

разбавленных сплавов (тип 4). Т. о., следует ожидать, что в веществах типа 2 и 4 энергетич. параметр (обменный интеграл) прямого обмена исчезающе мал. Поэтому в таких веществах обменное взаимодействие, приводящее к магн. атомному порядку, должно носить характер косвенной связи магн. ионов через электроны проводимости, или т. н. *РККИ-обменного взаимодействия*. Наконец, в веществах типа 1 электроны, принимающие активное участие в атомном магн. порядке, состоят из бывших $3d$ - и $4s$ -электронов изолир. атомов. В отличие от $4f$ -слоёв РЗМ-ионов, имеющих очень малый радиус, более близкие к периферии $3d$ -электроны атомов группы Fe испытывают более существенную коллективизацию и совместно с $4s$ -электронами образуют общую ферми-жидкость электронов проводимости. Однако в отличие от нормальных (непереходных) металлов, эта система в d -металлах обладает гораздо большей плотностью состояний вблизи поверхности Ферми, что благоприятствует обменным силам в их конкуренции с размагничивающими «тенденциями» ферми-газа (см. Паули парамагнетизм) и приводит к Ф. в Fe, Co, Ni и их многочисл. сплавах и соединениях. В последнее время начали интенсивно исследоваться т. н. кондовские ферромагнетики (CeRh₃Be₂, CeSi_x и др.), в k -рых f -электроны (обычно от Ce) частично делокализуются за счёт Кондо эффекта. Эти вещества по ряду свойств напоминают РЗМ-ферромагнетики, а по другим — зонные магнетики на основе d -металлов; не совсем обычными свойствами обладают и активные магнетики, среди k -рых встречаются ферромагнетики.

В целом квантовая теория Ф. даёт возможность качественно понять возникновения Ф. как результата положит. обменного взаимодействия. Однако количественно она далека от завершения. В последовательной микроскопич. теории прежде всего нужно определить знак осн. энергетич. параметра обменного взаимодействия ($\epsilon_{об}$, см. в ст. Магнетизм). Для этого необходимо знать энергетич. спектр и волновые ф-ции системы электронов, участвующих в Ф. Однако пока точных сведений об этих величинах нет, и поэтому приходится пользоваться приближёнными подходами. Существуют 3 осн. модели Ф.: а) модель локализованных атомных магн. моментов (см. Гейзенберга модель, а также полярная модель и Хаббарда модель); б) модель коллективизированных электронов, предложенная Я. И. Френкелем и Э. Стонером (E. Stoner) (см. Стонера модель, Зонный магнетизм); в) $s-d(f)$ -обменная модель (см. Шубина — Вонсовского модель и Зинера модель). В модели а) предполагается, что атомные магн. моменты жёстко локализованы около узлов решётки и не принимают участия в процессах переноса в веществе. Эта модель лучше всего подходит для описания магн. порядка в немагн. веществах (тип 3). В модели б) предполагается, что в ферми-системе электронов проводимости сильная обменная связь делает энергетически более выгодным Ф. Эта модель лучше всего подходит для объяснения Ф. d -металлов. Наконец $s-d(f)$ -обменная модель в известном смысле объединяет первые две, допуская подмагничивание системы электронов проводимости. Модель в) лучше всего подходит для описания веществ типа 2 и 4. Большое эвристик. значение имеет изучение сильно разбавленных растворов (тип 4), а также Кондо-решёток, поскольку выяснение условий «сохранения», а иногда и резкого увеличения магн. моментов в сплаве (за счёт поляризации окружающей атом примеси электронов проводимости диамагн. матрицы) по сравнению с их значением в изолир. парамагн. ионах может прояснить детали возникновения Ф. в d -металлах, их сплавах и соединениях.

Теория самопроизвольной намагниченности. Конкретные расчёты по всем трём моделям Ф. могут проводиться как в квазиклассич. и феноменологич. приближениях, так и с помощью квантовомеханич. методов, в т. ч. метода функционала спиновой плотности. При квазиклассич. описании Ф. учитываются введением молекулярного поля. В простейшем расчёте для газа из N электронных спинов (на основе Изинга модели) их можно разбить соответственно двум возможным проекциям на r «правых» и $N-r$ «

«левых». Тогда относит. намагниченность системы «вправо» равна $y = (r-l)/N$. Энтропия «газа» при пренебрежении взаимодействием между спинами равна $S(y) = k \ln(N! / r! l!)$ (k — Больцмана постоянная). Если энергия «газа» U не зависит от y , то свободная энергия равна

$$F(y) = TS(y) = \frac{1}{2} NkT [(1+y) \ln(1+y) + (1-y) \ln(1-y)]. \quad (1)$$

Из условия минимума (1) следует, что $y=0$, т. е. Ф. отсутствует. Для его существования необходимо принять, что U зависит от y . В простейшем случае (гипотеза молекулярного поля Вейса)

$$U = -NA'y^2, \quad (2)$$

где $A' > 0$ — постоянная молекулярного поля, отнесённая к одному спину. Из условия минимума $F(y) = -NA'y^2 - TS(y)$ находим:

$$y = \text{th}(T_C y / T), \quad (3)$$

где $T_C = 2A'/k$ — точка Кюри. Ф-ла (3) даёт выражение для зависимости $M_\infty(T)$ при $H=0$, качественно согласующееся с кривой на рис. 3.

В квазиклассич. и феноменологич. подходе были даны многочисл. уточнения приведённого расчёта. В частности, проводился учёт ближнего магн. порядка (метод Бете — Файерлса — Вейса), развита термодинамич. теория ферромагн. превращения (см. Ландау теория), в рамках k -рой был также рассмотрен вопрос о температурной зависимости разл. физ. свойств ферромагнетиков вблизи точки Кюри. Последние обычно описываются степенным законом типа $(T - T_C)^\alpha$, где показатель степени α наз. критическим показателем. Эти показатели для намагниченности, теплоёмкости, восприимчивости вычисляются в рамках моделей Изинга, Гейзенберга и более общих схем по Ландау, а также на основе ренормализационной группы по Вильсону (см. Эpsilon-разложение). Более строгое уточнение приведённого выше расчёта дала квантовая механика, оправдавшая выбор зависимости (2) и объяснившая физ. природу параметра A' как меры обменной связи, зависящей от взаимной ориентации электронных спинов. Согласно Дираку (см. Обменная взаимодействие и Гейзенберга модель), оператор обменной энергии системы электронных спинов имеет вид

$$\hat{H}_{обм} = -2 \sum_{q,q'} A_{qq'} \hat{S}_q \hat{S}_{q'}, \quad (4)$$

где \hat{S}_q — оператор вектора спина атома в узле q ; $A_{qq'}$ — интеграл обмена между электронами в узлах q и q' . Если $A_{qq'}$ резко падает с расстояниями между узлами, то можно ограничиться приближением ближайших соседей и, введя обозначение $A_{q, q \pm 1} = A$, написать (4) в форме

$$\hat{H}_{обм} \approx -2A \sum_{\text{ближ. сос.}} \hat{S}_q \hat{S}_{q'}. \quad (5)$$

Квадрат суммарного спина всех N электронов равен

$$\left(\sum_q \hat{S}_q \right)^2 = \sum_q \hat{S}_q^2 + \sum_{q \neq q'} \hat{S}_q \hat{S}_{q'} = Ns(s+1) + \sum_{q \neq q'} \hat{S}_q \hat{S}_{q'} = S(S+1),$$

где S — полное спиновое квантовое число системы, а s — одного узла. Число членов парных произведений равно $N(N-1)$. Поэтому ср. значение отд. члена этой суммы равно

$$\overline{\hat{S}_q \hat{S}_{q'}} = [S(S+1) - Ns(s+1)] / N(N-1).$$

Число членов в сумме (5) равно $(1/2)zN$, где z — число ближайших соседей у узла решётки. Т. о., ср. значение гамильтониана системы равно

$$\bar{H} = -[zA/(N-1)] [S(S+1) - Ns(s+1)].$$

Поскольку $s \sim 1$, а S — порядка намагниченности всей системы $M = Ny$ (в единицах магнетона Борн μ_B), то в ферромагнетике с точностью до членов $\sim 1/N$