

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия
Красноярский государственный университет
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 20 июня 1996 г.

Показано, что влияние магнитного упорядочения в магнитных полупроводниках через механизм $s-d(f)$ -обменного взаимодействия имеет существенное значение для объяснения экспериментально обнаруженных в [7] температурных квантовых осцилляций намагниченности зонных электронов. Проанализировано влияние гибридизации зонных и локализованных электронов на амплитуду эффекта. Установлено, что амплитуда осцилляционных эффектов вследствие сильных внутриатомных корреляций существенно зависит от знака константы J .

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди большого разнообразия веществ с сильными электронными корреляциями в последнее время вызывают интерес так называемые сильнокоррелированные системы с низкой концентрацией носителей тока. Яркими представителями этого класса веществ являются редкоземельные монопниктиды [1–4] с общей формулой ReX , где Re обозначает название редкоземельного элемента, а X — P , As , Sb . Комплексом нетривиальных свойств обладают монопниктиды церия $CeAs$, $CeSb$, CeP [2–4]. Эти соединения, являясь полуметаллами, при низких температурах проявляют присутствие в них дальнего магнитного порядка. Электронная структура цериевых монопниктидов обуславливается наличием валентной зоны с потолком в Γ -точке зоны Бриллюэна, а также зоны проводимости, формируемой в окрестности X -точки симметрии зоны Бриллюэна. Экспериментально установлена хорошая степень электрон-дырочной компенсации. Исследование эффекта де Гааза–ван Альфена в монопниктидах церия подтверждает эти главные черты их электронного строения. Вместе с тем тонкие особенности в поведении частот осцилляций де Гааза–ван Альфена потребовали привлечения новых концепций [3, 4], связанных, прежде всего, с наличием магнитного упорядочения.

Существенное влияние магнитного порядка на электронные свойства материалов, как известно [5, 6], имеется в магнитных полупроводниках. В этих соединениях гибридизационное взаимодействие между коллективизированными и локализованными электронами может приводить к зависимости кинетических характеристик от сильных одноузельных корреляций. Поэтому такие магнитные полупроводники можно отнести

* e-mail: vvv@iph.krasnoyarsk.su

к отмеченному выше классу систем с низкой концентрацией носителей тока. Примером такого соединения является ферромагнитный полупроводник HgCr_2Se_4 .

Недавно были опубликованы [7] результаты экспериментальных исследований по температурным квантовым осцилляциям намагниченности носителей тока в HgCr_2Se_4 . Теоретическое предсказание этих осцилляций было сделано ранее в работе [8]. Однако при количественном сопоставлении экспериментальных данных [7] с выводами работы [8] выявилось существенное расхождение, связанное со следующим обстоятельством. Для отчетливого экспериментального наблюдения температурных квантовых осцилляций необходимо, чтобы фазы осциллирующих слагаемых для намагниченности при изменении температуры от нуля до $T \sim \hbar\omega_c$ (при больших температурах осциллирующие слагаемые экспоненциально малы) изменились на величину большую, чем 2π . В условиях низкой концентрации зонных носителей достигнуть такого изменения фазы становится затруднительным. Поэтому для интерпретации представленных в [7] результатов требуется привлечение дополнительного физического механизма, обеспечивающего возможность проявления большего числа осцилляций намагниченности зонных электронов при изменении температуры, прежде чем они успеют затухнуть.

Как известно [5, 6], сильная связь коллективизированных и локализованных электронов в магнитных полупроводниках экспериментально подтверждается смещением края оптического поглощения в температурной области существования магнитного упорядочения. Физической причиной, обуславливающей сдвиг дна зоны проводимости и (или) потолка валентной зоны, является s - $d(f)$ -обменное взаимодействие между спиновыми моментами двух групп электронов [9]. Именно это взаимодействие позволило интерпретировать экспериментальные данные по гигантскому влиянию магнитного поля на оптические свойства HgCr_2Se_4 , обнаруженному недавно авторами работы [10].

Принимая во внимание отмеченные факты, нетрудно сделать предположение, что s - $d(f)$ -обменное взаимодействие может играть существенную роль в формировании температурных квантовых осцилляций. Физика предполагаемого механизма влияния магнитного упорядочения на температурные квантовые осцилляции достаточно проста. Увеличение температуры приводит к уменьшению намагниченности локализованной подсистемы. Из-за s - $d(f)$ -обменной связи это вызывает движение уровней Ландау. В результате часть верхних уровней Ландау будет опустошаться, а электроны переходить в локализованные состояния, увеличивая число двухвалентных ионов хрома. Для реализации этого процесса существенное значение имеет близость значений химического потенциала и энергии, соответствующей переходу $\text{Cr}^{3+} \rightarrow \text{Cr}^{2+}$. Такая динамика вызывает хорошо известные осцилляции плотности электронных состояний и будет проявляться, в частности, в осциллирующей зависимости намагниченности коллективизированных электронов при возрастании температуры. В рамках этих рассуждений нетрудно вывести простой критерий реализации температурных квантовых осцилляций. При возрастании температуры от нуля до $T \sim \hbar\omega_c$ намагниченность уменьшается на величину $\sim (\hbar\omega_c/4\pi sI)^{3/2}$. Тогда обсуждаемый эффект будет иметь место, если вызванное s - $d(f)$ -обменом смещение уровней значительно превышает расстояние между уровнями Ландау, т. е.

$$\alpha \equiv \left| \frac{J}{4\pi sI} \right| \left(\frac{\hbar\omega_c}{4\pi sI} \right)^{1/2} \gg 1,$$

где J — константа s - $d(f)$ -обменного взаимодействия, I — интеграл обменного взаимодействия в локализованной подсистеме. Если взять характерные для магнитных полу-

проводников значения $J \sim 0.4$ эВ, $4\pi sI \sim T_c \sim 10^2$ К, $\hbar\omega_c \sim 10$ К, то $\alpha \approx 8$, и условия реализации температурных квантовых осцилляций выполняются.

Следует, однако, заметить, что гибридационное взаимодействие действует в направлении существенного подавления эффекта де Гааза–ван Альфена вообще и температурных квантовых осцилляций в частности. Поэтому оценка возможности эффекта по приведенному выше критерию при наличии гибридазации может оказаться слишком оптимистической. В этой связи особое значение приобретает учет одноузельных корреляций, которые перенормируют константу гибридационного взаимодействия. Для дальнейшего существенно, что при определенных условиях (см. ниже) такая перенормировка может нейтрализовать негативное влияние смешивания коллективизированных и локализованных состояний и сделать наблюдаемыми температурные квантовые осцилляции.

Приведенные соображения по магнитным полупроводникам и полуметаллическим цериевым монопниктидам обосновывают актуальность изучения влияния магнитного упорядочения в сильнокоррелированных системах как на эффект де Гааза–ван Альфена, так и на температурные квантовые осцилляции. В данной статье мы рассмотрим случай ферромагнитного упорядочения в подсистеме локализованных спинов. Такой тип дальнего магнитного порядка реализуется в халькогенидных хромовых шпинелях. Поэтому результаты данной статьи будут непосредственно применимы к HgCr_2Se_4 и использованы для интерпретации обнаруженных в [7] температурных квантовых осцилляций. Сильнокоррелированные системы с антиферромагнитным типом порядка (цериевые монопниктиды) будут рассмотрены отдельно. Здесь лишь отметим, что качественная сторона влияния дальнего порядка в локализованной подсистеме на формирование температурных квантовых осцилляций одинакова для обоих типов магнитного упорядочения.

Изложение дальнейшего материала организовано следующим образом. В разд. 2 кратко описывается модель электронной структуры HgCr_2Se_4 , учитывающая сильные внутриатомные корреляции. Вывод основных уравнений для гриновских функций и обсуждение условий применимости сделанных приближений проводится в разд. 3. В разд. 4 вычисляется термодинамический потенциал системы в условиях квантования Ландау и присутствия гибридационного взаимодействия. Анализ влияния магнитного упорядочения на температурную и полевую зависимости намагниченности зонных электронов осуществляется в разд. 5. Показано, что температурное уменьшение магнитного параметра порядка через механизм s - $d(f)$ -обменной связи может приводить к сильному движению уровня Ландау. Это обстоятельство является ключевым при количественном описании температурных квантовых осцилляций. Обсуждение результатов проводится в разд. 6.

2. ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ

Влияние магнитного упорядочения на температурные квантовые осцилляции в сильнокоррелированных системах проведем на примере модели электронного строения HgCr_2Se_4 . Электронная структура магнитных полупроводников вообще, и халькогенидных хромовых шпинелей в частности, рассмотрена в монографиях [5, 6]. Концепция многоэлектронных операторов Хаббарда [11–13], позволяющих хорошо описывать сильные одноузельные корреляции, была использована в теории халькогенидных хромовых

шпинелей в работах [14–16]. Используя эту идеологию, запишем гамильтониан модели, воспроизводящий энергетический спектр HgCr_2Se_4 , в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{f,m} (E_1 - g\mu_B H m - 3\mu) X_f^{mm} + \\ & + \sum_{f,m'} (E_2 - g\mu_B H m' - 4\mu) X_f^{m'm'} - \frac{1}{2} \sum_{f,l} I_{fl} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_l) - \\ & - \sum_f J(\mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_f) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{f\mathbf{k}\sigma} (v_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_f) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{f\sigma} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (1)$$

Первое слагаемое гамильтониана описывает подсистему коллективизированных электронов в магнитном поле H с энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - 2\sigma\mu_B H$, $\sigma = \pm 1/2$, μ_B — магнетон Бора. Второе слагаемое в (1) учитывает состояния трехвалентных ионов хрома, обладающих энергией E_1 и соответствующих конфигурации внешних электронов $3d^3$. Наличие спиновых степеней свободы выражается суммированием по проекции спинового момента на ось z , обозначаемой через m . Конфигурации $3d^3$ (Cr^{3+}) соответствует спиновый квартет ($S = 3/2$), который в магнитном поле испытывает расщепление с g -фактором, близким к 2 из-за замороженности орбитального момента в кристаллическом поле. Суммирование по m проводится по полуцелым значениям от $m = -3/2$ до $m = 3/2$. Операторы X_f^{nm} представляют собой хорошо известные в теории сильнокоррелированных систем операторы Хаббарда [11–13]. Несмотря на относительную сложность коммутационных соотношений для этих операторов к настоящему времени разработаны эффективные методы расчета систем в атомном представлении. Таковым, в частности, является метод диаграммной техники для операторов Хаббарда [17–19]. Диагональные операторы Хаббарда X_f^{nn} по существу являются проекционными операторами на выбранное подпространство атомных (ионных) состояний для узла f . Недиагональный оператор X_f^{nm} описывает переход иона на узле f из состояния $|f, m\rangle$ в состояние $|f, n\rangle$. В обозначениях бра- и кет-векторов Дирака операторы Хаббарда можно записать в виде

$$X_f^{nm} \equiv |f, n\rangle \langle f, m|.$$

Третье слагаемое гамильтониана учитывает состояния ионов Cr^{2+} с электронной конфигурацией $3d^4$ и энергией E_2 . Этой конфигурации в кристаллическом поле соответствуют состояния со спиновым моментом $S = 1$. Триплетный характер отражается наличием суммирования по m' от $m' = -1$ до $m' = 1$. Четвертый член гамильтониана соответствует учету обменного взаимодействия между спиновыми моментами локализованной подсистемы. Пятое слагаемое в (1) описывает обменную связь локализованных и коллективизированных электронов в рамках s - $d(f)$ -обменного взаимодействия [6, 9]. Наконец, последнее слагаемое гамильтониана описывает процессы гибридизационного взаимодействия, когда рождение (уничтожение) электрона в зоне проводимости сопровождается переходом иона хрома из состояния Cr^{2+} (Cr^{3+}) в состояние Cr^{3+} (Cr^{2+}). При этом электронный оператор $d_{f\sigma}$ выражается в виде линейной суперпозиции многоэлектронных операторов Хаббарда [14]:

$$d_{f\uparrow} = -\frac{1}{\sqrt{3}} X_f^{1/2,1} - \sqrt{\frac{2}{3}} X_f^{-1/2,0} - X_f^{-3/2,-1},$$

$$d_{f1} = X_f^{3/2,1} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_f^{1/2,0} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_f^{-1/2,-1}. \quad (2)$$

Здесь полуцелые значения индексов соответствуют состояниям иона Cr^{3+} с полуцелыми значениями проекции спинового момента, тогда как целые числа нумеруют состояния иона Cr^{2+} с проекцией спина $m' = \pm 1, 0$.

3. ФУНКЦИИ ГРИНА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР

Для рассмотрения эффектов де Гааза-ван Альфена и температурных квантовых осцилляций необходимо вычислить термодинамический потенциал Ω системы. С этой целью удобно воспользоваться методом интегрирования по константе связи [20]. Имея это в виду, определим необходимые для дальнейшего рассмотрения мацубаровские функции Грина:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle = T \sum_{\omega_n} \exp(-i\omega_n(\tau - \tau')) G_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n),$$

$$F_{\mathbf{k}\sigma}(f; \tau - \tau') = -\langle T_{\tau} \bar{d}_{f\sigma}(\tau) \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle = T \sum_{\omega_n} \exp(-i\omega_n(\tau - \tau')) F_{\mathbf{k}\sigma}(f; \omega_n). \quad (3)$$

Для получения системы уравнений, определяющей введенные функции Грина, существенным оказывается следующее упрощающее задачу обстоятельство. Номинально чистые образцы HgCr_2Se_4 обладают проводимостью n -типа с концентрацией носителей $\sim 10^{17}-10^{18} \text{ см}^{-3}$. При таких низких концентрациях зонных электронов (в расчете на один узел концентрация электронов n составляет величину $\sim 10^{-4}-10^{-3}$) влияние последних на состояние локализованной подсистемы пренебрежимо мало [6]. Это означает, например, что температурное поведение намагниченности подсистемы локализованных спинов определяется с хорошей точностью свойствами самой локализованной подсистемы. В то же время спектральные характеристики зонных электронов будут в существенной степени управляться через механизм s - $d(f)$ -обменного взаимодействия степенью магнитного упорядочения, а через гибридационное взаимодействие одноузельными корреляциями. Эти главные эффекты описываются низшими порядками теории возмущений, и учет только их мы в дальнейшем ограничимся. На диаграммном языке [17-19] отмеченное приближение соответствует учету лишь беспетлевых диаграмм, а при описании методом уравнений движения — расщеплению в высших функциях Грина.

На основании сказанного запишем в отмеченном приближении уравнения для функций Грина:

$$(i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} + \mu) G_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) = 1 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f v_{\mathbf{k}f} e^{-i\mathbf{k}R_f} F_{\mathbf{k}\sigma}(f; \omega_n),$$

$$(i\omega_n - \bar{\epsilon}_{d\sigma} + \mu) F_{\mathbf{k}\sigma}(f; \omega_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} v_{\mathbf{k}}^* e^{i\mathbf{k}R_f} K_{\sigma} G_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n),$$

где перенормированные энергии определяются выражениями

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} = \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \sigma J R, \quad \bar{\epsilon}_{d\sigma} = \epsilon_d - \sigma \bar{H}, \quad \sigma = \pm 1/2. \quad (5)$$

Здесь R обозначает среднее значение z -проекции локализованного спинового момента:

$$R = \frac{1}{N} \sum_f \langle S_f^z \rangle, \quad (6)$$

а \bar{H} — эффективное поле, определяющее расщепление локализованных уровней энергий:

$$\bar{H} = g\mu_B H + I_0 R + J\sigma_c, \quad (7)$$

I_0 — фурье-образ обменного интеграла для $\mathbf{q} = 0$, σ_c — намагниченность коллективизированной подсистемы в единицах μ_B , приходящаяся на один узел. При отмеченных выше значениях концентрации электронов проводимости этой величиной можно пренебречь.

Наличие одноузельных корреляций отражается возникновением множителя K_σ :

$$K_\sigma = \frac{1}{N} \sum_f \langle [d_{f\sigma}, d_{f\sigma}^\dagger]_+ \rangle = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{2} - 2\sigma R + \frac{1}{2} n_d \right), \quad (8)$$

где

$$n_d = \frac{1}{N} \sum_f \langle X_f^{1,1} + X_f^{0,0} + X_f^{-1,-1} \rangle \quad (9)$$

определяет одноузельную концентрацию ионов Cr^{4+} .

Решая систему (4), находим

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) = \frac{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{d\sigma} + \mu}{(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^- + \mu)(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \mu)},$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikR_f} v_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}\sigma}(f, \omega_n) = \frac{K_\sigma |v_{\mathbf{k}}|^2}{(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^- + \mu)(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \mu)}, \quad (10)$$

где миксонный спектр определяется обычными выражениями [13]:

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^\pm = \frac{1}{2}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} + \tilde{\epsilon}_{d\sigma}) \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{\epsilon}_{d\sigma}}{2}\right)^2 + K_\sigma |v_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (11)$$

Из (11) видно, что имеет место перенормировка параметра гибридизационного взаимодействия, обусловленная учетом одноузельных корреляций. Ввиду важности данного факта в формировании температурных квантовых осцилляций остановимся на физической стороне причины перенормировки. При $T = 0$ ионы Cr^{3+} находятся в состоянии с проекцией спинового момента $m = 3/2$. Поэтому электрон с проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$ не может перейти в локализованное состояние (высокоспиновые состояния обладают большей энергией и по этой причине не включены в низкоэнергетический базис ионных состояний). Электрон же с противоположной проекцией спинового момента может перейти в локализованное состояние без всяких ограничений. В результате возникает зависимость эффективной гибридизации от направления спинового момента у электронов, причем гибридизация оказывается подавленной для электронов с $\sigma = +1/2$ в области низких температур.

С математической точки зрения одноузельные корреляции адекватно отражаются алгеброй операторов Хаббарда и в рассматриваемом приближении формально проявляются в виде мультипликативной перенормировки гибридационного взаимодействия $|v_k|^2 \rightarrow |\tilde{v}_{k\sigma}|^2 = K_\sigma |v_k|^2$. Аналогичная перенормировка имеется и при слэив-бозонном описании [21], причем K_σ играет роль числа слэив-бозонов в конденсате. В нашем случае в соответствии с физической ситуацией $K_\uparrow \rightarrow 0$, $K_\downarrow \rightarrow 1$ при $T \rightarrow 0$. При этом в выражении для K_σ мы пренебрегаем концентрацией зонных носителей из-за малости этой величины.

4. ОСЦИЛЛИРУЮЩАЯ ЧАСТЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Известно, что для рассмотрения эффекта де Гааза–ван Альфена необходимо вычислить шпур статистического оператора, взятого в представлении Ландау [22, 23]. При низкой концентрации электронов проводимости, когда вклад в термодинамические характеристики дают лишь состояния вблизи дна зоны проводимости, оправданным является приближение эффективной массы [22]. В этом случае спектр Ландау может быть записан в виде

$$\varepsilon_{r\sigma}(p) = \left(r + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{p^2}{2m_\perp} + 2\mu_B\sigma H, \quad \sigma = \pm 1/2, \quad (12)$$

где $\omega_c = eH/cm_\perp$ — циклотронная частота [22], m_\perp — эффективная масса, соответствующая поперечному (по отношению к вектору \mathbf{H}) движению электронов, p — импульс электрона в направлении внешнего магнитного поля, m_\parallel — эффективная масса для продольного движения электрона.

В условиях смешивания коллективизированных и локализованных состояний электронов результирующий спектр электронов без учета квантования Ландау описывается выражением (11). Поскольку для нас существенны лишь состояния с малыми значениями квазиимпульса, то зависимостью параметра гибридизации v_k от \mathbf{k} можно пренебречь. В этом случае, используя квантование по Онзагеру [22], нетрудно убедиться, что спектр электронов в квантующем магнитном поле получается из (11) путем замены $\varepsilon_{k\sigma} \rightarrow \varepsilon_{n\sigma}(p)$. При этом зависимость E^\pm от индексов представления Ландау становится иррациональной. Это обстоятельство приводит к невозможности непосредственного вычисления шпура статистического оператора.

Для преодоления отмеченной трудности в работе [24] авторы предложили использовать методологию Латтинжера [25] в сочетании с техникой контурного интегрирования. В дальнейшем при получении осциллирующей части термодинамического потенциала применяется идеология работы [24].

Введем зависящий от параметра λ полный гамильтониан системы

$$\mathcal{H}(\lambda) = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_{mix}, \quad (13)$$

где \mathcal{H}_{mix} — оператор, описывающий процессы гибридационного взаимодействия (последнее слагаемое гамильтониана (1)). При $\lambda = 1$ гамильтониан (13) совпадает с гамильтонианом (1). Из этого соответствия легко увидеть смысл \mathcal{H}_0 .

Соответствующий (13) термодинамический потенциал также зависит от параметра λ :

$$\Omega(\lambda) = -T \ln \text{Sp} (\exp(-\beta \mathcal{H})) . \quad (14)$$

Введение температурной матрицы рассеяния [20]

$$S_\lambda(1/T) = T_\tau \exp \left\{ -\lambda \int_0^{1/T} \mathcal{H}_{\text{mix}}(\tau) d\tau \right\} \quad (15)$$

позволяет, как известно, записать статистический оператор в виде

$$\exp \{-\beta \mathcal{H}(\lambda)\} = \exp(-\beta \mathcal{H}_0) S_\lambda(1/T) , \quad \beta = 1/T . \quad (16)$$

Из этих соотношений следует точное уравнение:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \frac{2T}{\sqrt{N}} \sum_{\omega_n} \sum_{f\mathbf{k}\sigma} e^{i\omega_n \delta} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_f} v_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}\sigma}(f; \omega_n) , \quad \delta \rightarrow +0 . \quad (17)$$

В рассматриваемом нами приближении неизвестные величины из (17) описываются формулой (10). Поэтому

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = T \sum_{\omega_n \mathbf{k}\sigma} e^{i\omega_n \delta} \frac{2\lambda K_\sigma |v_{\mathbf{k}}|^2}{(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \mu)(i\omega_n - E_{\mathbf{k}\sigma}^- + \mu)} , \quad \delta \rightarrow +0 . \quad (18)$$

Для избавления от иррациональной зависимости спектра электронов от квантовых чисел представим электронные пропагаторы в следующей форме:

$$(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} + \mu)^{-1} = - \int_b^{b+i\infty} \exp \{-s(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} - \mu - i\omega_n)\} ds , \quad \omega_n > 0 ,$$

$$(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} + \mu)^{-1} = \int_{b-i\infty}^b \exp \{-s(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} - \mu - i\omega_n)\} ds , \quad \omega_n < 0 ,$$
(19)

где $b \rightarrow +0$. Используя эти соотношения, формулу (18) можно записать в виде, позволяющем провести в дальнейшем суммирование по индексам представления Ландау:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = T \sum_{\omega_n < 0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{b-i\infty}^b \exp \{-s[\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} - \mu - i\omega_n + \lambda^2 \psi_\sigma(\omega_n)]\} 2\lambda \psi_\sigma(\omega_n) ds -$$

$$- T \sum_{\omega_n > 0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_b^{b+i\infty} \exp \{-s[\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} - \mu - i\omega_n + \lambda^2 \psi_\sigma(\omega_n)]\} 2\lambda \psi_\sigma(\omega_n) ds , \quad (20)$$

где $\psi_\sigma(\omega_n) = K_\sigma |v|^2 / (i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{d\sigma} + \mu)$. Здесь, в соответствии со сделанным выше замечанием о малом объеме интересующей нас области \mathbf{k} -пространства, мы пренебрегли зависимостью $v_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} , взяв значение параметра гибридизации в точке экстремума.

Интегрирование уравнения (20) приводит к следующему выражению для Ω :

$$\Omega = \Omega_l - T \sum_{\omega_n < 0} \sum_{k\sigma} \int_{b-i\infty}^b \phi_{k\sigma}(s, \omega_n) \frac{ds}{s} + T \sum_{\omega_n > 0} \sum_{k\sigma} \int_b^{b+i\infty} \phi_{k\sigma}(s, \omega_n) \frac{ds}{s}, \quad (21)$$

где

$$\phi_{k\sigma}(s, \omega_n) = \exp \{ -s(\tilde{\epsilon}_{k\sigma} - \mu - i\omega_n + \psi_\sigma(\omega_n)) \}. \quad (22)$$

Слагаемое Ω_l легко определить из требования равенства

$$\Omega = \Omega_0 = -T \ln \text{Sp} (\exp(-\beta \mathcal{H}_0))$$

при нулевом значении параметра гибридизации. Поскольку для дальнейшего значение Ω_l является несущественным, конкретное выражение для Ω_l здесь не приводится.

В квантующем магнитном поле суммирование по \mathbf{k} заменяется суммированием по квантовым числам представления Ландау:

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{eHV}{4\pi^2 \hbar c} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z \sum_{r=0}^{\infty}.$$

Выполняя интегрирование по k_z и суммирование по r , из (21) находим

$$\Omega = \Omega_l + \Omega_+ + \Omega_-, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega_+ &= D \sum_{\sigma} \sum_{\omega_n > 0} \int_b^{b+i\infty} \frac{ds}{s^{3/2}} \frac{\exp \{ s(i\omega_n + \tilde{\mu}_\sigma - \psi_\sigma(\omega_n)) \}}{2 \text{sh}(s\hbar\omega_c/2)}, \\ \Omega_- &= D \sum_{\sigma} \sum_{\omega_n < 0} \int_b^b \frac{ds}{s^{3/2}} \frac{\exp \{ s(i\omega_n + \tilde{\mu}_\sigma - \psi_\sigma(\omega_n)) \}}{2 \text{sh}(s\hbar\omega_c/2)}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$D = \frac{TVeH\sqrt{2\pi m_{\parallel}}}{(2\pi\hbar)^2 c}, \quad \tilde{\mu}_\sigma = \mu + 2\sigma\mu_B H + \sigma J R.$$

Дальнейшие преобразования связаны с выделением из ω осциллирующей части термодинамического потенциала. Поскольку точка $s = 0$ является точкой ветвления, сделаем разрез плоскости комплексной переменной s вдоль полуоси отрицательных действительных значений s . После этого контуры интегрирования замыкаются во втором и третьем квадрантах для Ω_+ и Ω_- соответственно. Интегралы по верхним и нижним берегам разреза дают вклады в монотонную составляющую термодинамического потенциала [26]. Осциллирующая часть Ω_{\sim} определяется полюсами, расположенными по мнимой оси при $s\hbar\omega_c/2 = \pm ik\pi$. После проведения соответствующих вычислений получим

$$\begin{aligned} \Omega_{\sim} &= \frac{TV(\hbar\omega_c)^{3/2} m_c \sqrt{m_{\parallel}}}{2\pi^2 \hbar^3} \times \\ &\times \sum_{\sigma} \sum_{\omega_n > 0} \sum_{k=1}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{2\pi k}{\hbar\omega_c} \omega_n \alpha_{n\sigma} \right\} \cos \left\{ \frac{2\pi k}{\hbar\omega_c} \tilde{\mu}_{n\sigma} + \varphi_{\sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

В этом выражении

$$\alpha_{n\sigma} = 1 + \Gamma_{n\sigma}, \quad \Gamma_{n\sigma} = K_{\sigma} |v|^2 \{\omega_n^2 + (\tilde{\epsilon}_{d\sigma} - \mu)^2\}^{-1},$$

$$\tilde{\mu}_{n\sigma} = \mu + \sigma JR + (\tilde{\epsilon}_{d\sigma} - \mu) \Gamma_{n\sigma}, \quad \varphi_{\sigma} = 2\pi\sigma k \left(\frac{m_c}{m_0} \right) - \frac{\pi}{4}. \quad (26)$$

Полученные формулы, по существу, описывают влияние магнитного упорядочения на эффект де Гааза–ван Альфена и температурные квантовые осцилляции. Наличие локализованной подсистемы оказывает воздействие на осциллирующую часть термодинамического потенциала и, следовательно, на физические характеристики посредством двух каналов. Во-первых, через механизм гибридационного взаимодействия наличие локализованных состояний приводит, вообще говоря, к уменьшению амплитуды осцилляций (влияние фактора $\Gamma_{n\sigma}$ в $\alpha_{n\sigma}$). При этом, как уже отмечалось, существенными являются одноузельные корреляции. Во-вторых, s - $d(f)$ -обменное взаимодействие приводит к аддитивной добавке в выражении для $\tilde{\mu}_{n\sigma}$. В условиях, когда уровень энергии $\tilde{\epsilon}_{d\sigma}$ находится вблизи химического потенциала, имеет место пиннинг последнего. В соответствии с этим $\tilde{\mu}_{n\sigma}$ приобретает сильную температурную зависимость, обеспечивающую температурные квантовые осцилляции.

5. НАМАГНИЧЕННОСТЬ КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Из (25) нетрудно получить выражение, описывающее осциллирующую часть намагниченности рассматриваемой системы. Оставляя лишь главные слагаемые, запишем M_{\sim} в следующей форме:

$$M_{\sim} = - \sum_{\sigma} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\omega_n > 0} \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} A_{k\sigma}(\omega_n) \sin \left(2\pi k \frac{\mu_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} + \phi_{\sigma} \right), \quad (27)$$

где «парциальные» амплитуды имеют вид

$$A_{k\sigma}(\omega_n) = \left(\frac{TVe\tilde{\mu}_{n\sigma}}{\pi\hbar^2c} \right) \left(\frac{m_{\parallel}}{\hbar\omega_c} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{2\pi k\omega_n\alpha_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} \right). \quad (28)$$

Наличие гибридационного взаимодействия в математическом отношении проявляется в возникновении дополнительного суммирования по мацубаровским частотам. В отсутствие гибридазации ($v = 0$) суммирование по ω_n можно провести в явном виде. Учитывая, что в этом случае $\Gamma_{n\sigma} = 0$, $\alpha_{n\sigma} = 1$, находим

$$M_{\sim} = - \sum_{\sigma} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} B \left(\frac{\tilde{\mu}_{\sigma}}{\hbar\omega_c} \right) \sin \left(2\pi k \frac{\tilde{\mu}_{\sigma}}{\hbar\omega_c} + \phi_{\sigma} \right),$$

$$B = \left(\frac{TVe}{2\pi\hbar^2c} \right) (m_{\parallel}\hbar\omega_c)^{1/2} \text{sh}^{-1} \left(\frac{2\pi^2kT}{\hbar\omega_c} \right), \quad \tilde{\mu}_{\sigma} = \mu + \sigma JR. \quad (29)$$

По этим формулам легко проследить за влиянием s - $d(f)$ -обменного расщепления спиновых подзон на температурные квантовые осцилляции. Используя перенормированное выражение для химического потенциала, получим, что фазы осциллирующих функций содержат слагаемое $\sim JR/\hbar\omega_c$. Поскольку параметр J в магнитных полупроводни-

ках может на несколько порядков превышать величину $\hbar\omega_c$, даже небольшие изменения намагниченности локализованной подсистемы могут приводить к заметному изменению отмеченных фаз. Учитывая, что в низкотемпературной области для ферромагнитных полупроводников справедлив закон Блоха, запишем выражение для среднего значения проекции спинового момента локализованной подсистемы:

$$R = S - \left(\frac{T}{4\pi sI} \right)^{3/2} Z_{3/2}(2\mu_B H/T), \quad (30)$$

где

$$Z_\alpha(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-nx)/n^\alpha$$

— обобщенная дзета-функция Римана. В случае малой эффективной массы носителей тока (в HgCr_2Se_4 $m^* \sim 0.01m_0$) имеется область температур $\mu_B H \ll T \leq \hbar\omega_c$, для которой справедливо следующее разложение:

$$Z_{3/2}(2\mu_B H/T) = \zeta(3/2) - 2\sqrt{2\pi\mu_B H/T} + 35\mu_B H/12T, \quad \zeta(3/2) = 2.612.$$

В этом случае

$$JR = JS - \zeta(3/2)t^{3/2} + 2Jt\sqrt{h} - \frac{35}{48\pi} J\sqrt{th}, \quad (31)$$

где $t = T/4\pi sI$, $h = \mu_B H/sI$. При возрастании температуры величина R уменьшается, что, в соответствии со сказанным, и приводит к температурным квантовым осцилляциям. Другая особенность заключается в наличии слагаемого $\sim \sqrt{h}$. Поэтому полная фаза осцилляций содержит слагаемое

$$2\pi k\sigma \left(\frac{m_c}{m_{\parallel}} \right) \left(\frac{T}{4\pi sI} \right) \left(\frac{J^2}{\mu_B H sI} \right)^{1/2} \sim \frac{1}{\sqrt{H}}. \quad (32)$$

Если взять характерные для магнитных полупроводников значения параметров $J \sim 0.5$ эВ, $T \sim 10$ К, $m_c/m_0 \approx 0.01$, $H \approx 50$ кЭ, то получим, что малость первых двух множителей компенсируется большим значением выражения, определяемого последней скобкой. Поэтому вклад отмеченного слагаемого становится существенным и осцилляции намагниченности при изменении внешнего магнитного поля теряют строгую периодичность по $1/H$. В этом нетрудно убедиться, если, учитывая разложение (31), записать осциллирующие множители в виде

$$\sin \left\{ 2\pi k \left(\frac{a}{H} + \frac{b}{\sqrt{H}} \right) \right\}, \quad (33)$$

где a и b — не зависящие от магнитного поля величины.

При низкой концентрации зонных электронов обменное расщепление спиновых подзон приводит к тому, что электроны заполняют лишь состояния с одним значением проекции спинового момента. Причем знак обменной константы J , влияя на значение поляризации зонных электронов, не сказывается на температурных квантовых осцилляциях.

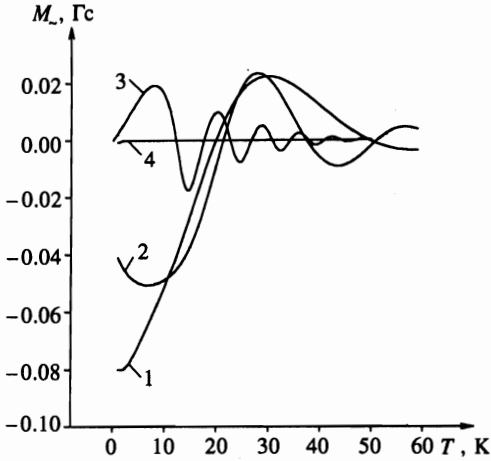


Рис. 1. Температурные квантовые осцилляции намагниченности при различных значениях параметра s - $d(f)$ -обменного взаимодействия. $J = 0$ (1), 0.1 (2), 0.8 (3), -0.8 (4) эВ

Совершенно иная ситуация имеет место при учете гибридизационных эффектов. В этом случае знак J может иметь существенное значение для реализации эффекта де Гааза-ван Альфена вообще и температурных квантовых осцилляций, в частности. Чтобы продемонстрировать эту особенность в явном виде, пренебрежем зависимостью от ω_n величины $\Gamma_{n\sigma}$, считая, что главный вклад обусловлен слагаемыми с малыми значениями ω_n . Тогда после суммирования по ω_n получается формула, аналогичная (29), если в ней сделать замену

$$B \rightarrow B_{\sigma} = \left(\frac{T V e}{2\pi \hbar^2 c} \right) (m_{\parallel} \hbar \omega_c)^{1/2} \text{sh}^{-1} \left(\frac{2\pi^2 k T}{\hbar \omega_c} \alpha_{0\sigma} \right), \quad \tilde{\mu}_{\sigma} \rightarrow \tilde{\mu}_{0\sigma}. \quad (34)$$

Величины $\alpha_{0\sigma}$ и $\tilde{\mu}_{0\sigma}$ определены формулами (26). Видно, что гибридизация через фактор $\alpha_{0\sigma}$ может значительным образом уменьшить амплитуду осцилляций намагниченности зонных электронов. При этом наличие множителя K_{σ} приводит к отмеченной сильной зависимости эффекта от знака константы s - $d(f)$ -обменного взаимодействия. Так, например, при $J > 0$ зонные носители находятся в состояниях со спином «вверх». Поскольку $K_{\uparrow} \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$, в этом случае $\alpha_{0\uparrow} \rightarrow 1$ и амплитуда эффекта при низких температурах перенормируется незначительно. Если же $J < 0$, то зонные электроны заполняют подзону со спином «вниз». В этом случае, как уже отмечалось ранее, гибридизационный канал взаимодействия открыт и $\alpha_{0\downarrow} \gg 1$. Это приводит к сильному уменьшению амплитуды осцилляций, так что реальное наблюдение осцилляционных эффектов становится невозможным. Физическая сторона влияния одноузельных корреляций на эффективность гибридизационного взаимодействия обсуждалась ранее.

В более общем случае дополнительный вклад в суммарную фазу осциллирующих слагаемых определяется не только намагниченностью локализованной подсистемы, но и слагаемым $(\tilde{\epsilon}_{d\sigma} - \mu) \Gamma_{n\sigma}$. Это обстоятельство существенно усложняет результирующее влияние магнитного упорядочения при включении эффектов перемешивания, и для количественного рассмотрения необходимо использовать компьютерные вычисления.

На рис. 1 продемонстрирована зависимость температурных квантовых осцилляций от величины и знака константы s - $d(f)$ -обменного взаимодействия J . При проведении вычислений были использованы следующие значения параметров модели: $v = 0.05$ эВ,

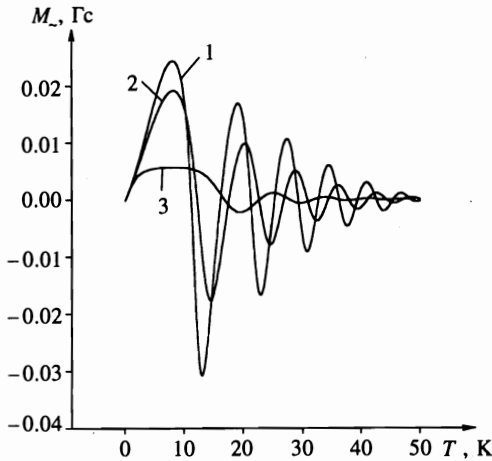


Рис. 2. Влияние гибридационного взаимодействия на температурные квантовые осцилляции намагниченности зонных электронов. $v = 0$ (1), 0.05 (2), 0.1 (3) эВ

$m^* = 0.01m_0$, $n = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $H = 20 \text{ кЭ}$. Видно, что при $J = 0$ имеется лишь одно «колебание» M_{\sim} в соответствии с обсуждавшейся выше природой такого поведения. При конечных J имеется дополнительное движение спиновых подзон, что проявляется в нарастании числа осцилляций. Кривые 2 и 3 рассчитаны при положительных значениях параметра J . Как отмечалось ранее, в этом случае гибридизация эффективно подавлена и амплитуда эффекта остается достаточной для экспериментального обнаружения осцилляций. Если же $J < 0$, то коллективизированные состояния сильно гибридизуются с локализованными состояниями и амплитуда осцилляций становится слишком маленькой для экспериментального проявления. Эта особенность хорошо видна из сравнения кривых 3 и 4. Кривая 4 рассчитана при тех же самых значениях параметров, что и кривая 3, за исключением того, что был изменен знак J . Видно, что амплитуда осцилляционных эффектов из-за взаимодействий коллективизированной подсистемы электронов с локализованной подсистемой и сильных внутриатомных корреляций весьма критична к знаку J . Удовлетворительное согласие с экспериментальными данными по температурным квантовым осцилляциям имеется при $J = 0.8 \text{ эВ}$. Это значение J соответствует результатам предыдущих исследований по HgCr_2Se_4 [16]. Кроме того, недавние экспериментальные результаты [10] по гигантскому влиянию внешнего магнитного поля на ширину запрещенной зоны HgCr_2Se_4 хорошо интерпретируются при выбранном значении J .

Сильная чувствительность эффекта к величине гибридационного взаимодействия v продемонстрирована на рис. 2, где приведены расчеты по температурным квантовым осцилляциям при трех значениях v и $J = 0.8 \text{ эВ}$. Остальные параметры такие же, как и на рис. 1. Видно, что гибридизация сильно подавляет амплитуду колебаний и увеличивает расстояние между ближайшими максимумами. Последний эффект связан с противоположной направленностью действия $s-d(f)$ -обменного взаимодействия и гибридизации. При возрастании T из-за $s-d(f)$ -обменного взаимодействия дно зоны проводимости будет подниматься, тогда как гибридизация вызывает его понижение. Конкуренция отмеченных механизмов приводит к выполаживанию зависимости M_{\sim} от T (см. начальный участок кривой 3 на рис. 2).

Влияние величины магнитного поля на температурные квантовые осцилляции по-

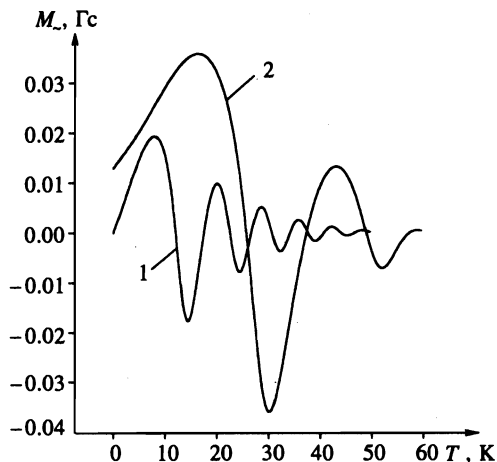


Рис. 3. Влияние магнитного поля на температурные квантовые осцилляции. $H = 20$ (1), 60 кЭ (2)

казано на рис. 3, где приведены зависимости M_z от температуры для двух значений магнитного поля $H = 20$ и 60 кЭ. Как и следовало ожидать, амплитуда и период осцилляций увеличиваются при увеличении поля. Такое поведение намагниченности с необходимостью следует из формул (25)–(27).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение остановимся на нескольких моментах. Главным выводом является существование сильного влияния магнитного порядка на квантовые осцилляционные эффекты. Природа такого влияния и важная роль одноузельных корреляций была обсуждена в тексте статьи достаточно подробно. Здесь же отметим, что рассмотренные эффекты могут проявляться не только в магнитных полупроводниках, но и во многих системах с сильными корреляциями. В этом отношении особый интерес представляют, кроме отмеченных ранее цериевых монониктидов, соединения с промежуточной валентностью и тяжелые фермионы. Многие из них обладают антиферромагнитным порядком, а часть соединений со смешанной валентностью ферромагнитно упорядочены. Большая величина концентрации зонных электронов, по сравнению с рассматриваемой в данной работе, потребует корректировки используемых приближений, однако главные качественные особенности влияния магнитного упорядочения на осцилляционные эффекты, по-видимому, сохранятся.

Известно, что по температурной зависимости амплитуды эффекта де Гааза–ван Альфена определяется эффективная масса. Экспериментальные исследования температурных квантовых осцилляций позволяют получить существенно большую информацию о параметрах электронной структуры. По характеру температурной развертки намагниченности зонных электронов можно, в частности, судить о величине J и интенсивности гибридационного взаимодействия. Это означает, что экспериментальное исследование температурных квантовых осцилляций можно рассматривать как один из эффективных методов изучения электронного строения вещества.

Авторы выражают благодарность С. Г. Овчинникову и В. К. Чернову за стимулирующее обсуждение результатов эксперимента по температурным квантовым осцилляциям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 96-02-16075-а), а также Красноярского фонда науки (грант № 5F0158).

Литература

1. B. R. Cooper, R. Siemann, D. Yang et al., in *The Handbook on the Physics and Chemistry of the Actinides*, ed. by A. J. Freeman and G. H. Lander, North Holland, Amsterdam (1985), vol. 2, p. 435.
2. Q. R. Sheng and B. R. Cooper, *J. Appl. Phys.* **69**, 5472 (1991).
3. T. Kasuya, *J. Phys. Soc. Jap.* **64**, 1453 (1995).
4. T. Kasuya, T. Suzuki, and Y. Haga, *J. Phys. Soc. Jap.* **62**, 2549 (1993).
5. З. Метфессель, Д. Маттис, *Магнитные полупроводники*, Мир, Москва (1972).
6. Э. Л. Нагаев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
7. С. Г. Овчинников, В. К. Чернов, А. Д. Балаев и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 620 (1995).
8. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, ФТТ **23**, 3492 (1981).
9. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
10. И. К. Больных, А. В. Головин, Г. Н. Север, *Вестн. Моск. ун-та* **36**, 100 (1995).
11. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **284**, 455 (1964).
12. Л. А. Максимов, К. А. Кикоин, ФММ **28**, 43 (1969).
13. Л. А. Максимов, К. А. Кикоин, ЖЭТФ **58**, 2184 (1970).
14. М. Ш. Ерухимов, С. Г. Овчинников, ФТТ **21**, 351 (1979).
15. С. Г. Овчинников, ФТТ **21**, 2994 (1979).
16. В. К. Чернов, В. А. Гавричков, Н. Б. Иванова и др., ФТТ **28**, 289 (1986).
17. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
18. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
19. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
20. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
21. P. Coleman, *Phys. Rev. B* **35**, 5072 (1987).
22. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
23. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, Москва (1986).
24. A. Wassersman, M. Springford, and A. C. Hewson, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2669 (1989).
25. J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **121**, 1251 (1961).
26. И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем*, Изд-во МГУ, Москва (1991).