электронной структуре ПМФ  $\text{PtMnSb}$  и  $\text{NiMnSb}$ , обуславливающее меньшее значение  $\theta_K$  в последнем, связано не столько с величинами матричных элементов спин-орбиты, сколько со сдвигом некоторых энергетических уровней за счет "скалярных" релятивистских эффектов (зависимость массы от скорости и поправка Дарвина). В этом смысле простейшие представления о прямой связи между величинами спин-орбитального взаимодействия и керровского вращения оказываются не вполне адекватными.

Рекордные значения  $\theta_K$  могли бы наблюдаться в ферромагнитной фазе соединения  $\text{UNiSn}$  [19], однако экспериментально оно оказывается антиферромагнетиком [46, 47] (см. обсуждение в разделе 9). Тем не менее с этой точки зрения представляет интерес исследование изоструктурных ферромагнетиков, содержащих актиниды (например,  $\text{UCoSn}$ ,  $\text{PdUSn}$ ). Первопринципный расчет магнитооптических свойств  $\text{SrO}_2$  [43] дал весьма умеренные значения  $\theta_K$  ( $0,15^\circ$  для видимого света), что обусловлено малостью релятивистских эффектов (легкие атомы) и, следовательно, матричных элементов  $F^{xy}$  в (2.2). Сопоставление магнитооптических свойств с данными зонных расчетов для сплавов  $\text{Fe-Co}$  проведено в работе [48].

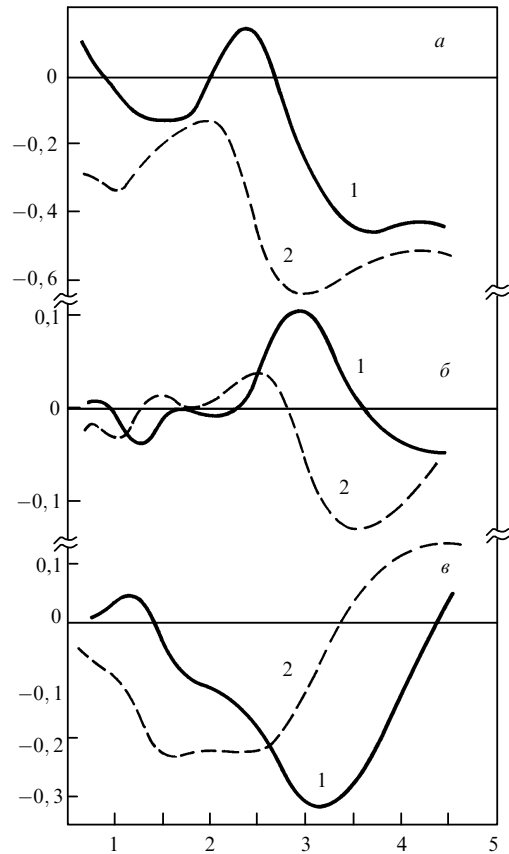


Рис. 6. Экспериментальные данные по зависимостям  $\omega^2 \text{Im} \varepsilon_{xy}(\omega)$  (линия 1) и  $-\omega^2 \text{Re} \varepsilon_{xy}(\omega)$  (2) в  $\text{T}_2\text{MnSn}$  [45]. T = Co (a), Ni (б) и Cu (в)

Заслуживает внимания вопрос об экспериментальном подтверждении расчетов электронной структуры ПМФ. Самой прямой проверкой такой картины спектра были

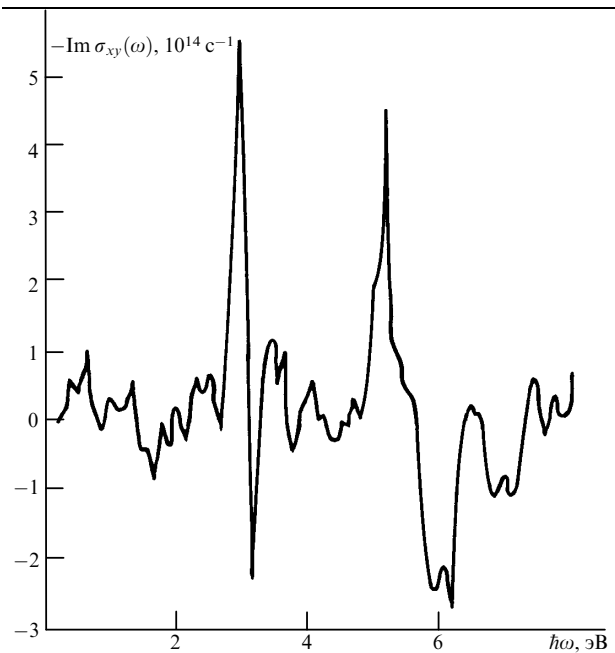


Рис. 7. Результаты расчета величины  $-\text{Im} \sigma_{xy}(\omega)$  (частота в эВ), определяющей керровское вращение, для  $\text{PtMnSb}$  [19]

бы, вероятно, исследования эффекта де Гааза–ван Альфена и сравнение экспериментально определенной и рассчитанной поверхностей Ферми. В настоящее время такие данные, к сожалению, отсутствуют. Результаты экспериментального исследования оптических свойств NiMnSb и PtMnSb [49] и CrO<sub>2</sub> [50], а также данные фотоэмиссии с угловым разрешением для PtMnSb [51], по утверждению авторов, находятся в хорошем согласии с результатами обработки зонных расчетов [9–11] и [16] (при этом в ряде случаев необходимо вносить поправки на спин-орбитальное взаимодействие, не учитываемое в расчетах).

Эксперименты по фотоэмиссии в CrO<sub>2</sub> [52] дали парадоксальный результат — отсутствие электронных состояний с обеими проекциями спина вблизи  $E_F$ , в то время как по всему комплексу свойств это соединение бесспорно является металлом (правда, с высоким электросопротивлением). Результат [52] может быть объяснен, например, эффектами поверхности. Альтернативное (и более интересное) объяснение состоит в учете эффектов конечного состояния. Известно, что CrO<sub>2</sub> является системой с сильными электронными корреляциями [53] (это подтверждается, например, наблюдением "хэббардовских" пиков поглощения в оптическом спектре [54]). Поэтому поле дырки, образующейся при фотоэмиссии и сильно взаимодействующей с остальными электронами, может быть достаточным для формирования локализованного состояния. Этот вопрос нуждается в дальнейшем исследовании.

### 3. Кинетические свойства и проблема спиновой поляризации

В обычных металлических ферромагнетиках вклады магнитного рассеяния в кинетические свойства при низких температурах определяются в основном одномагнитными процессами рассеяния. Эти процессы доминируют в температурном интервале

$$T^* \ll T < T_C, \quad T^* \sim \frac{I^2 S}{E_F^2} T_C, \quad (3.1)$$

где  $I$  — параметр s-d-обмена. При более низких температурах вклады одномагнитных процессов экспоненциально малы из-за невозможности переброса электрона через ферромагнитную щель  $\Delta$  при тепловых импульсах магнона. Однако, поскольку обычно  $|I| \ll E_F$ , интервал (3.1) охватывает практически всю спин-волновую область температур.

Рассмотрим соответствующий вклад в сопротивление, который возникает во втором порядке по  $I$ , используя формулу Мори [55]. Для обратного транспортного времени релаксации имеем

$$\frac{1}{\tau} = \int_0^\infty dt \left( [\hat{v}(t), H_{\text{int}}], [H_{\text{int}}, \hat{v}] \right) (\hat{v}, \hat{v})^{-1}, \quad (3.2)$$

где  $H_{\text{int}}$  — поперечная часть s-d-гамильтониана, описывающая процессы с переворотом спина,

$$\hat{v} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma},$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \mathbf{k}}$$

— оператор скорости электронов проводимости,

$$(A, B) = \int_0^{1/T} d\lambda (A \exp(-\lambda H) B \exp(\lambda H)).$$

Проводя вычисления, находим

$$\frac{1}{\tau} = 8\pi I^2 S \left[ \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}\sigma}^2 \left( \frac{-\partial n_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \right) \right]^{-1} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}\uparrow} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}'\downarrow})^2 \times \\ \times n_{\mathbf{k}\uparrow} (1 - n_{\mathbf{k}'\downarrow}) N_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) \quad (3.3)$$

( $n_{\mathbf{k}\sigma} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})$  и  $N_{\mathbf{q}} = N_B(\omega_{\mathbf{q}})$  — фермиевская и бозевская функции,  $\omega_{\mathbf{q}}$  — магнитная частота), что обобщает стандартный результат (см. [2]) на случай произвольных спектров  $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ . Для температурной зависимости сопротивления в интервале (3.1) получаем

$$\rho \sim I^2 N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F) \left( \frac{T}{T_C} \right)^2. \quad (3.4)$$

Таким образом, вклад (3.4) обращается в нуль для ПМФ. Аналогичным образом для них отсутствует вклад одномагнитных процессов в аномальный эффект Холла  $R_s(T) \sim aT^3 + bT^4$  [2, 56].

Итак, в магнитном рассеянии в ПМФ должны доминировать двухмагнитные процессы. Последние, как правило, приводят к более высоким степеням температуры (так, сопротивление пропорционально  $T^{7/2}$  [2]); кроме того, соответствующие вклады малы по формальным параметрам модели (например, по квазиклассическому параметру  $1/2S$ ). Поэтому следует ожидать значительных особенностей в температурной зависимости кинетических свойств ПМФ.

Экспериментальные исследования удельного электросопротивления  $\rho(T)$  и коэффициента спонтанного эффекта Холла  $R_s(T)$  в гейслеровых сплавах TMnSb ( $T = \text{Ni, Co, Pt, Cu, Au}$ ) и PtMnSn были выполнены в работах [57, 58]. Вклад одномагнитных процессов (порядка  $T^2$ ) в сопротивление ПМФ ( $T = \text{Ni, Co, Pt}$ ), действительно, не выделяется, в то время как зависимости  $\rho(T)$  у "обычных" ферромагнетиков являются значительно более крутыми (рис. 8).

С другой стороны, авторы [57, 58] обсуждают как проблему тот факт, что спиновая поляризация носителей тока

$$P(T) = \frac{n_{\uparrow}(T) - n_{\downarrow}(T)}{n_{\uparrow}(T) + n_{\downarrow}(T)}, \quad (3.5)$$

определенная из  $R_s(T)$  при не слишком низких температурах, оказывается пропорциональной намагниченности. Этот результат на первый взгляд кажется странным, поскольку из-за наличия энергетической щели величина  $n_{\downarrow}$  не должна зависеть от температуры вплоть до  $T_C$ .

С этой точки зрения представляют интерес результаты прямых измерений  $P(T)$ . Методом спин-поляризованной фотоэмиссии для NiMnSb в работе [59] вместо ожидаемой стопроцентной поляризации были получены лишь значения около 50%. Это противоречие, как мы

увидим ниже, может быть разрешено только при учете корреляционных эффектов.

**4. Магнитные свойства**

В таблице представлены основные магнитные характеристики для некоторых ПМФ, а также для сравнения — двух "обычных" ферромагнетиков Pd<sub>2</sub>MnSn и PtMnSn из серий гейслеровых сплавов T<sub>2</sub>MnZ [60–62] и TMnZ [63]. Все рассматриваемые системы характеризуются высокими значениями намагниченности насыщения и температуры Кюри. Сильный магнетизм гейслеровых сплавов в основном обусловлен локальными моментами достаточно удаленных друг от друга атомов марганца. Так, для Co<sub>2</sub>MnZ полный магнитный момент (4–5) $\mu_B$  на формульную единицу складывается из момента около 3 $\mu_B$  на атом Mn и менее 1 $\mu_B$  на атом Co [15]. Относительная близость парамагнитной и ферромагнитной температур Кюри свидетельствует о локализованном характере магнитных моментов. В то же время значения эффективных моментов выше T<sub>C</sub>, определенных из постоянной Кюри, достаточно сильно уменьшаются с ростом температуры [61–63]. При этом в сплавах ПМФ-типа экспериментально определенное отношение Вольфарта–Роудса p<sub>c</sub>/p<sub>s</sub> оказывается существенно меньше единицы. Напомним, что в модели Гейзенберга p<sub>c</sub>/p<sub>s</sub> = 1, а в слабых зонных магнетиках p<sub>c</sub>/p<sub>s</sub>  $\gg$  1 [3]. В обычных сильных зонных магнетиках с локальными моментами (например, в Fe и Ni) это отношение несколько больше единицы. Таким образом, выполнение неравенства p<sub>c</sub> < p<sub>s</sub> является ярким свойством ПМФ, которое можно использовать для их предварительной идентификации.

Значения магнитного момента в основном состоянии p<sub>s</sub>, определенного из намагниченности насыщения ( $\mu_0 = p_s \mu_B$ ), ферромагнитной и парамагнитной температур Кюри T<sub>C</sub> и  $\theta$  и парамагнитного момента p<sub>c</sub>, определенного из постоянной Кюри ( $C = \mu_{eff}^2/3 = p_c(p_c + 2)\mu_B^2/3$ ), в гейслеровых сплавах. Интервал значений двух последних величин соответствует изменению с повышением температуры

	p <sub>s</sub>	T <sub>C</sub> , К	$\theta$ , К	p <sub>c</sub>
Co <sub>2</sub> MnSi	5,10	1034	1044	2,03
Co <sub>2</sub> MnGe	4,66	905	890	2,61
Co <sub>2</sub> MnSn	5,37	826	870	3,35
Co <sub>2</sub> MnGa	4,09	695	770	3,28
CoMnSb	4,2	478	490–520	3,61–3,11
NiMnSb	4,2	728	780–910	3,31–2,06
PtMnSb	3,96	572	610–670	3,96–3,56
Pd <sub>2</sub> MnSn	4,22	189	201	4,05
PtMnSn	3,5	330	350	4,2

С точки зрения теории, температурная зависимость магнитного момента определяется конкуренцией двух противоположных тенденций. "Температурное индуцирование" момента [3] наиболее существенно в слабых зонных магнетиках, где в основном состоянии локализованные моменты отсутствуют. В ферромагнетиках с хорошо определенными локальными моментами имеется другой фактор: уменьшение их величины при разориентации [64, 65]. Цитируемые расчеты показывают, что это уменьшение является следствием изменения электронной структуры при повороте магнитных моментов. Можно думать, что в ПМФ такое изменение особенно существенно и имеет качественный характер

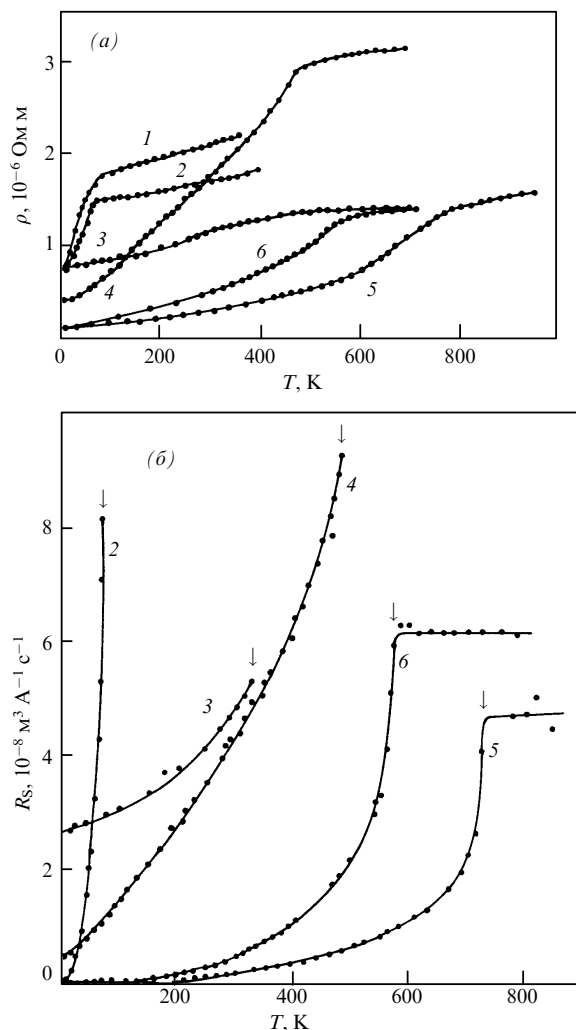


Рис. 8. Температурные зависимости электросопротивления (а) и коэффициента спонтанного эффекта Холла (б) в гейслеровых сплавах TMnSb (T = Cu (1), Au (2), Co (3), Ni (4), Pt (5)) и PtMnSb (6) [58]

(замытие гибридационной щели за счет спинового беспорядка). Многоэлектронный механизм подавления магнитных моментов обсуждается в следующем разделе. Отметим, что уменьшение момента с температурой может быть связано и с другими факторами. Так, различие p<sub>c</sub> = 3,4 и p<sub>s</sub> = 4,2 в гейслеровом сплаве Ni<sub>2</sub>MnGa [66] связывается с расщеплением состояний никеля (зонный эффект Яна–Теллера при переходе из высокотемпературной кубической фазы в тетрафазу).

Магнитные свойства CrO<sub>2</sub>, по-видимому, исследованы хуже, чем для гейслеровых сплавов. Тем не менее отметим, что магнитный момент насыщения с высокой точностью согласуется с атомным значением  $\mu_0 = 2\mu_B$  (p<sub>s</sub> = 2) для иона Cr<sup>4+</sup>. Это обстоятельство подтверждается зонным расчетом [16] и является нетривиальным для зонных магнетиков.

Как обсуждалось во введении, существенной особенностью ПМФ является малость затухания спиновых волн во всей зоне Бриллюэна из-за отсутствия стонеровского континуума. В настоящее время имеются экспериментальные данные по рассеянию нейтронов в гейслеровых сплавах Pd<sub>2</sub>MnSn, Ni<sub>2</sub>MnSn [67], Cu<sub>2</sub>MnAl [68]. Спиновые волны оказываются хорошо определенными во всей зоне Бриллюэна, что и является согласно [3]

критерием применимости модели локализованных моментов. С точки зрения зонной теории, малость затухания магновов может объясняться тем, что парциальные плотности d-состояний атомов Mn со спином вверх мала, поскольку соответствующая подзона почти заполнена [12]. Следует ожидать, что затухание будет еще меньше, если уровень Ферми для одной из проекций спина попадает в гибридизационную щель. Таким образом, целенаправленное экспериментальное исследование затухания спиновых волн при сопоставлении результатов для различных гейслеровых сплавов из серий  $T_2MnZ$ ,  $TMnZ$  представляет большой интерес для проверки теории.

Еще одним физическим свойством, где должна ярко проявляться специфика ПМФ, является скорость продольной ядерной магнитной релаксации  $1/T_1(T)$ . Для "обычных" металлических ферромагнетиков доминирующим является корринговский вклад электронов проводимости, выражение для которого согласно формуле Мориа имеет вид [3, 69, 70]

$$\frac{1}{T_1} = \pi \gamma_n^2 A^2 T F N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F) \quad (4.1)$$

( $\gamma_n$  — гиромагнитное отношение,  $A$  — константа сверхтонкого взаимодействия,  $F$  — фактор обменного усиления). Поскольку в ПМФ вклад (4.1) обращается в нуль (что, по существу, также следует из отсутствия процессов распада магнона на стонеровские возбуждения), можно ожидать для них существенных аномалий в температурной зависимости  $1/T_1(T)$ . (Теоретическая зависимость, которая имеет вид  $T^{5/2}$ , обсуждается ниже.) В то же время скорость поперечной ядерной релаксации содержит вклад от продольной восприимчивости и, следовательно, переходов внутри спиновых подзон (см. [70]):

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + \frac{\pi}{2} \gamma_n^2 A'^2 T F'(N_{\uparrow}^2(E_F) + N_{\downarrow}^2(E_F)), \quad (4.2)$$

т.е. линейный корринговский вклад имеется и в ПМФ. Пренебрегая для простоты зависимостью матричных элементов сверхтонкого взаимодействия от спина и обменным усилением, находим

$$\frac{1/T_2}{1/T_1} \simeq \frac{(N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F))^2}{4N_{\uparrow}(E_F)N_{\downarrow}(E_F)} \geq 1. \quad (4.3)$$

На эксперименте сильные отклонения от линейного закона Корринги наблюдались при измерении  $1/T_1$  в ПМФ NiMnSb [71]. При не слишком низких температурах  $T > 250$  К ( $T_C = 750$  К) была получена зависимость вида

$$\frac{1}{T_1(T)} = aT + bT^{3,8}.$$

В обсуждавшемся выше ферримагнетике  $Mn_4N$  с  $T_C = 720$  К ядерная магнитная релаксация исследовалась для позиции Mn(I) (только для нее была получена узкая линия ЯМР) [72]. При низких температурах  $T < 77$  К поведение  $1/T_1(T)$  оказалось линейным, а при более высоких температурах — приближенно квадратичным.

Механизмы ядерной магнитной релаксации в магнетите  $Fe_3O_4$  [73], который демонстрирует фервеевский переход с резким увеличением проводимости при

$T = 130$  К, по-видимому, являются достаточно сложными. "Металлический" ход скоростей релаксации (возрастание с температурой) имеет место выше 200 К. При этом отношение  $(1/T_2)/(1/T_1)$  примерно равно двум.

Указанные аномалии  $1/T_1$  были обнаружены до открытия ПМФ и не связывались с особенностями зонной структуры (отсюда, по-видимому, и стремление авторов [71] выделить линейный член). Поэтому большой интерес представляет целенаправленное исследование ядерной магнитной релаксации в соединениях, для которых предсказано состояние ПМФ, с целью проверки результатов зонных расчетов. Согласно формулам (4.1)–(4.3) существенное отличие корринговских вкладов в  $1/T_1$  и  $1/T_2$  должно наблюдаться и в "обычных" коллективизированных магнетиках, если вблизи уровня Ферми имеются пики плотности состояний, приводящие к сильному различию  $N_{\uparrow}(E_F)$  и  $N_{\downarrow}(E_F)$  в ферромагнитной фазе. Так, в железе и никеле  $1/T_2$  в несколько раз превышает  $1/T_1$  [70]. Отметим, что учет обменного усиления приводит к большему увеличению поперечной восприимчивости, т.е. дает тенденцию, противоположную наблюдаемой экспериментально.

## 5. Теоретическое описание энергетического спектра в рамках s-d-обменной модели и модели Хаббарда: неквазичастичные состояния

Как обсуждалось выше, реалистическая микроскопическая модель ПМФ должна учитывать гибридизацию s(p)- и d-состояний. Соответствующий гамильтониан можно записать в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + E_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma} + d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}) + U \sum_i d_{i\uparrow}^{\dagger} d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^{\dagger} d_{i\downarrow}. \quad (5.1)$$

Электронный и магнонный спектр в спин-волновой области температур в рамках обобщенной модели Андерсона (5.1) исследован в [74]. Однако при детальном обсуждении корреляционных эффектов удобно использовать более простые s-d-обменную модель и модель Хаббарда с невырожденной зоной проводимости и спиновым расщеплением, не зависящим от волнового вектора. В частности, эти модели получаются из (5.1) каноническим преобразованием в предельных случаях  $V_{\mathbf{k}} = \text{const}$ ,  $E_d \rightarrow -\infty$  и  $t_{\mathbf{k}} = \text{const}$  соответственно.

Вычисление одноэлектронных функций Грина в спин-волновой области температур в рамках s-d-обменной модели [2] в "паркетном" приближении с использованием диаграммной техники [75] и методом уравнений движения [36–38] дает

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = (E - t_{\mathbf{k}\sigma} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E))^{-1}, \quad (5.2)$$

$$t_{\mathbf{k}\sigma} = t_{\mathbf{k}} - \sigma I \langle S^z \rangle, \quad \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{2I^2 \langle S^z \rangle R_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{1 + \sigma I R_{\mathbf{k}\sigma}(E)}, \quad (5.3)$$

$$R_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{N_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}}{E - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + \omega_{\mathbf{q}}}, \quad (5.4)$$

$$R_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{1 + N_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}}{E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} - \omega_{\mathbf{q}}}.$$



Эти выражения являются точными при  $T = 0$  в пределе нулевой концентрации носителей тока, когда проблема, по существу, сводится к решению уравнения Шрёдингера для одного электрона, взаимодействующего с локализованными спинами [36, 76]. Полуметаллическое состояние описывается как "насыщенное" ферромагнитное состояние с большим спиновым расщеплением  $|\Delta| = 2|I|\langle S^z \rangle > E_F$ , т.е.  $n_{k\downarrow} = 0$  (или с  $n_{k\uparrow} = 0$  в s-d-модели с  $I < 0$ ). В s-d-модели такая ситуация соответствует, в частности, вырожденным ферромагнитным полупроводникам [37]. Аналогичные результаты в модели Хаббарда [40, 77] получаются заменой  $I$  на параметр внутриатомного кулоновского взаимодействия  $U$ . Важно подчеркнуть, что функция Грина (5.2), как и функция Грина приближения "Хаббард-I" [78], правильно дает атомный предел. В то же время при малых  $U$  она корректно воспроизводит приближение Хартри-Фока.

Рассмотрим теперь движение носителей тока в модели Хаббарда с почти наполовину заполненной зоной проводимости в пределе сильных корреляций, когда, согласно теореме Нагаока [79], основное состояние для простых решеток заведомо является насыщенным ферромагнитным. Гамильтониан Хаббарда при  $U \rightarrow \infty$ ,  $n < 1$ , когда двукратно занятые состояния (двойки) запрещены, в представлении многоэлектронных  $X$ -операторов  $X_i^{\alpha\beta} = |\alpha\rangle\langle\beta|$  принимает вид

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{0\sigma} X_j^{\sigma 0} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0}, \quad (5.5)$$

где  $|\sigma\rangle$  — однократно занятые состояния с проекцией спина  $\sigma$  на узле  $i$ ,  $|i0\rangle$  — пустые состояния (дырки),  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t_{\mathbf{k}}$ . Рассмотрим функции Грина

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E. \quad (5.6)$$

Для  $\sigma = \uparrow$  при  $T = 0$  носители тока распространяются свободно, а температурные поправки к спектру пропорциональны  $T^{5/2}$ . Более интересной является ситуация в случае  $\sigma = \downarrow$ , где вычисление дает [40, 41]

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \left[ E - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \left( \tilde{G}_{\mathbf{k}\downarrow}^{(0)}(E) \right)^{-1} \right]^{-1}, \quad (5.7)$$

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}\downarrow}^{(0)}(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{N_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}}, \quad (5.8)$$

причем  $n_{\mathbf{k}} = \langle X_{-\mathbf{k}}^{0+} X_{\mathbf{k}}^{+0} \rangle = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ . Отметим, что результат (5.7) совпадает с (5.2) в пределе  $U \rightarrow \infty$  после перехода от электронов к дыркам.

Выражение (5.8) определяет функцию Грина в низшем порядке по  $c = 1 - n$ , так что электронные состояния формально описываются разрезом и имеют незонную (чисто неполюсную) природу. Подобная ситуация имеет место и для полной функции Грина (5.7), поскольку при малых  $c$  она не имеет полюсов ниже  $E_F$  на вещественной оси. Соответствующая одночастичная функция распределения слабо зависит от  $\mathbf{k}$ :  $\langle X_{-\mathbf{k}}^{0-} X_{\mathbf{k}}^{-0} \rangle \cong c$ . Состояния, обладающие таким свойством, не переносят тока, как следует из общего рассмотрения действия электрического поля на многоэлектронную систему [80] (см. также явную оценку подвижности в [41]). Рассматриваемые неквазичастичные состояния не вносят вклад в плотность состояний на  $E_F$  при  $T = 0$ . В то же время,

как будет показано ниже, они дают вклад в линейный член в электронной теплоемкости. Следует отметить, что аналогичные свойства (кроме условия  $\delta N(E_F) = 0$ ) были постулированы Андерсоном для спинов — нейтральных фермиевских возбуждений в состоянии резонирующих валентных связей (RVB), не обладающем дальним магнитным порядком (имеется в виду "бесщелевой" вариант теории RVB). Согласно [81] спины могут быть описаны функцией Грина с нулевым вычетом. Выше мы фактически продемонстрировали существование подобных состояний в узкозонном хаббардовском ферромагнетике.

При возрастании  $c$  функция Грина (5.7) приобретает вещественный полюс ниже  $E_F$  спин-поляронного типа, так что насыщенный ферромагнетизм разрушается [77]. Вопрос об эволюции магнитного состояния является достаточно сложным. В частности, в [82] на основании анализа высших порядков в газовом приближении диаграммным методом было сделано заключение о наличии антиферромагнитной нестабильности. Обсуждаемое в разделе 7 интерполяционное описание дает переход в ненасыщенное ферромагнитное состояние, причем природа состояний со спином вниз изменяется — они грубо описываются приближением "Хаббард-I" [78]

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = (n_0 + n_{\sigma}) [E - (n_0 + n_{\sigma})\varepsilon_{\mathbf{k}}]^{-1}, \quad n_{\sigma} = \langle X_i^{\sigma\sigma} \rangle, \quad (5.9)$$

т.е. образуют суженные зоны квазичастичного типа.

Учитывая температурную зависимость намагниченности

$$\langle S^z \rangle = S - \sum_{\mathbf{p}} N_{\mathbf{p}}$$

и пренебрегая для простоты "паркетными" знаменателями в (5.3) (более строгие вычисления проведены в [36, 37]), находим для поправки к электронному спектру

$$\delta E_{\mathbf{k}\sigma} = \sigma I \sum_{\mathbf{q}} \frac{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}}}{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}} + \sigma \Delta} N_{\mathbf{q}} \sim \left( \frac{T}{T_C} \right)^{5/2}. \quad (5.10)$$

В то же время вычеты одноэлектронной функции Грина

$$Z_{\mathbf{k}\sigma} = \left( 1 - \frac{\partial}{\partial E} \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) \Big|_{E=t_{\mathbf{k}\sigma}} \right)^{-1} \quad (5.11)$$

имеют более сильную зависимость  $T^{3/2}$  (такую же, как у намагниченности), которая проявляется в парциальных спиновых плотностях состояний и числах заполнения. Разлагая уравнение Дайсона (5.2), находим

$$N_{\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \rho_{\sigma}(E) - \sum_{\mathbf{k}} \delta'(E - t_{\mathbf{k}\sigma}) \times \\ \times \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) - \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{(E - t_{\mathbf{k}\sigma})^2}, \quad (5.12)$$

где

$$\rho_{\sigma}(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t_{\mathbf{k}\sigma})$$

— плотность состояний в приближении Хартри-Фока-Стонара. Третий член в (5.12), возникающий из разреза собственной энергии, описывает обусловленный электрон-магнонным рассеянием некогерентный вклад неква-

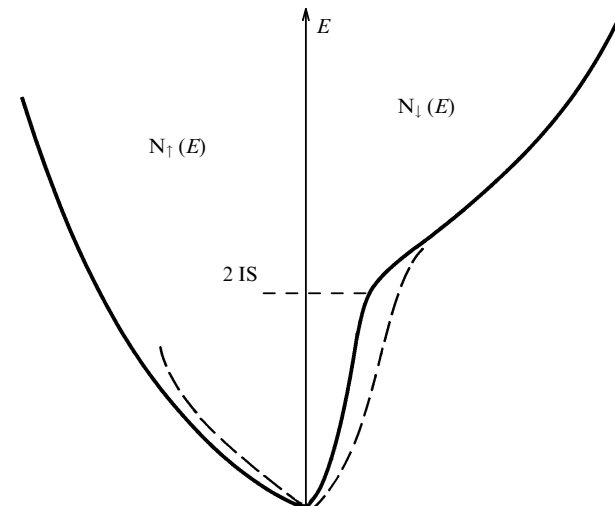


Рис. 9. Плотность состояний в s-d-модели в случае пустой зоны проводимости ( $I > 0$ ). При  $T = 0$  (сплошная линия) спин-поляронный хвост состояний со спином вниз простирается до дна зоны. Пунктир — конечные температуры

зичастичных состояний  $\delta N_{\sigma}(E)$ . Легко видеть, что последний отличен от нуля в области энергий, соответствующей спиновой подзоне с противоположным значением проекции спина  $-\sigma$ . Таким образом, обсуждаемая картина плотности состояний существенно отличается от стонеровской. Сохраняя только магнронные вклады, с точностью до членов порядка  $T^{3/2}$  в ведущем порядке по параметру  $1/2S$ , находим для электронных чисел заполнения [37]

$$\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \cong \frac{S + \langle S^z \rangle}{2S} n_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{S - \langle S^z \rangle}{2S} n_{\mathbf{k}, -\sigma}. \quad (5.13)$$

Мы видим, что, несмотря на присутствие спинового расщепления, электронные числа заполнения имеют сильную температурную зависимость  $T^{3/2}$  в отличие от экспоненциальной в теории Стонера. Формально вклады порядка  $T^{3/2}$  возникают вследствие как температурной зависимости вычетов функций Грина, так и возникновения неквазичастичных состояний в "чужой" спиновой подзоне.

Теперь мы можем решить сформулированную выше проблему спиновой поляризации в ПМФ. Сильная температурная зависимость вычета гриновской функции

нижней спиновой подзоны и рост с повышением температуры "хвоста" неквазичастичных состояний из верхней спиновой подзоны (рис. 9) приводит в (3.5) к зависимости  $P(T) \sim \langle S^z \rangle$ . В рамках обычной модели Хаббарда этот результат является тривиальным, поскольку электроны, ответственные за магнитный момент, одновременно формируют зонную структуру вблизи уровня Ферми. Однако он справедлив и для s-d(f)-модели, где носители тока и магнитные моменты относятся к разным энергетическим зонам (например, в случае ферромагнитных полупроводников [37, 83, 84], в которых такая зависимость  $P(T)$  наблюдается в экспериментах по полевой эмиссии [85]).

Обсуждавшиеся выше данные по сопротивлению и эффекту Холла [57, 58] показывают, что спиновая поляризация в гейслеровых сплавах, действительно, ведет себя, как относительная намагниченность. На основании этого в указанных работах был сделан вывод, что гейслеровы сплавы должны описываться моделью сильной связи (носители тока жестко связаны с локальными моментами). Как следует из нашего рассмотрения, такое предположение не является обязательным.

Более сложным является вопрос о возможности деполяризации электронов проводимости в полуметаллических ферромагнетиках при  $T = 0$ . Рассмотрим поведение спиновой поляризации

$$P(E) = |N_{\uparrow}(E) - N_{\downarrow}(E)| \cdot |N_{\uparrow}(E) + N_{\downarrow}(E)|^{-1} \quad (5.14)$$

в рамках s-d-модели. Если пренебречь магнронными частотами в знаменателе в (5.4), то из-за наличия фермиевских функций парциальная плотность состояний с "неправильной" проекцией спина  $\sigma = -\text{sign } I$  должна скачком появляться выше ( $I > 0$ ) или ниже ( $I < 0$ ) уровня Ферми (рис. 10, 11). Учет магнронных частот  $\omega_{\mathbf{q}} = Dq^2$  приводит к размытию этой особенности на интервале, определяемом максимальной магнронной частотой. Если  $|E - E_F|$  мало по сравнению с  $\bar{\omega} = D(6\pi^2/v_0)^{2/3}$  ( $v_0$  — объем элементарной ячейки), мы получаем [37, 77]

$$\frac{N_{-\alpha}(E)}{N_{\alpha}(E)} = \frac{1}{S} \left| \frac{E - E_F}{\bar{\omega}} \right|^{3/2} \theta(\alpha(E - E_F)), \quad \alpha = \text{sign } I, \quad (5.15)$$

где  $\theta(x)$  — функция Хевисайда. С удалением от  $E_F$  величина (5.15) выходит на константу, пропорциональную  $I^2$  в случае слабого s-d-обмена (оценка для ферро-

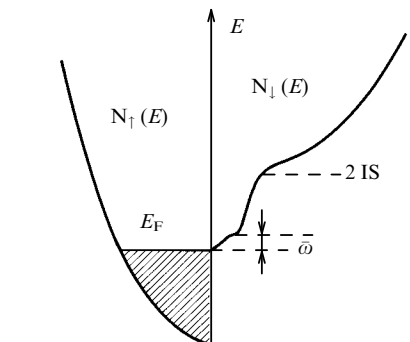


Рис. 10. Плотность состояний в полуметаллическом ферромагнетике с  $I > 0$ . Неквазичастичные состояния с  $\sigma = \downarrow$  отсутствуют ниже уровня Ферми

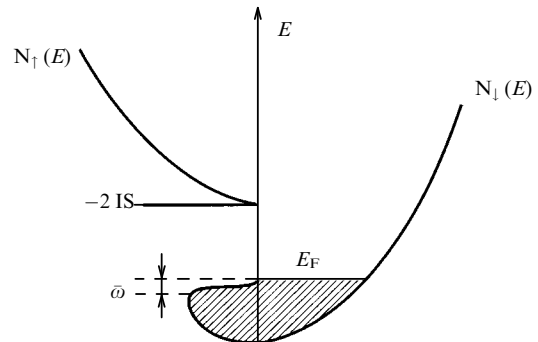


Рис. 11. Плотность состояний в полуметаллическом ферромагнетике с  $I < 0$ . Неквазичастичные состояния с  $\sigma = \uparrow$  появляются ниже уровня Ферми

магнитных полупроводников дает  $1 - P \cong 4\%$  [84]). В пределе сильной связи  $|J| \rightarrow \infty$  имеем

$$\frac{N_{-\alpha}(E)}{N_{\alpha}(E)} = \frac{1}{2S} \theta(\alpha(E - E_F)), \quad |E - E_F| \gg \bar{\omega}. \quad (5.16)$$

Таким образом, спиновая поляризация  $P(E)$  резко изменяется вблизи уровня Ферми. В случае антиферромагнитного s-d-обмена вблизи  $E_F$  имеются занятые неквазичастичные состояния, так что деполяризация может быть обнаружена при измерении фотоэмиссии. При  $I > 0$  неквазичастичные состояния пусты и могут наблюдаться в экспериментах по обратной фотоэмиссии.

В "широкозонной" модели Хаббарда при  $T = 0$  неквазичастичные состояния лежат, как и в s-d-модели с  $I > 0$ , выше уровня Ферми, так что деполяризация занятых состояний отсутствует. Однако ситуация изменяется в узкозонном пределе ( $U \rightarrow \infty$ ). Рассмотрим для наглядности зону с заполнением  $n > 1$  и концентрацией двоек  $c = n_2 = n - 1 \ll 1$ . Тогда носителями тока являются бесспиновые двойки, а электроны со спином вверх и спином вниз могут быть "извлечены" в эмиссионных экспериментах с равной вероятностью. С другой стороны, согласно принципу Паули, состояния выше уровня Ферми для двоек могут быть заполнены только электронами со спином вниз. Эти заключения подтверждаются непосредственным вычислением одночастичных функций Грина [41] (ср. с (5.8) для случая  $0 < 1 - n \ll 1$ ). В результате находим

$$N_{\uparrow}(E) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} f(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(E - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}) = \begin{cases} N_{\downarrow}(E), & E_F - E \gg \bar{\omega}, \\ 0, & E > E_F, \end{cases} \quad (5.17)$$

что согласуется с (5.15) для  $\alpha = -$ ,  $S = 1/2$ . Мы видим, что ниже  $E_F$  спиновая поляризация отсутствует за исключением узкого слоя шириной  $\bar{\omega}$ , так что эксперименты с не слишком высоким разрешением по энергии должны давать малые значения  $P$ . Реальные значения параметров модели, по-видимому, являются промежуточными между широкозонным и узкозонным случаями и поэтому значительные отклонения  $P(T = 0)$  от 100%, вообще говоря, неудивительны. Отметим, что учет поверхностных эффектов не изменяет качественно роль неквазичастичного вклада в  $P(E)$  [124].

Вычисление коммутаторной магнонной функции Грина дает [40, 86]

$$\langle\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \left[ \omega - I \sum_{\mathbf{k}} \frac{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}} - \omega}{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}} + \Delta - \omega} \times \right. \\ \left. \times (n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}) - \Pi_{\mathbf{q}}^{(2)}(\omega) \right]^{-1}, \quad (5.18)$$

где вклад двухмагнонных процессов в поляризационный оператор равен

$$\Pi_{\mathbf{q}}^{(2)}(\omega) = I^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \left( \frac{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}} - \omega}{t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}} + \Delta - \omega} \right)^2 \times \\ \times \left( B(\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{p}\uparrow, \omega_{\mathbf{p}} - \omega) + \right. \\ \left. + B(\mathbf{k} + \mathbf{p}\downarrow, \mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow, \omega_{\mathbf{p}} - \omega) - \right.$$

$$\left. - B(\mathbf{k} + \mathbf{p}\downarrow, \mathbf{k}\uparrow, \omega_{\mathbf{p}}) - B(\mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow, \mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{p}\uparrow, \omega_{\mathbf{p}}) \right), \quad (5.19)$$

$$B(\mathbf{k}'\sigma', \mathbf{k}\sigma, \omega) = \frac{N_{\mathbf{p}}(n_{\mathbf{k}'\sigma'} - n_{\mathbf{k}\sigma}) + n_{\mathbf{k}'\sigma'}(1 - n_{\mathbf{k}\sigma})}{\omega - t_{\mathbf{k}'\sigma'} + t_{\mathbf{k}\sigma}}.$$

Затухание спиновых волн, обусловленное одномагнонными процессами, определяется мнимой частью второго члена в скобках в (5.18)

$$\gamma_{\mathbf{q}}^{(1)}(\omega) \cong \pi I \Delta \omega \sum_{\mathbf{k}} \left( -\frac{\partial n_{\mathbf{k}\uparrow}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}} \right) \delta(\omega - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} + t_{\mathbf{k}\uparrow}) = \\ = 2\pi I^2 S \omega N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F) \theta(\omega - \omega_-), \quad (5.20)$$

где  $\omega_-$  — пороговая частота, определяемая условием вхождения в стонеровский континуум. Наличие затухания магновов при  $T = 0$  приводит к возникновению логарифмического вклада в функцию распределения магновов и, следовательно, в намагниченность основного состояния

$$\delta \langle S^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^0 \frac{\gamma_{\mathbf{q}}^{(1)}(\omega) d\omega}{(\omega - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\gamma_{\mathbf{q}}^{(1)}(\omega))^2} \cong \\ \cong -2I^2 S N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F) \ln \frac{W}{\bar{\omega}}, \quad (5.21)$$

где  $W$  порядка ширины зоны. Как подробно обсуждается в [87–90], это подавление момента аналогично кондовской компенсации для одиночной примеси, причем наличие спиновой динамики приводит к обрезанию логарифмических расходимостей не на температуре, а на характерной энергии магнона  $\bar{\omega}$ . Такой механизм уменьшения момента имеет место не только в кондовских системах, но и в любых магнетиках с локальными моментами, в том числе описываемых моделью Хаббарда.

В ПМФ выражение (5.20) обращается в нуль и затухание магновов определяется мнимой частью (5.19). Интегрирование дает [86, 91]

$$\gamma_{\mathbf{q}}^{(2)}(\omega_{\mathbf{q}}) = \frac{q^4 v_0^2 (k_{F\uparrow}^2 + k_{F\downarrow}^2)}{48\pi^3 \langle S^z \rangle^2} \times \begin{cases} \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{35}, & T \ll \omega_{\mathbf{q}}, \\ \frac{T}{4} \left( \ln \frac{T}{\omega_{\mathbf{q}}} + \frac{5}{3} \right), & T \gg \omega_{\mathbf{q}}. \end{cases} \quad (5.22)$$

Затухание (5.22) очень мало как численно, так и по формальным параметрам. Можно показать [39], что оно не меняет намагниченность при  $T = 0$ , а приводит лишь к перенормировке блоховского  $T^{3/2}$ -члена.

Таким образом, в ПМФ в отличие от "обычных" зонных магнетиков "кондовская" компенсация момента в упорядоченной фазе отсутствует (точнее, логарифмы обрезаются на ширине энергетической щели). Можно ожидать, что такая ситуация сохраняется и выше  $T_C$ , если имеет место достаточно сильный ближний магнитный порядок и электронная структура слабо изменяется при переходе через  $T_C$ . Однако при достаточно высоких  $T$  "локальные" плотности состояний  $N_{\sigma}(E)$  должны сравняться, что приведет к достаточно сильному уменьше-

нию величины магнитного момента типа (5.21). Возможно, этот механизм дает вклад в уменьшение эффективного момента с температурой, наблюдаемое в гейслеровых сплавах (см. раздел 4).

Вещественная часть выражения (5.18) определяет наряду со спин-волновыми вкладами порядка  $T^{5/2}$  неаналитическую многоэлектронную поправку к константе спин-волновой жесткости [39, 40]. Для квадратичного закона дисперсии  $t_{\mathbf{k}} = k^2/2m$

$$\delta D = \left( \frac{\pi v_0}{12m \langle S^z \rangle} \right)^2 \frac{T^2}{D} \left[ \left( N_{\uparrow}^2(E_F) + N_{\downarrow}^2(E_F) \right) \ln \frac{T}{\omega_{\pm}} - 2N_{\uparrow}(E_F)N_{\downarrow}(E_F) \ln \frac{\max(\omega_{\pm}, T)}{\omega_{\pm}} \right],$$

$$\omega_{\pm} = D(k_{F\uparrow} - k_{F\downarrow})^2. \quad (5.23)$$

Эта поправка доминирует над поправкой от температурной зависимости фермиевских функций порядка  $T^2$  и особенно велика в ПМФ.

Обсудим теперь скорость продольной ядерной релаксации [3]

$$\frac{1}{T_1} = -\frac{A^2 T}{2\pi\omega_n} \text{Im} \sum_{\mathbf{q}} \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega} \quad (5.24)$$

( $\omega_n \ll T$  — частота ЯМР). В ПМФ следует рассмотреть вклад двухмагнанных процессов (5.18). В модели Хаббарда ( $I \rightarrow U$ ) находим [40, 92]

$$\frac{1}{T_1} = -\frac{A^2 \langle S^z \rangle}{\pi\omega_n} \sum_{\mathbf{q}} \text{Im} \frac{\Pi^{(2)}(\mathbf{q}, \omega_n)}{\omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{12\sqrt{\pi}}{\langle S^z \rangle} \left( \frac{v_0}{16\pi^2} \right)^2 \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left( k_{F\uparrow}^2 + k_{F\downarrow}^2 \right) \frac{T^{5/2}}{D^{7/2}}. \quad (5.25)$$

Качественно температурная зависимость  $T^{5/2}$  может быть понята на основе формулы Мориа (4.1), если заменить в ней  $N_{\downarrow}(E_F)$  на тепловое значение плотности неквaziчастичных состояний порядка  $T^{3/2}/D^{3/2}E_F$ . В то же время на коэффициент в (5.25) существенно влияют не только значения плотностей состояний, но и фактор обменного усиления  $F$ , который в данном случае определяется вкладом коллективной магнонной моды (ср. с обсуждением в [3] случая слабых зонных магнетиков, где вследствие парамагнетного усиления также  $F \gg 1$ ). Таким образом, продольную ядерную релаксацию в ПМФ, наряду со спиновой поляризацией эмиттированных электронов, следует считать одним из свойств, существенно определяющихся неквaziчастичными состояниями.

## 6. Неквaziчастичные вклады в электронную теплоемкость и кинетические свойства

В феноменологической теории ферромагнитной фермижидкости [93], как и в стандартной фермижидкостной теории [94], предполагается, что многоэлектронные эффекты приводят лишь к перенормировке плотности состояний  $N(E_F)$  и фермижидкостных параметров. Рассмотрим соответствующий вклад спиновых флуктуаций в теплоемкость ферромагнетика. Используя (5.11), (5.3)

для перенормировки эффективной массы и, следовательно, теплоемкости в модели Хаббарда, находим [40]

$$\frac{m_{\sigma}^*}{m_{\sigma}} = \frac{1}{Z_{kF\sigma}} = 1 + U\Delta \frac{N_{-\sigma}(E_F)}{\omega_{+} - \omega_{-}} \ln \frac{\omega_{+}}{\omega_{-}} \quad (6.1)$$

(обозначения те же, что и в (5.23)). В частности, в случае слабого зонного магнетика имеем

$$\ln \frac{\omega_{+}}{\omega_{-}} \cong -2 \ln \alpha, \quad 0 < \alpha = UN(E_F) - 1 \ll 1, \quad (6.2)$$

и выражение (6.1) описывает парамагнетное усиление. В случае ПМФ усиление такого типа отсутствует. Оказывается, что в электронной теплоемкости проводящих ферромагнетиков имеются вклады совершенно другого типа, которые имеют неквaziчастичное происхождение [40].

В рамках s-d-модели имеем

$$C(T) = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int dE E f(E) N(E) = \frac{\pi^2}{3} N(E_F) T + \int dE E f(E) \frac{\partial N(E, T)}{\partial T}. \quad (6.3)$$

Первый член в (6.3) дает стандартный результат для электронной теплоемкости, а второй член обусловлен температурной зависимостью плотности состояний. Подставляя (5.3) в последний член (5.12), находим

$$\delta C_{\sigma}(T) = 2I^2 \langle S^z \rangle \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \frac{\sigma f(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma} - \sigma\omega_{\mathbf{q}})}{(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma} - t_{\mathbf{k}\sigma})^2} \frac{\partial}{\partial T} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}. \quad (6.4)$$

(Напомним, что для модели Хаббарда  $I \rightarrow U > 0$ .) При низких температурах

$$f(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} - \omega_{\mathbf{q}}) = 1, \quad f(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + \omega_{\mathbf{q}}) = 0. \quad (6.5)$$

Таким образом, неквaziчастичные состояния с  $\sigma = \downarrow$  не вносят вклад в линейный член в теплоемкости, поскольку они пусты при  $T = 0$ . Для  $\sigma = \uparrow$  получаем

$$\delta C_{\uparrow} = \frac{2\pi^2}{3} I^2 \langle S^z \rangle N_{\downarrow}(E_F) T \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(t_{\mathbf{k}\uparrow} - E_F)^2}. \quad (6.6)$$

Следует подчеркнуть, что наличие вклада (6.6) означает недостаточность фермижидкостного описания лишь в терминах динамических квазичастиц, определяемых через полюса функций Грина. В то же время энтропия взаимодействующих фермионов при низких  $T$  строго выражается через функции распределения статистических квазичастиц со спектром, определенным, как вариационная производная полной энергии. Аномальный член в теплоемкости определяется различием спектра статистических и динамических квазичастиц. В парамагнитной фазе он возникает в третьем порядке по  $U$  [95].

Выделение неквaziчастичных вкладов является наиболее четким в случае насыщенного ферромагнетика. В s-d-модели с  $I < 0$ , где  $N_{\uparrow}(E_F) = 0$ , выражение (6.6) дает единственный вклад от состояний со спином вверх в теплоемкость. В s-d-модели с  $I > 0$  и модели Хаббарда ( $N_{\downarrow}(E_F) = 0$ ) неквaziчастичные вклады отсутствуют. Рассмотрение ненасыщенного случая более сложно, поскольку плотность состояний с проекцией спина, соответствующей верхней спиновой подзоне,

содержит ниже  $E_F$  вклады как от полюсов, так и от разрезов.

Ситуация в хаббардовском ферромагнетике изменяется, если мы рассмотрим почти наполовину заполненную зону с сильными корреляциями ( $U \rightarrow \infty$ ). В этом случае следует перейти к дырочному представлению (или к представлению "двоек" при  $n > 1$ ), и модель Хаббарда имеет свойства, близкие к свойствам s-d-модели с  $I < 0$ . Неквазичастичные "дырочные" состояния, описываемые операторами рождения  $X^{0-}$ , оказываются занятыми, а в случае насыщенного ферромагнетизма они являются единственными состояниями с  $\sigma = \downarrow$ , вносящими вклад в линейную теплоемкость, так как соответствующая одночастичная функция Грина не имеет полюсов внутри поверхности Ферми дырок.

Рассмотрим вначале неквазичастичный вклад в  $C$  в рамках теории возмущений по  $1/z$  с использованием в качестве нулевого приближения функций Грина "Хаббард-1" (5.9). Находя поправки к функциям Грина и дифференцируя  $\langle H \rangle$  по  $T$ , для случая  $U \rightarrow \infty$ ,  $n < 1$  получаем [40]

$$\delta C_1 = \frac{\pi^2}{3} \frac{4E_F^2 \langle S^z \rangle N_{\uparrow}(E_F) T}{(n_0 + n_-)(n_0 + n_+)^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[\epsilon_{\mathbf{k}}(n_0 + n_-) - E_F]^2}, \quad (6.7)$$

что напоминает по структуре результат (6.6). Отметим, что при конечных  $U$  структура спектра при наличии хаббардовских подзон является более сложной, и неквазичастичные вклады в функции Грина возникают даже в парамагнитной фазе. Таким образом, хаббардовское расщепление (которое, как и спиновое расщепление, обусловленное взаимодействием с локальными магнитными моментами, вступает в противоречие со стандартной теорией ферми-жидкости [6, 7]) может приводить к появлению необычных вкладов в теплоемкость.

Как мы видели выше, в случае малых концентраций дырок с одночастичная функция Грина в насыщенном ферромагнитном состоянии может быть вычислена более строго. Соответствующий вклад в теплоемкость получается после разложения выражения (5.7) по  $G^{(0)}$ . Его оценка дает [40]

$$\delta C_1(T) \sim Tc^{-1/3} \ln \frac{1}{c}, \quad \delta C_1(T) \gg \delta C_{\uparrow}(T) \sim Tc^{1/3}. \quad (6.8)$$

Полученное усиление (6.8) несколько меньше, чем в парамагнитном состоянии, где метод Гутцвиллера дает усиление порядка  $1/c$  [96]. Тем не менее в пределе малых  $c$  вклад малоподвижных неквазичастичных состояний в теплоемкость оказывается доминирующим. Здесь опять можно вспомнить об аналогии с андерсоновскими спинонами [81], не имеющими электрического заряда, но обеспечивающими (в бесцелевом варианте теории RVB) линейную теплоемкость.

Рассмотренный механизм усиления теплоемкости должен быть определяющим в ПМФ, а в обычных сильных ферромагнетиках существовать наряду с "парамагнитным". В этой связи упомянем данные по  $Mn_4N$ , где экспериментальное значение электронной теплоемкости в несколько раз превышает теоретическое (полученное из зонных расчетов) [31]. Такая же ситуация имеет место в гейслеровых сплавах  $X_2MnSn$ ,  $X_2MnI$  [97], причем авторы этой работы прямо связывают наблюдаемое усиление теплоемкости со спиновыми флуктуациями.

Обсудим теперь неквазичастичные вклады в кинетические свойства в рамках теории возмущений. Как мы видели в разделе 3, вклад s-d-рассеяния в сопротивление, связанный с неквазичастичными состояниями, во втором порядке по  $I$  отсутствует. В то же время такой вклад возникает при наличии примесного рассеяния [98]. Разложим электронную функцию Грина до второго порядка по примесному потенциалу  $V$

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) + V G_{\mathbf{k}\sigma}(E) G_{\mathbf{k}'\sigma}(E) \left( 1 + V \sum_{\mathbf{p}} G_{\mathbf{p}\sigma}(E) \right) \quad (6.9)$$

( $G$  — точные функции Грина в идеальном кристалле). Тогда транспортное время релаксации в пренебрежении вершинными поправками находится из мнимой части  $T$ -матрицы

$$\tau_{\sigma}^{-1}(E) = 2\pi V^2 N_{\sigma}(E). \quad (6.10)$$

Учитывая энергетическую зависимость неквазичастичного вклада в плотность состояний вблизи  $E_F$  (5.15), мы получаем поправки к проводимости

$$\delta\sigma \sim -V^2 \int dE \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \delta N(E) \sim -T^{3/2}. \quad (6.11)$$

Поскольку поправка (5.15) содержит нечетный по  $E - E_F$  вклад, возникают также вклады в термо-э.д.с. порядка  $T^{3/2}$ .

Детальный анализ неквазичастичных вкладов в кинетические свойства представляет собой интересную и трудную проблему. Отметим, что аналогично рассмотрению ЯМР в предыдущем разделе вклад двухмагнитных процессов в сопротивление порядка  $T^{7/2}$  можно интерпретировать, как обусловленный рассеянием в неквазичастичных состояниях.

## 7. Ферромагнетизм систем с сильными межэлектронными корреляциями

Одним из наиболее принципиальных вопросов теории сильного магнетизма коллективизированных электронов является описание формирования локальных магнитных моментов и объяснение закона Кюри-Вейсса. Хотя спин-флуктуационные теории [3] и зонные расчеты [64] привели к определенному прогрессу в этом направлении, все же локальные моменты привносятся в таких схемах в значительной степени ad hoc, поскольку исходная трансляционно-инвариантная система заменяется неупорядоченной со случайными магнитными полями.

Наиболее трудным для спин-флуктуационных подходов, как и для стандартных зонных расчетов, является случай зонных магнетиков с сильными межэлектронными корреляциями (параметр внутриатомного взаимодействия не мал по сравнению с шириной зоны проводимости). В этом случае корреляции могут приводить к радикальной перестройке электронного спектра — формированию хаббардовских подзон [78].

Согласно Мотту [53] хаббардовское расщепление имеется в некоторых антиферромагнитных оксидах и сульфидах, а также в ряде металлических ферромагнетиков, например  $CrO_2$ , в системе твердых растворов со

структурой пирита  $Fe_{1-x}Co_xS_2$ . Последняя представляет собой идеальную модельную систему для теоретического исследования ферромагнетизма в состоянии с хаббардовскими подзонами. Ее электронная структура довольно проста: электроны, ответственные как за металлическую проводимость, так и за магнетизм, принадлежат к одной и той же дважды вырожденной  $e_g$ -полосе, которая является достаточно узкой (ширина порядка 1 эВ) [99]. В недавнем зонном расчете  $CoS_2$  [127] было получено "почти" ПМФ.

Экспериментальные данные по магнитным свойствам  $Fe_{1-x}Co_xS_2$  были получены в [100]. Наиболее ярким фактом является возникновение ферромагнетизма при очень малой электронной концентрации  $n = x < 0,05$ . Ферромагнетизм является ненасыщенным вплоть до  $n \cong 0,15$ , а в широком интервале  $0,15 < n < 0,95$  магнитный момент соответствует одному магнетону Бора на электрон. Однако в отличие от слабых зонных ферромагнетиков типа сплавов Ni-Rh нет никаких указаний на обменное усиление паулиевской восприимчивости в парамагнитной области температур, а закон Кюри-Вейсса выполняется при всех электронных концентрациях, причем постоянная Кюри пропорциональна  $n$ . Такое поведение не может быть объяснено в рамках приближения  $t$ -матрицы Канамори [101], которое является модифицированным вариантом теории Стонера — для получения основного ферромагнитного состояния при малых  $n$  в этом подходе необходим острый пик плотности состояний вблизи дна зоны, отсутствующий согласно зонным расчетам [99]. Кроме того, теория Канамори не в состоянии объяснить закон Кюри-Вейсса.

В этом разделе мы рассмотрим, следуя [4], проблему формирования насыщенного (полуметаллического) и ненасыщенного ферромагнитного состояния в узкой энергетической зоне.

Локальные моменты в системах с хаббардовскими подзонами, естественно, описываются в рамках узкозонной модели Хаббарда (5.5), как однократно занятые узлы, причем дырки играют роль носителей тока. Вычисление спиновой функции Грина (динамической магнитной восприимчивости) в этой модели с включением внешнего поля  $h$  дает

$$G_q(\omega) = \left[ 2\langle S^z \rangle + \sum_k \frac{(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)(n_k^+ - n_{k-q}^-)}{\omega - h - E_k^+ + E_{k-q}^-} \right] \times \\ \times \left[ \omega - h - \sum_k \frac{(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)(\varepsilon_{k-q} n_{k-q}^- - \varepsilon_k n_k^+)}{\omega - h - E_k^+ + E_{k-q}^-} \right]^{-1}, \quad (7.1)$$

где, согласно (5.8),

$$E_k^\sigma = (n_0 + n_\sigma)\varepsilon_k = \left( \frac{1+c}{2} + \sigma\langle S^z \rangle \right) \varepsilon_k, \\ n_k^\sigma = (n_0 + n_\sigma)f\left(E_k^\sigma + \sigma\frac{h}{2}\right). \quad (7.2)$$

Уравнение для намагниченности получается аналогично подходу Тябликова в модели Гейзенберга [102] и имеет вид

$$\langle S^z \rangle = \frac{1-c}{2} + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega N_B(\omega) \sum_q \text{Im} G_q(\omega). \quad (7.3)$$

Уравнение (7.3) может быть упрощено в случае  $\langle S^z \rangle \ll 1$ , т.е. для парамагнитной фазы, когда  $\langle S^z \rangle = \chi h$ , а также при малой концентрации электронов  $n = 1 - c$  для произвольных температур. Разлагая числитель и знаменатель в (7.5), можно явно выделить зависимость от  $\langle S^z \rangle$  и  $h$

$$G_q(\omega) = \frac{\omega A_q(\omega) + \langle S^z \rangle B_q(\omega) + h C_q(\omega)}{\omega - \langle S^z \rangle D_q(\omega) - h P_q(\omega)}. \quad (7.4)$$

Величина  $A$ , определяющая значение эффективного магнитного момента, равна

$$A_q(\omega) = \sum_k \frac{f(E_{k-q}) - f(E_k)}{\omega + E_{k-q} - E_k} \times \\ \times \left( 1 + \frac{2}{1+c} \sum_k \frac{E_{k-q} f(E_{k-q}) - E_k f(E_k)}{\omega + E_{k-q} - E_k} \right)^{-1}, \\ E_k = \frac{1+c}{2} \varepsilon_k. \quad (7.5)$$

Если выполняется условие  $\langle S^z \rangle \neq 0$ , выражение (7.1) имеет вещественный полюс, определяющий частоту спин-спиновых волн  $\omega_q$ .

В случае  $c \ll 1$  (почти наполовину заполненная зона) при  $T = 0$  имеем  $\langle S^z \rangle = (1-c)/2$ , т.е. основное состояние является насыщенным ферромагнитным в согласии с теоремой Нагаока [79]. При низких температурах выполняется закон Блоха

$$\langle S^z \rangle = \frac{1-c}{2} - \sum_p N_B(\omega_p), \quad (7.6)$$

$$\omega_p = \sum_k (\varepsilon_{k-p} - \varepsilon_k) f(\varepsilon_k). \quad (7.7)$$

Выражение (7.7) отличается от точного результата для спектра спиновых волн [39, 79] на поправки, малые по обратному координационному числу  $1/z$ .

В случае малой концентрации электронов  $n \ll 1$  имеем

$$\omega_q = \langle S^z \rangle \sum_k \varepsilon_k \left( \varepsilon_{k-q} \frac{f(\varepsilon_{k-q}) - f(\varepsilon_k)}{\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k} - \varepsilon_k \frac{\partial f(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \right). \quad (7.8)$$

Это выражение напоминает по структуре соответствующий результат теории косвенного обмена РККИ, однако в отличие от последнего в (7.8) вместо параметра взаимодействия входит спектр  $\varepsilon_k$ ; такая замена характерна для предела узких зон. Решение уравнения для намагниченности для  $T = 0$  и  $n \ll 1$  дает

$$S_0 = \frac{n}{2} - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega \text{Im} \sum_q A_q(\omega) = \frac{\alpha n}{2}, \\ \alpha = 2 \sum_{k,q} \frac{(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k) \theta(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)}{\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k + \varepsilon_{\max} - \varepsilon_q}, \quad (7.9)$$

причем положительная величина  $\alpha < 1$  формально мала по  $1/z$ . В "модели Дебая" с  $\varepsilon_k = a + bk^2$  ( $k < k_D$ ) находим  $\alpha = 1/4$ . Из-за малости  $\alpha$  ферромагнетизм при малых  $n$  оказывается существенно ненасыщенным.

Полагая в (7.4)  $\langle S^z \rangle = \chi h$  ( $T > T_C$ ), получаем уравнение для парамагнитной восприимчивости  $\chi$

$$\begin{aligned} \frac{1-c}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \cotanh \frac{\omega}{2T} \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}(\omega) = \\ = T \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{\chi B_{\mathbf{q}}(0) + C_{\mathbf{q}}(0)}{\chi D_{\mathbf{q}}(0) + P_{\mathbf{q}}(0)} + A_{\mathbf{q}}(0) \right). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Температура Кюри определяется условием  $\chi^{-1}(T_C) = 0$ . В случае  $n \ll 1$  ее значение

$$T_C = \frac{S_0}{2} \left( \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}}^{-1}(0) \right)^{-1} = \frac{S_0}{2} \frac{\varepsilon_{\max}^2 m^* k_F}{2\pi^2} v_0 \quad (7.11)$$

мало по сравнению с характерными электронными энергиями, так что при  $T \sim T_C$  носители тока сильно вырождены. При  $T_C \ll T \ll E_F$

$$\chi = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{C}{T - \theta}. \quad (7.12)$$

Постоянная Кюри  $C$  оказывается в два раза меньше, чем намагниченность насыщения  $S_0$  (как и для локализованных спинов  $S = 1/2$ ). Парамагнитная температура Кюри

$$\theta = C \sum_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}}(0) \quad (7.13)$$

в низшем порядке по электронной концентрации совпадает с  $T_C$ . Если  $n$  не слишком мало, зависимость величины  $D$  от  $\mathbf{q}$  становится существенной и возникает заметная положительная разность  $\theta - T_C$ . Таким образом, в согласии с экспериментальными данными по  $\text{Fe}_{1-n}\text{Co}_n\text{S}_2$  имеет место закон Кюри–Вейса с постоянной Кюри, пропорциональной  $n$ . Следует отметить, что вырождение зоны проводимости  $e_g$ -типа не играет большой роли в случае больших  $U$  и малых  $n$ , но важно при  $n = 1 - c \cong 1$  (например, для ферромагнитного металла  $\text{CoS}_2$ , который, строго говоря, не описывается рассматриваемой теорией).

В случае  $c \ll 1$  мы имеем локальный момент на каждом узле и небольшое число носителей тока (дырок). При этом, как оказывается, условие сильного вырождения носителей тока для  $T \cong T_C$  не выполняется. Вычисление температуры Кюри в предположении невырожденности носителей тока дает

$$T_C = |\varepsilon_{\min}| c^{1/2}. \quad (7.14)$$

Восприимчивость при  $T \gg T_C$  также подчиняется закону Кюри–Вейса.

Следует отметить, что оценка (7.14) справедлива лишь при условии, что носители тока имеют обычную зонную природу. Возможность их автолокализации, продемонстрированная в [103], может привести к изменению результатов.

Таким образом, в рамках данного приближения ферромагнетизм оказывается устойчивым вплоть до произвольно малых электронных концентраций. Концентрация дырок, при которой происходит разрушение насыщенного ферромагнетизма, формально мала по  $1/z$  [39]. Ее численные оценки в рамках прямого вариационного метода для квадратной и простой кубической решеток даны в [104].

По-видимому, рассмотренная достаточно грубая интерполяционная схема переоценивает тенденцию к ферромагнетизму при малых  $n$  из-за пренебрежения флуктуациями чисел заполнения дырок, и существует критическая концентрация  $n_c$ , при которой ферромагнетизм исчезает; подходы, использующие разложения со стороны половинного заполнения, могут давать для нее достаточно большие значения (см., например, [82]). В то же время приведенные результаты дают удовлетворительное описание магнитных свойств системы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ .

Представляет интерес сопоставление описанных результатов для узкозонных хаббардовских систем с картиной ферромагнетизма, полученной для решеток Кондо в [88, 89, 92]. В этих работах было использовано специфическое приближение среднего поля для режима сильной связи (температуры, низкие по сравнению с температурой Кондо  $T_K$ ), позволяющее свести s-f-обменную модель к эффективной гибридационной модели. При этом параметр гибридизации  $V_{\sigma}$  определяется аномальным средним от произведения операторов электрона проводимости и абрикосовских псевдофермионов, описывающих f-подсистему [105]. Исследование уравнений самосогласования показывает, что для постоянной затравочной плотности состояний всегда имеется решение, соответствующее состоянию кондовского ПМФ, с более низкой энергией, чем немагнитное. В этом состоянии, как и в модели Хаббарда с сильными корреляциями (или в эквивалентной ей s-d(f)-модели с  $I \rightarrow -\infty$ ), каждый электрон проводимости компенсирует один локализованный спин, так что  $\langle S^z \rangle = (1 - n)/2$ . Таким образом, сходство с узкозонным хаббардовским ферромагнетиком определяется ростом затравочно малого s-f-обменного параметра в области сильной связи. С увеличением параметра межспинового гейзенберговского обмена происходит переход первого рода в обычное магнитное состояние с полностью подавленным эффектом Кондо ( $V_{\sigma} = 0$ ,  $\langle S^z \rangle = 1/2$ ).

## 8. Микроскопическая модель магнетизма переходных металлов: аналогии с полуметаллическими ферромагнетиками

Теоретическое исследование ПМФ интересно не только в применении к конкретным соединениям типа гейслеровых сплавов, но и важно для общей проблемы магнетизма металлов. Здесь мы обсудим применение некоторых идей и представлений физики ПМФ к "сильным" зонным магнетикам, в частности, к Fe и Ni [6, 106].

В отличие от сильно коррелированных магнетиков типа  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ ,  $\text{CrO}_2$ , где существенно хаббардовское расщепление, для коллективизированных магнетиков с достаточно широкой d-зоной (порядка 5 эВ) нет оснований сомневаться в качественной применимости критерия ферромагнетизма Стонера. Последний имеет вид  $IN(E_F) > 1$ , где  $I$  — эффективный параметр внутриаомного обмена (возможно, с многоэлектронными перенормировками). Первопринципные зонные расчеты [8] показывают, что в периодической таблице стонеровский параметр изменяется плавно и не слишком сильно, в то время как значения  $N(E_F)$  могут отличаться для соседних металлов в десятки раз из-за резкой зависимости  $N(E)$  и различного положения  $E_F$ . В итоге необходимым условием выполнения критерия Стонера является попадание уровня Ферми в немагнитном состоянии на пик  $N(E)$

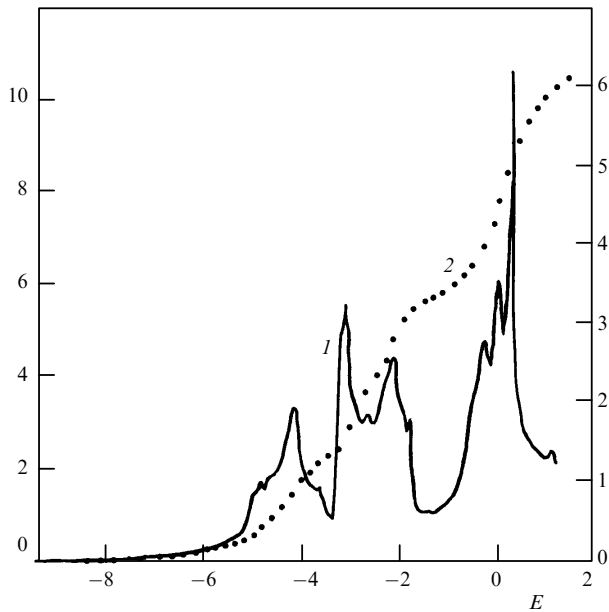


Рис. 12. Плотность состояний ( $\text{эВ}^{-1}$ , сплошная линия 1, ось справа) и интегральная плотность состояний (точки 2, ось слева) в немагнитном ОЦК-железе [8]. Энергия  $E$  (эВ) отсчитана от  $E_F$

(рис. 12). Такие пики возникают в результате слияния особенностей ван Хова вдоль некоторой линии в  $\mathbf{k}$ -пространстве [7, 107]. Например, в ОЦК-железе слияние происходит вдоль линии  $P - N$ , причем в формировании пика, как и в модели Гудинафа [108], участвуют только  $e_g$ -электроны [6]; анализ для Ni выполнен в [109]. Таким образом, за ферромагнетизм ответственна лишь небольшая группа d-электронных состояний, формирующих пик  $N(E)$ .

Для описания магнитных свойств Fe и Ni в [6, 106] была предложена модель, согласно которой электроны этой группы считаются хорошо локализованными и описываются моделью Хаббарда; при этом корреляции для них необходимо являются сильными из-за малости ширины пика  $\Gamma \sim 0, 1$  эВ. Остальные s-, p- и d-электроны образуют широкие зоны и слабо гибридованы с "магнитными" электронами пика. В ферромагнитной фазе раздвижка пиков со спином вверх и вниз  $\Delta \sim 1 - 2$  эВ  $\gg \Gamma$ , причем в отличие от гейслеровых сплавов формы обоих пиков сходны и нижний пик полностью заполнен. Поэтому для "магнитных" электронов картина оказывается близкой к насыщенному ферромагнетизму, т.е. к состоянию ПМФ в обычной модели Хаббарда с большими  $U$  (напомним, что, согласно разделу 4, в такой ситуации описания на языке хаббардовского расщепления и большого спинового расщепления, по существу, эквивалентны). Эта модель позволяет легко объяснить низкие (по сравнению с энергией Ферми) значения температуры Кюри, которые, как видно из результатов предыдущего раздела, должны быть порядка  $\Gamma$ .

В рамках этой картины следует ожидать сильных (даже по сравнению с гейслеровыми сплавами) неквази-частичных эффектов. Последние могут быть существенны для объяснения экспериментальных данных по спиновой поляризации, найденной из фото- [110] и термо-эмиссии [111], которые резко противоречат результатам зонных расчетов Fe и Ni. Наблюдаемое для Ni значение линейного члена в теплоемкости (см. [6]) больше в

феррофазе, чем в парафазе (в противоположность теории Стонера, где спиновое расщепление приводит к уменьшению  $N(E_F)$ ), что может быть связано с неквази-частичными вкладами. Далее, обсуждавшиеся выше неквази-частичные вклады в примесное сопротивление актуальны в связи с проблемой электросопротивления ферромагнитных переходных металлов при очень низких температурах (наблюдаются вклады, пропорциональные  $T^{3/2}$  или  $T$ , которые не объясняются релятивистскими процессами [2]).

Мы видим, что сравнение переходных металлов группы железа с ПМФ оказывается не менее полезным, чем экстраполяция со стороны слабых зонных магнетиков [3]. В то время как спин-флуктуационные теории дают возможность лишь построить полуфеноменологическую теорию температурных зависимостей магнитных и термодинамических свойств, обсуждаемый подход позволяет исследовать нетривиальные проблемы, связанные с характеристиками основного состояния.

## 9. Полуметаллические антиферромагнетики

Мы видели, что ПМФ имеют свойства, существенно отличающиеся от свойств "обычных" проводящих ферромагнетиков. Естественно, возникает вопрос, сохраняются ли эти особенности в случае антиферромагнетика.

Как известно, антиферромагнитное упорядочение приводит к расщеплению электронного спектра на слэтеровские подзоны [1]. В простейшей модели Хаббарда (или s-d-модели) электронный спектр имеет вид

$$E_{\mathbf{k}}^{(1,2)} = \theta_{\mathbf{k}} \mp E_{\mathbf{k}}, \quad E_{\mathbf{k}} = (\tau_{\mathbf{k}}^2 + U^2 \bar{S}^2)^{1/2},$$

$$\bar{S} = \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle,$$

$$\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}/2} + t_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}/2}),$$

$$\tau_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}/2} - t_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}/2}), \quad (9.1)$$

где  $\mathbf{Q}$  — волновой вектор АФМ структуры, величина  $\Delta = 2U\bar{S}$  имеет смысл прямой энергетической щели. С увеличением межэлектронного взаимодействия вся энергетическая полоса может расщепиться на две (слэтеровская щель). В частности, для числа электронов, равного числу узлов ( $n = 1$ ) происходит переход металл-изолятор. При нецелочисленном же заполнении зоны проводимости уровень Ферми пересекает лишь одну из слэтеровских подзон, и такая система может быть названа полуметаллическим антиферромагнетиком (ПМАФ). Впрочем, случай больших  $\Delta$  едва ли осуществляется в интерметаллических системах типа гейслеровых сплавов. Поэтому более реальной кажется другая ситуация, когда щель в электронном спектре существует в парамагнитном состоянии и имеет гибридационную природу, а АФ упорядочение приводит к сдвигу уровня Ферми в одну из гибридационных подзон, так что одна из слэтеровских подзон оказывается полностью пустой или полностью занятой.

Состояние ПМАФ было получено в зонном расчете CrMnSb для структуры  $C_{1b}$  [11] (см. также расчеты [128]). Экспериментально в этом соединении (как и в системах  $Li_xMn_{1-x}Se$ ,  $FeRh$ ,  $Cr_{2-x}Mn_xSb$ ,  $Co_{2-x}Mn_xSb$  [112]) наблюдается переход из антиферро- в феррофазу с повышением температуры. Объяснение этой неустойчи-



ности может быть дано следующим образом [11]. В системе AMnSb момент узлов A антипараллелен моменту Mn, что позволяет получить выигрыш в зонной энергии за счет образования щели, но приводит к проигрышу в обменной энергии за счет ферромагнитного суперобмена. При переходе от  $A = \text{Ni}$  к  $A = \text{Cr}$  полный магнитный момент уменьшается, поскольку момент узлов A растет. За счет баланса указанных вкладов в CrMnSb может происходить переход полупроводник–металл в одной из спиновых подзон, сопровождаемый изменением типа магнитного упорядочения.

Представляет интерес сравнение этой ситуации с поведением соединения UNiSn [46, 47, 113] со структурой  $C_{1b}$ , где при повышении температуры до  $T = 47$  К происходит переход антиферромагнитный металл–парамагнитный полупроводник (последовательность, обратная обычным превращениям металл–изолятор в халькогенидах переходных металлов [53]). Это явление может быть также связано с "полуметаллическими" мотивами в зонной структуре, найденными в гипотетической феррофазе [18], и объясняться сдвигом энергии Ферми при возникновении антиферромагнетизма. В работе [88] обсуждалась альтернативная возможность многоэлектронного (кондовского) происхождения щели в UNiSn и ее подавления АФ упорядочением.

Вопрос о природе энергетической щели с величиной  $E_g \sim 10$  К в UNiSn до конца не ясен. В изоструктурных соединениях ZrNiSn, TiNiSn, HfNiSn имеется большая энергетическая щель ( $E_g \sim 10^3$  К) зонного типа, по видимому, связанная с "вакансионной" подрешеткой в их кристаллической структуре [114] (ср. с обсуждением электронного спектра гейслеровых сплавов TMnSb в разделе 2). Исследование соединений TMSn ( $T = \text{Ti, Zr, Hf; M} = \text{Fe, Co, Ni}$ ) [115] дало очень низкие значения электронной теплоемкости, кроме случая  $M = \text{Co}$ , причем в TiCoSn был обнаружен ферромагнетизм с  $T_C = 143$  К, и по аналогии с NiMnSb была высказана гипотеза о реализации в этом соединении состояния ПМФ.

Соединение YbNiSn является металлической решеткой Кондо, в которой при низких температурах возникает ферромагнитное упорядочение с  $T_C = 5$  К,  $\mu_0 = 0,4 \mu_B$ , причем отсутствие щели связывается со слабостью d-f-гибридизации в соединениях иттербия [116]. В немагнитной изоляторной решетке Кондо CeNiSn щель очень мала ( $E_g \sim 3$  К) [114]. (Интересно отметить, что при сверхнизких температурах в CeNiSn наблюдаются статические спиновые корреляции с локальным моментом порядка  $10^{-3} \mu_B$  [117]; измерение скорости продольной ядерной релаксации [118] дает  $1/T_1 \sim T^2$ , что может означать присутствие в щели ненулевой плотности неквазичастичных состояний.) При этом эволюция электронных свойств в системах  $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{NiSn}$  [114] и  $\text{U}_{1-x}\text{Th}_x\text{NiSn}$  [113] с ростом  $x$  качественно подобна. Температурные зависимости магнитной восприимчивости [113] и скорости ядерной релаксации [119] в UNiSn указывают на существование локализованных моментов или, по крайней мере, развитых локальных спиновых флуктуаций. Все эти данные свидетельствуют скорее в пользу кондовского происхождения щели в UNiSn.

В отличие от ферромагнетика в антиферромагнетиках отсутствует запрет на процессы распада магнона с малыми импульсами на стонеровские возбуждения, и

одномагнанные процессы эффективны вплоть до самых низких температур, поскольку имеются переходы с переворотом спина внутри слэтеровских подзон. Это приводит к тому, что как в обычных зонных, так и в полуметаллических антиферромагнетиках затухание магнонов линейно по  $q$ , а спин-волновой вклад в сопротивление, как и в случае рассеяния на фонах, пропорционален  $T^5$ . (При не слишком низких  $T$  вклад межзонных переходов линейен по  $T$ ). Специфика ПМАФ может быть установлена лишь в тех физических свойствах, где проявляется вклад межзонных переходов, который является пороговым по  $q$  в любых проводящих антиферромагнетиках (как и в ферромагнетиках) и отсутствует (по крайней мере до энергий порядка энергетической щели) в полуметаллическом случае. Отметим, что в случае малой величины  $\Delta$  межзонный вклад в интегральные термодинамические характеристики (например, тепловое расширение, модули упругости, магнитообъемный эффект), вообще говоря, является более сингулярным, чем вклад внутризонных переходов, так что соответствующие аномалии [120] в ПМАФ должны быть более слабыми.

Рассмотрим динамическую восприимчивость проводящего антиферромагнетика. В локальной системе координат имеем

$$S_q^+ = \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\uparrow}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \quad S_q^- = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (d_{\mathbf{k}\uparrow}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} - d_{\mathbf{k}\downarrow}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}),$$

$$d_{\mathbf{k}\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{\mathbf{k}+(\mathbf{Q}/2)\uparrow}^+ + \sigma c_{\mathbf{k}-(\mathbf{Q}/2)\downarrow}^+). \quad (9.2)$$

Ограничиваясь простейшим приближением свободных квазичастиц со спектром (9.1) (обсуждение более сложных приближений, учитывающих спин-волновые вклады, не представляет особого интереса, поскольку оно не специфично для ПМАФ; неквазичастичные эффекты в проводящих антиферромагнетиках рассматриваются в [121]), находим

$$\langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}}\right) \left(1 + \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \times \right.$$

$$\times \left( \frac{n_{\mathbf{k}}^{(1)} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}}{\omega + E_{\mathbf{k}}^{(1)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}} + \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(2)} - n_{\mathbf{k}}^{(2)}}{\omega + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(2)} - E_{\mathbf{k}}^{(2)}} \right) +$$

$$+ \left(1 + \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}}\right) \left(1 + \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \frac{n_{\mathbf{k}}^{(1)} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(2)}}{\omega + E_{\mathbf{k}}^{(1)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(2)}} +$$

$$\left. + \left(1 - \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}}\right) \left(1 - \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \frac{n_{\mathbf{k}}^{(2)} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}}{\omega + E_{\mathbf{k}}^{(2)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}} \right], \quad (9.3)$$

$$\langle\langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left(1 - \frac{\tau_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \times \right.$$

$$\times \sum_{i=1,2} \frac{n_{\mathbf{k}}^{(i)} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(i)}}{\omega + E_{\mathbf{k}}^{(i)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(i)}} + \left(1 + \frac{\tau_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \times$$

$$\left. \times \sum_{i \neq j} \frac{n_{\mathbf{k}}^{(i)} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(j)}}{\omega + E_{\mathbf{k}}^{(i)} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(j)}} \right]. \quad (9.4)$$

Мы видим, что вклад внутризонных переходов в поперечную восприимчивость исчезает (т.е. она обращается в нуль в ПМАФ) лишь при  $\Delta \rightarrow \infty$ . Что касается продоль-

ной восприимчивости ПМАФ, то в случае малых  $\Delta$  она мала при  $q \rightarrow 0$  и велика при  $q \sim Q$ . Отличия от случая ферромагнетика объясняются тем, что щель входит в электронный спектр антиферромагнетика (9.1) более сложным образом.

## 10. Заключение

В этом обзоре мы попытались продемонстрировать, что изучение ПМФ, начавшееся всего десять лет назад, уже существенно обогатило наши представления о магнетизме металлов и сплавов, а еще большего можно ожидать от будущих целенаправленных исследований.

С теоретической точки зрения наиболее интересной представляется возможность выделения в ПМФ в чистом виде неквазичастичных (спин-поляронных) эффектов — в физике твердого тела известно не так уж много случаев, когда стандартное фермижидкостное описание заведомо оказывается недостаточным. Пожалуй, до сих пор единственным примером, где имеет место такая ситуация, были одномерные системы, которые описываются моделью Латтинджерской жидкости [122]. Случай двумерных (и тем более трехмерных) систем с сильными Хаббардовскими корреляциями до сих пор является предметом ожесточенных дискуссий [123], особенно актуальных в связи с проблемой высокотемпературных сверхпроводников. В такой ситуации важно, что ПМФ дают простой и убедительный пример несправедливости общего утверждения о применимости теории ферми-жидкости в трехмерных системах. С точки зрения экспериментальной проверки здесь особенно интересны данные по спиновой поляризации носителей тока; такие исследования, несомненно, должны быть продолжены. Другим чувствительным инструментом изучения неквазичастичных эффектов является ядерная магнитная релаксация.

Как отмечалось выше, неквазичастичные вклады могут наблюдаться и в "обычных" сильных коллективизированных магнетиках. В этом смысле ПМФ, которые характеризуются большой величиной внутриатомных корреляций (например, в ионах Mn для гейслеровых сплавов), хорошо определенными локальными моментами, а в некоторых случаях — ярко выраженным Хаббардовским расщеплением (например, в  $\text{CrO}_2$ ), удачно дополняют слабые зонные магнетики типа  $\text{ZrZn}_2$ , которые служили прообразом ферромагнитных металлов вплоть до начала 80-х годов [3].

Что касается практических применений ПМФ, уже говорилось об их возможном использовании для магнитооптического считывания информации, а также для создания новых магнитных материалов с большой намагниченностью насыщения и высокими точками Кюри. Здесь мы отметим еще одну привлекательную возможность. В последнее время резко вырос интерес к магнитным мультислоям, связанный с гигантским магниторезистивным эффектом [125]. Последний тем больше, чем сильнее отличается от единицы отношение парциальных статических проводимостей с различными проекциями спина. По самому определению ПМФ это отношение является в них рекордным. Поэтому они могут быть перспективными материалами для приготовления мультислоев. В настоящее время предприняты попытки создания мультислоев на основе  $\text{PtMnSb}/\text{CuMnSb}$  [126].

Авторы благодарят С.В. Вонсовского за интерес к работе и поддержку. Работа частично финансирована Российским фондом фундаментальных исследований (проект N 93-02-16802).

## Список литературы

- Herring C Magnetism (New York: Academic Press, 1966) Vol. 4
- Вонсовский С В *Магнетизм* (М.: Наука, 1971)
- Мория Т *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами* (М.: Мир, 1988)
- Auslender M I, Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys. C* **21** 5521 (1988); *ФММ* **65** 57 (1988)
- Дзялошинский И Е, Кондратенко П С *ЖЭТФ* **70** 1987 (1976)
- Irkhin V Yu, Katsnelson M I, Trefilov A V *J. Phys.: Condens. Mat.* **5** 8763 (1993)
- Вонсовский С В, Кацнельсон М И, Трефилов А В *ФММ* **76**(3) 3 (1993)
- Moruzzi V L, Janak J F, Williams A R *Calculated Electronic Properties of Metals* (Pergamon Press, 1978)
- de Groot R A, Mueller F M, Mueller P G, van Engen P G, Bushow K H J *Phys. Rev. Lett.* **50** 2024 (1983)
- de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G, Bushow K H J *J. Appl. Phys.* **55** (6) 2151 (1984)
- de Groot R A, Buschow K H J *J. Magn. and Magn. Mat.* **54–57** 1377 (1986)
- Kuebler J *Physica B + C* **127** 257 (1984)
- de Groot R A, von der Kraan A M, Buschow K H J *J. Magn. and Magn. Mat.* **61** 330 (1986)
- Kuebler J, Williams J R, Sommers C B *Phys. Rev. B* **28** 1745 (1983)
- Fujii S, Sugimura S, Ishida S, Asano S *J. Phys.: Cond. Mat.* **2** 8583 (1990)
- Schwarz K *J. Phys. F* **16** L211 (1986)
- Kulatov E, Mazin I J *Phys.: Cond. Mat.* **2** 343 (1992); Николаев А В, Андреев Б В *ФТТ* **35** 1185 (1993)
- Albers R C, Boring A M, Daalderop G H O, Mueller F M *Phys. Rev. B* **36** 3661 (1987)
- Кулатов Э Т, Халилов С В *ЖЭТФ* **98** 1778 (1989); Halilov S V, Kulatov E T *J. Phys.: Condens. Mat.* **3** 6363 (1991)
- Yanase A, Siraatori K *J. Phys. Soc. Japan* **53** 312 (1984)
- Wijngaard J H, Haas C, de Groot R A *Phys. Rev. B* **40** 9318 (1989)
- van Engen P G, Bushow K H J, Jongebreur R, Erman M *Appl. Phys. Lett.* **42** 202 (1983)
- Schwarz K, Mohn O, Blaha P, Kuebler J *J. Phys. F* **14** 2659 (1984)
- Jaswal S S *Phys. Rev. B* **41** 9697 (1990)
- Jaswal S S, Yelon W B, Hadjipanayis G C et al. *Phys. Rev. Lett.* **67** 644 (1991)
- Min B I, Kang J-S, Hong J H et al. *Phys. Rev. B* **48** 6317 (1993)
- Malik S K, Arlinghaus P J, Wallace W E *Phys. Rev. B* **16** 1242 (1977)
- Malik S K, Arlinghaus P J, Wallace W E *Phys. Rev. B* **25** 6488 (1982)
- Inoue J, Shimizu M *J. Phys. F* **15** 1511 (1985)
- Matar S, Mohn P, Demazeau G, Siberchicot B *J. de Phys.* **49** 1761 (1988)
- Tagawa Y, Motizuki K *J. Phys.: Condens. Mat.* **3** 1753 (1991)
- Fujii S, Ishida S, Asano S *J. Phys.: Condens. Mat.* **4** 1575 (1992)
- Sakuma A *J. Phys. Soc. Japan* **60** 2007 (1990)
- Matar S, Mohn P, Demazeau G, Schwarz K *J. Magn. and Magn. Mat.* **101** 251 (1991)
- Matar S, Mohn P, Kuebler J *J. Magn. and Magn. Mat.* **104–107** 1927 (1992)
- Auslender M I, Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys. C* **17** 669 (1984)
- Auslender M I, Irkhin V Yu *J. Phys. C* **18** 3533 (1985)
- Ирхин В Ю, Кацнельсон М И *ЖЭТФ* **88** 522 (1985)
- Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys. C.* **18** 4173 (1985)
- Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys.: Condens. Mat.* **2** 7151 (1990)
- Ирхин В Ю, Кацнельсон М И *ФТТ* **25** 3383 (1983)
- de Groot R A, van Engen P G, van Engelen P P J, Buschow K H J *J. Magn. and Magn. Mat.* **86** 326 (1990)
- Braendle H, Weller D, Parkin S S P et al. *Phys. Rev. B* **46** 13889 (1992)

44. Argyres P N *Phys. Rev.* **97** 334 (1955)
45. van Engen P G, Buschow K H J, Erman M J. *Magn. and Magn. Mat.* **30** 374 (1983)
46. Fujii H, Kawanaka H, Takabatake T et al. *J. Phys. Soc. Japan* **58** 3481 (1989)
47. Yethirai M, Robinson R A, Rhyne J J, Gotaas J A, Bushow K H J. *Magn. and Magn. Mat.* **79** 355 (1989)
48. Weller D, Reim W, Ebert H, Johnson D D, Pinski F J J. *de Phys. Colloque C8* **49** 41 (1988)
49. van der Heide P A M, Baelde F, de Groot R A et al. *J. Phys. F* **15** L75 (1985)
50. Braendle H, Weller D, Scott J C et al. In *Proc. of Inter. Conference on Physics of Transition Metals. Darmstadt, 1992* (Singapore a. o.: World Scientific, 1993) p. 345
51. Kisker E, Carbone C, Flipse C F, Wassermann E F J. *Magn. and Magn. Mat.* **70** 21 (1987)
52. Kaemper K R, Schmitt W, Guenterhodt G, Gambino R J, Ruf F. *Phys. Rev. Lett.* **59** 2788 (1987)
53. Мотт Н Ф *Переходы металл–изолятор* (М.: Мир, 1979)
54. Chase L L *Phys. Rev. B* **10** 2226 (1974)
55. Mori H *Prog. Theor. Phys.* **34** 399 (1965)
56. Irkhin Yu P, Voloshinskii A N, Abelskii Sh Sh *Phys. Stat. Sol.* **22** 309 (1967)
57. Otto M J, Feil H, van Woerden R A M et al. *J. Magn. and Magn. Mat.* **70**, 33 (1987)
58. Otto M J, van Woerden R A M, van der Valk P J et al. *J. Phys.: Condens. Mat.* **1** 2351 (1989)
59. Bona G L, Meier F, Taborelli M, Bucher E, Schmidt P H *Sol. State Commun.* **56** 391 (1985)
60. Webster P J J. *Phys. and Chem. Sol.* **32** 1221 (1971)
61. Ido H *J. Magn. and Magn. Mat.* **54–57** 937 (1986)
62. Ido H, Yasuda S J. *de Phys. Colloque C8* **49** 141 (1988)
63. Otto M J, van Woerden R A M, van der Valk P J et al. *J. Phys.: Condens. Mat.* **1** 2341 (1989)
64. Gyorffy B L, Pindor A J, Staunton J, Stocks G M, Winter H J. *Phys. F* **15** 1337 (1985)
65. Туржевский С А, Лихтенштейн А И, Кацнельсон М И *ФТТ* **32** 1952 (1990)
66. Ooiwa K, Endo K, Shinogi A J. *Magn. and Magn. Mat.* **104–107** 2011 (1992)
67. Noda Y, Ishikawa Y J. *Phys. Soc. Japan* **40** 690, 699 (1976)
68. Tajima K, Ishikawa Y, Webster P J et al. *J. Phys. Soc. Japan* **43** 483 (1977)
69. Мориya Т J. *Phys. Soc. Japan* **19** 681 (1964)
70. Туров Е А, Петров М П *Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках* (М.: Наука, 1969)
71. Enokiya H J. *Phys. Soc. Japan* **31** 1037 (1971)
72. Matsuura M M J. *Phys. Soc. Japan* **21** 886 (1966)
73. Mizoguchi T, Inoue M J. *Phys. Soc. Japan* **21** 310 (1966)
74. Irkhin V Yu, Entelis A M *Phys. Stat. Sol. b* **169** 189 (1992)
75. Изюмов Ю А, Кассан-оглы Ф А, Скрябин Ю Н *Полевые методы в теории ферромагнетизма* (М.: Наука, 1974)
76. Метфессель З, Маттис Д *Магнитные полупроводники* (М.: Мир, 1971)
77. Hertz J A, Edwards D M J. *Phys. F* **3** 2174 (1973); Edwards D M, Hertz J A J. *Phys. F* **3** 2191 (1973)
78. Hubbard J *Proc. Roy. Soc. A* **276** 238 (1963)
79. Nagaoka Y *Phys. Rev.* **147** 392 (1966)
80. Вонсовский С В, Кацнельсон М И *УФН* **158** 723 (1989)
81. Anderson P W In *Proc. of Varenna Summer School "Frontiers and Borderlines in Many Particle Physics", July 1987* (Amsterdam: North-Holland, 1988)
82. Ведяев А В, Николаев М Ю *Письма ЖЭТФ* **41** 18 (1985); Nikolaev M Yu, Ryzhanova N V, Vedyayev A V, Zubritskii S M *Phys. Stat. Sol. b* **128** 513 (1985)
83. Edwards D M J. *Phys. C* **16** L32 (1983)
84. Auslender M I, Irkhin V Yu *Sol. State Commun.* **50** 1003 (1984)
85. Kisker E, Baum G, Mahan A, Raith W, Reihl B *Phys. Rev. B* **18** 2256 (1978)
86. Auslender M I, Irkhin V Yu *Zs. Phys. B* **56** 301 (1984); **61** 129 (1985)
87. Irkhin V Yu, Katsnelson M I *Zs. Phys. B* **75** 67 (1989)
88. Irkhin V Yu, Katsnelson M I *Zs. Phys. B* **82** 77 (1991)
89. Ирхин В Ю, Кацнельсон М И *ФММ* (1), 16 (1991); *J. Phys.: Condens. Mat.* **2** 8715 (1990)
90. Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys.: Condens. Mat.* **4** 9661 (1992)
91. Силин В П, Солонцов А З *ФММ* **58** 1080 (1984)
92. Ирхин В Ю, Кацнельсон М И *ФММ* **71** (1) 16 (1991)
93. Абрикосов А А, Дзялошинский И Е *ЖЭТФ* **35** 771 (1958)
94. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: ГИФМЛ, 1962)
95. Carneiro G M, Pethick C J *Phys. Rev. B* **11** 1106 (1975)
96. Vollhardt D *Rev. Mod. Phys.* **56** 99 (1984)
97. Fraga C L F, Brandao D E, Sereni J G J. *Magn. and Magn. Mat.* **102** 199 (1991)
98. Irkhin V Yu, Katsnelson M I, Trefilov A V *Physica C* **160** 397 (1989)
99. Lauer S, Trautwein A X, Harris F E *Phys. Rev. B* **29** 6774 (1984)
100. Jarrett H S, Cloud W H, Bouchard R J et al. *Phys. Rev. Lett.* **21** 617 (1968)
101. Капатори J *Prog. Theor. Phys.* **30** 275 (1963)
102. Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* (М.: Наука, 1975)
103. Brinkman W F, Rice T M *Phys. Rev. B* **2** 1324 (1970)
104. von der Linden W, Edwards D M J. *Phys.: Condens. Mat.* **3** 4917 (1991)
105. Coleman P, Andrei N J. *Phys.: Condens. Mat.* **1** 4057 (1989)
106. Ирхин В Ю, Кацнельсон М И, Трефилов А В *Письма ЖЭТФ* **53** 351 (1991); *J. Magn. and Magn. Mat.* **117** 210 (1992)
107. Кацнельсон М И, Песчанских Г В, Трефилов А В *ФТТ* **32** 470 (1990)
108. Goodenough J B *Phys. Rev.* **120** 67 (1960)
109. Daalderop G H O, Boon M H, Mueller F M *Phys. Rev. B* **41** 9803 (1990)
110. Chrobok G, Hofmann M, Regenfus G, Sizmann P *Phys. Rev. B* **15** 429 (1975)
111. Vaterlaus A, Millani F, Meier F *Phys. Rev. Lett.* **65** 3041 (1990)
112. Гуденаф Д *Магнетизм и химическая связь* (М.: Наука, 1963)
113. Fujii H, Kawanaka H, Takabatake T et al. *J. Magn. and Magn. Mat.* **87** 235 (1990)
114. Аляев Ф Г, Брандт Н Б, Мошчалков В В и др. *Письма ЖЭТФ* **45** 535 (1987); Aliev F G, Moshchalkov V V, Kozyrkov V V et al. *J. Magn. and Magn. Mat.* **76–77** 295 (1988)
115. Kuentzler R, Claud R, Schmerber G, Dossman Y J. *Magn. and Magn. Mat.* **104–107** 1976 (1992)
116. Kasaya M, Tani T, Kawata K et al. *J. Phys. Soc. Japan* **60** 3145 (1991)
117. Kyogaku M, Kitaoka Y, Asayama K, Takabatake T, Fujii K J. *Phys. Soc. Japan* **61** 43 (1992)
118. Kyogaku M, Kitaoka Y, Nakamura H et al. *J. Phys. Soc. Japan* **59** 1728 (1990)
119. Kojima K, Hukuda Y, Kawanaka H et al. *J. Magn. and Magn. Mat.* **90–91** 505 (1990)
120. Ирхин В Ю, Кацнельсон М И, Трефилов А В *Письма ЖЭТФ* **56** 317 (1992)
121. Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys.: Condens. Mat.* **3** 6439 (1991)
122. Mahan G. *Many-particle Physics* (New York: Plenum Press, 1981)
123. Anderson P W *Phys. Rev. Lett.* **64** 239; **65** 2306 (1990); **66** 3226 (1991); **71** 1220 (1993)
124. Katsnelson M I, Edwards D M J. *Phys.: Condens. Mat.* **4** 3289 (1992)
125. Proc. of the First Inter. Symposium on Magnetic Multilayers. Kyoto, 1993 *J. Magn. and Magn. Mat.* **126** (1993)
126. Takanashi K, Watanabe N, Fujimori H J. *Appl. Phys.* **67** 393 (1990)
127. Zhao G L, Calloway J, Hayashibara M *Phys. Rev. B* **48** 15781 (1993)
128. Wijngaard J H, Haas C, de Groot R A *Phys. Rev. B* **45** 5395 (1992)

**HALF-METALLIC FERROMAGNETS****V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson***Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences**18, Ulitsa S. Kovalevskoi, 620219, Ekaterinburg, Russia**Tel. (3432) 49-9138*

Experimental data, band structure calculations, and theoretical investigations within the many-electron model for half-metallic ferromagnets (HMF) are reviewed. These substances are characterised by the presence of an energy gap for one of the spin projections and make up a separate class of strong itinerant magnets, which includes some Heusler alloys (e.g., PtMnSb), CrO<sub>2</sub>, etc. Some HMFs and similar systems are promising magnetic materials, in particular they possess unique magneto-optical properties. From the theoretical point of view, HMFs are interesting of distinct nonquasiparticle (spin-polaron) effects, e.g., in the spin polarization of current carriers and in the nuclear magnetic relaxation rate. Ideas of the HMF theory turn out to be useful also for "conventional" itinerant magnets including iron group metals.

Bibliography — 128 references

*Received 4 March 1994*