

附件 3

自然科学奖推荐号：2025-120-2043

项目名称	基于价电子状态实验结果的磁性材料新巡游电子模型研究
提名单位	河北省教育厅
项目简介	北京大学资深教授戴道生先生在《铁磁学》教科书中指出“在铁磁学已建立的理论中，大部分仍落后于实验和应用现状的发展和要求”，解决这些问题是磁性实验和理论研究工作“面临的艰巨任务”。美国斯坦福大学 J.Stöhr 和 H.C.Siegmann 教授在他们的著作中也有类似的评论。该项目是直面这个艰巨任务的一套系统性研究工作。 该项目属于凝聚态物理学中的磁学和磁性材料研究方向，由河北师范大学唐贵德课题组与中国科学院物理研究所吴光恒研究员、胡凤霞研究员(曾任磁学国家重点实验室主任)合作完成，基于近年来大量价电子状态实验结果(包括代表性论文 2、3)，建立了一套新的模型体系，发表一系列论文，解释了典型磁性氧化物和金属的磁有序现象，包括用传统磁有序模型难以解释的一些实验现象，综述文章“典型磁性材料磁有序的三个模型”（代表性论文 1），于 2018 年应约发表在《Physics Reports》(2019 版 IF=28.295，在物理类顶尖期刊中仅次于 Reviews of Modern Physics)，核心内容全部是该项目组的成果。 主要研究内容和科学发现点如下： 1. 提出一个关于磁性氧化物的 O2p 巡游电子模型(IEO 模型，代表性论文 1 第 3.2 节)。基于 IEO 模型，在同一磁性子晶格中如果 3d 过渡金属离子的 3d 电子数目 n_d 同时满足 $n_d \geq 5$ (或 $n_d = 4$)，则它们的磁矩平行排列；如果一个阳离子的 $n_d \geq 5$，另一个阳离子的 $n_d = 4$，则它们的磁矩反平行排列。从而合理解释了一些多

年来难以解释的典型磁性氧化物的磁有序问题(代表性论文 1 第 3 至 6 章)。

2. 提出一个关于磁性金属的新巡游电子模型(IEM 模型, 代表性论文 1 第 7 章): 基于 IEM 模型, 利用 Fe、Co、Ni 金属中平均原子磁矩的实验值, 估算出了其中每个原子贡献的自由电子平均数目 n_f , 对于 Fe、Ni、Co、Cu, 得到其电阻率的实验值随 n_f 的增加而减小, 从而基于价电子结构建立了磁性金属电阻率与磁矩之间的关系。

3. 提出一个关于磁性材料磁有序能的外斯电子对(WEP)模型(代表性论文 1 第 8 章): 基于 WEP 模型, 在未满 3d 壳层的金属离子实间, 或这些离子与氧离子间可形成具有一定几率和寿命的自旋相反的电子对, 即 WEP, 提出 WEP 两个电子间的静磁吸引能是磁有序能的主要来源, 发现几种典型磁性材料的居里温度随一个磁性离子周围能够形成 WEP 的化学键数目(M_{WEP})的减小而降低。

基于这套新巡游电子模型, 巡游电子定义为在相邻离子间具有某种跃迁几率的外层轨道价电子, 还统一解释了几种典型磁性氧化物和磁性金属的电输运实验现象。例如, 用双通道并联电路拟合了几种磁性氧化物和磁性合金的电阻率随温度变化曲线(代表性论文 4、5), 表明在磁性金属和磁性氧化物中巡游电子具有相似的性质。

该项目五篇代表性论文他引 332 次, 迄今为止, 还没有发现相似的其它系统性研究工作。代表性专著《磁性材料的新巡游电子模型》引用了 5 篇代表性论文和该项目组的有关论文以及大量背景文献, 中文版由科学出版社出版(2020), 英文版由科学出版社与国际知名出版商 Springer 合作出版(2021), 磁学领域资深专家、中国科学院院士都有为先生为专著作序, 指出这些研究工作“对于改进磁性材料价电子结构理论是有益的”, “为磁性材料磁有序研究提供了新的思路”。

代表性论文专著目录

- [1] **G. D. Tang***, **Z. Z. Li**, L. Ma, W. H. Qi, **L. Q. Wu**, X. S. Ge, **G. H. Wu and F. X. Hu**, Three models of magnetic ordering in typical magnetic materials, *Physics Reports*, **2018**, 758: 1-56. (中科院 1 区, 物理顶刊, **2019** 版 IF=28.295, 他引 53 次)
- [2] **L. Q. Wu**, S. Q. Li, Y. C. Li, **Z. Z. Li**, **G. D. Tang***, W. H. Qi, L. C. Xue, L. L. Ding and X. S. Ge, Presence of monovalent oxygen anions in oxides demonstrated using X-ray photoelectron spectra, *Applied Physics Letters*, **2016**, 108:021905. (中科院2区, IF=3.411, 他引42次)
- [3] **L.Q.Wu**, Y.C.Li, S.Q.Li, **Z.Z.Li**, **G.D.Tang***, W.H.Qi, L.C.Xue, X.S.Ge, and L.L.Ding, Method for estimating ionicities of oxides using O1s photoelectron spectra, *AIP Advances*, **2015**, 5 : 097210. (中科院 3 区, IF=1.444, 他引 212 次)
- [4] J. J. Qian, W. H. Qi, **Z. Z. Li**, L. Ma, **G. D. Tang***, Y. N. Du, M. Y. Chen, G. H. Wu, and F. X. Hu, Spin-dependent and spin-independent channels of electrical transport in perovskite manganites, *RSC Advances*, **2018**, **8**, 4417-4425. (中科院 3 区, IF=3.049, 他引 22 次)
- [5] **Z. Z. Li**, # W. H. Qi, # L. Ma,¹ **G. D. Tang***, **G. H. Wu**, **F. X. Hu**, Free and itinerant electron channels in magnetic NiCu alloys, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **2019**, 482:173-177. (中科院 3 区, IF=2.717, 他引 3 次)
- [6] 唐贵德, 磁性材料的新巡游电子模型, 科学出版社, 北京, 2020.

补充说明：代表性论文 **1** 是一篇综述论文，共引用文献 **144** 篇，包括该项目组相关研究论文 **32** 篇(在附件中用黄色高亮显示)，编号为 **71**、**131**、**136** 的 **3** 篇文献，分别为该项目组首次报道发现点 **1**、**2**、**3** 的文章。代表性专著《磁性材料场新巡游电子模型》引用了 **5** 篇代表性论文和该项目组的有关论文以及大量背景文献，该专著英文版于 **2021** 年由科学出版社和国际知名出版商 **Springer** 合作出版。

主要完成人情况表（排名、姓名、技术职称、工作单位、对本项目技术创造性贡献、曾获奖励情况）

排名	姓名	技术职称	工作单位	完成单位	贡献	曾获奖情况
1	唐贵德	教授	河北师范大学	河北师范大学	项目负责人，提出该项目的主要学术思想与研究思路，负责研究方向的确定、研究方案的提出，研究路线的制订和可行性分析及项目的组织和实施，分析总结研究结果并撰写科学论文等，对所有发现点做出了重要贡献，为所有 5 篇代表性论文的通讯作者兼代表性论文 1 的第一作者，代表性专著 6 的唯一作者。	2014年，《钙钛矿和尖晶石结构磁性氧化物的阳离子分布研究》，河北省自然科学一等奖，2014ZR1001-1，第1完成人。2016年，获国务院“政府特殊津贴”。 2019年，河北政府授予“河北省杰出专业技术人才”荣誉称号
2	武力乾	副研究员	杭州电子科技大学	河北师范大学	攻读硕士学位期间，在导师唐贵德教授的指导下，测量并分析了一些氧化物的X射线光电子谱；制备了多系列钙钛矿锰氧化物，应用磁性氧化物的O2p巡游电子模型，对实验结果进行了分析。是代表性论文2、3的第一作者，代表性论文1的参与者。	无
3	李壮志	副教授	河北师范大学	河北师范大学	项目参与人，参与研究方案的提出、研究路线的制订和可行性分析，负责部分研究工作的实验结果分析，总结研究结果并协助撰写论文等，对部分发现点做出了贡献，是代表性论文5的第一作者，其它4篇代表性论文的参与作者。在唐贵德主持的国家自然科学基金面上项目(11174069)主要参与者中排名第一	2014年，《钙钛矿和尖晶石结构磁性氧化物的阳离子分布研究》，河北省自然科学一等奖，2014ZR 1001-4，第4完成人。
4	吴光恒	研究员	中国科学院物理研究所	中国科学院物理研究所	项目参与人，对项目的主要学术思想与研究思路、研究方案提出指导意见。是代表性论文1、4、5的署名作者。	2012年国家自然科学二等奖；2017年国家自然科学二等奖；2011年北京市科学技术奖一等奖；2005年教育部自然科学一等奖；2012和2013中国科学院优秀导师奖；朱李月华优秀教师奖（2012）
5	胡凤霞	研究员	中国科学院物理研	中国科学院物理研	项目参与人，对项目的主要学术思想与研究思路、研究方案提出指导意见。是代表性论文1、4、5的	曾获国家自然科学二等奖(2/5)、北京市科学技术奖一等奖(2/5)、陈嘉庚技术科

			究所	究所	署名作者.	学奖(2/3),
--	--	--	----	----	-------	----------

完成人合作关系说明

项目负责人唐贵德，提出该项目的主要学术思想与研究思路，负责研究方向的确定、研究方案的提出，研究路线的制订和可行性分析及项目的组织和实施，分析总结研究成果并撰写科学论文等，对所有发现点做出了重要贡献，为所有 5 篇代表性论文的通讯作者兼代表性论文 1 的第一作者，代表性专著 6 的唯一作者。武力乾在攻读硕士学位期间，在导师唐贵德的指导下，测量并分析了一些氧化物的 X 射线光电子谱；制备了多系列钙钛矿锰氧化物，应用关于磁性氧化物的 O2p 巡游电子模型，对实验结果进行了分析。是代表性论文 2、3 的第一作者，李壮志参与研究方案的提出、研究路线的制订和可行性分析，负责部分研究工作的实验结果分析，总结研究成果并协助撰写论文等，对部分发现点做出了贡献，是代表性论文 5 的第一作者，其它 4 篇代表性论文的参与作者。在本项目的国家自然科学基金面上项目(11174069)成员中紧排在主持人唐贵德之后。吴光恒和胡凤霞是项目参与人，对项目的主要学术思想与研究思路、研究方案提出指导意见。是代表性论文 1、4、5 的署名作者。

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果	备注(证明材料)
1	共同立项	唐贵德/1 李壮志/2	2012-2015	共同申请并完成了国家自然科学基金面上项目“尖晶石铁氧化物中阳离子分布的量子力学方法研究”(11174069)。	3.8.1 国家自然科学基金结面上项目题报告，报告正文 3，研究人员合作与分工
2	论文合著	唐贵德/1，通讯作者 李壮志/2，武力乾/5， 吴光恒/7，胡凤霞/8	2015-2018	典型磁性材料磁有序的三个模型	1.1.1 代表性论文 1
3	论文合著	唐贵德/通讯作者 武力乾/1，李壮志/4	2015-2016	用 X 射线光电子谱证明氧化物中存在单价氧离子	1.1.2 代表性论文2
4	论文合著	唐贵德/通讯作者 武力乾/1，李壮志/4	2014-2015	用 O1s 光电子谱估算氧化物电离度的方法	1.1.3 代表性论文3
5	论文合著	唐贵德/通讯作者 李壮志/3，吴光恒/8， 胡凤霞/9	2017-2018	钙钛矿锰氧化物中电输运的自旋相关通道和自旋无关通道	1.1.4 代表性论文4
6	论文合著	唐贵德/通讯作者 李壮志/1，吴光恒/5， 胡凤霞/6	2018-2019	磁性镍铜合金的自由电子和巡游电子通道	1.1.5 代表性论文5

注：所填报内容必须与推荐书中提交的完全一致，否则责任自负，可自行调整行间距。