

УДК 548;537.621

ТОЧНЫЙ СПЕКТР КВАЗИЧАСТИЦ В ФЕРРОМАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

М. Ш. Ерухимов, С. Г. Овчинников, С. И. Якимович

В рамках периодической модели Андерсона с учетом s - d -обменного взаимодействия исследован спектр фермиевских возбуждений невырожденного ферромагнитного полупроводника. Для $T=0$ и одного электрона получены точные дисперсионное уравнение и плотность состояний для разных проекций спина. Построены кривые плотности состояний для различных расположений d -уровня относительно дна зоны.

Периодическая модель Андерсона служит, как известно, основой описания соединений с промежуточной валентностью. В последнее время большой интерес проявляется к магнитным свойствам таких систем. Среди них есть и ферромагнетики (CeRh_3B_2 , халькогениды урана), и антиферромагнетики (TmSe). Ряд магнитоупорядоченных соединений $3d$ -металлов также проявляет свойства веществ с промежуточной валентностью (Fe_3O_4 , CuCr_2S_4). Помимо гибридизации зонных s и атомных d состояний, в магнетиках с промежуточной валентностью необходимо учитывать s - d -обменное взаимодействие.

Одни из указанных соединений имеют металлические свойства, другие — полупроводниковые. В ряду твердых растворов $\text{TmSe}_{1-x}\text{Te}_x$ имеет место переход металл—полупроводник [1]. Многочастичные эффекты, характерные для Кондо-решеток, по-разному проявляются в металлических и полупроводниковых состояниях. Если для металлических систем с большой плотностью электронов имеет место Кондо-резонанс, то в невырожденных полупроводниках эффект Кондо отсутствует. С другой стороны, взаимодействие электрона проводимости со спиновыми возбуждениями в магнитоупорядоченном веществе приводит к другим многочастичным эффектам типа магнитного полярона. Магнитные поляроны хорошо исследованы в s - d -модели невырожденного ферромагнитного полупроводника [2-5].

В настоящей работе исследован спектр фермиевских квазичастиц невырожденного ферромагнитного полупроводника, описываемого периодической моделью Андерсона с учетом s - d -обменного взаимодействия. Для $T=0$ и случая с одним электроном получены точные выражения для функций Грина s - и d -электронов. Проанализирован спектр и построены плотности одночастичных состояний для обеих ориентаций спина при различных положениях d -уровня относительно дна зоны. Если записать волновую функцию конфигурации $d^n s^m |n, S, M; m, \sigma\rangle$, где S, M — спин и его проекция d^n -иона, $m=0, 1$ — число электронов s ячейки, σ — проекция спина s -электрона, то, кроме процессов рассеяния за счет s - d -обмена J

$$|n, S, S; 1\downarrow\rangle \leftrightarrow |n, S, S-1; 1\uparrow\rangle, \quad (1)$$

в модели Андерсона за счет гибридизаций V появляются другие многочастичные процессы

$$|n, S, S; 1\downarrow\rangle \rightarrow |n+1, S \pm 1/2, S-1/2; 0\rangle \rightarrow |n, S, S-1; 1\uparrow\rangle. \quad (2)$$

Знаки плюс и минус в (2) относятся к высокоспиновому и низкоспиновому d^{n+1} терму. Найденное точное решение соответствует учету таких процессов рассеяния во всех порядках теории возмущений.

1. Вывод дисперсионного уравнения

Рассмотрим систему локализованных и зонных состояний с гамильтонианом

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{s-d} + \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_r, \\ \mathcal{H}_0 &= \sum_f \left[E_0 \sum_{M=-S}^S X_f^{M, M} + (E_0 + \Omega) \sum_{M'=-S'}^{S'} X_f^{M', M'} \right] + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}, \\ \mathcal{H}_{s-d} &= -J \sum_f S_f \sigma_f, \quad \mathcal{H}_m = V \sum_{j\sigma} (d_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{c. c.}). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь \mathcal{H}_0 описывает терм E_0 конфигурации d^n со спином S и терм $E_0 + \Omega$ конфигурации d^{n+1} со спином $S' = S \pm 1/2$, а также зонные электроны с энергией ε_k , оператором рождения $a_{k\sigma}^\dagger$ и спиновым оператором σ . Локализованные состояния записаны через операторы Хаббарда $X_f^{M, M} = |M\rangle\langle M|$, через которые будут выражены и операторы S_f и d_f^\dagger (d_f). Невыписанный член \mathcal{H}_r есть обычное обменное взаимодействие гейзенберговского типа, формирующее ферромагнитное основное состояние системы.

Выражение для операторов спина через X -операторы для высокоспинового состояния $S' = S + 1/2$ имеет вид [6]

$$\begin{aligned} S_f^z &= \sum_{M=-S}^S M X_f^{M, M} + \sum_{M'=-S'}^{S'} M' X_f^{M', M'}, \\ S_f^\pm &= \sum_{M=-S}^S \gamma_S^\pm(M) X_f^{M\pm 1, M} + \sum_{M'=-S'}^{S'} \gamma_{S'}^\pm(M') X_f^{M'\pm 1, M'}, \\ \gamma_S(M) &= \sqrt{(S-M)(S+M+1)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Фермиевский оператор для $S' = S + 1/2$ равен [7]

$$\begin{aligned} d_{f\uparrow}^\dagger &= \sum_M \sqrt{(S+1+M)/(2S+1)} X_f^{M+1/2, M}, \\ d_{f\downarrow}^\dagger &= \sum_M \sqrt{(S+1-M)/(2S+1)} X_f^{M-1/2, M}. \end{aligned} \quad (5)$$

В низкоспиновом случае аналогично можно записать

$$d_{f\uparrow}^\dagger = \sum_M \sqrt{(S-M)/(2S+1)} X_f^{M+1/2, M}, \quad d_{f\downarrow}^\dagger = \sum_M \sqrt{(S+M)/(2S+1)} X_f^{M-1/2, M}. \quad (6)$$

Формулы (4) для спиновых операторов сохраняют свой вид, но с заменой S' на $S - 1/2$.

Рассмотрим уравнения движения для электронов со спином вверх и вниз, состояния d^{n+1} считаем для определенности низкоспиновым. Для $\sigma = +1/2$ хартри-фоковское решение при $T=0$ совпадает с точным

$$E a_{k\sigma}^\dagger |0\rangle = (E_0 + \varepsilon_{k\uparrow}) a_{k\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - JS\sigma. \quad (7)$$

Здесь $|0\rangle$ — ферромагнитное основное состояние в отсутствие s -электронов. Для $\sigma = -1/2$ благодаря процессам рассеяния (1) и (2) возникает система уравнений

$$\begin{aligned} (E - E_0 - \varepsilon_{k\downarrow}) a_{k\downarrow}^\dagger |0\rangle &= (-J/2) \sqrt{2S} \sum_q F_{kq} |0\rangle - V \sqrt{2S/(2S+1)} X_k^{S-1/2, S} |0\rangle, \\ (E - E_0 - \Omega) X_k^{S-1/2, S} |0\rangle &= -V \sqrt{2S/(2S+1)} a_{k\downarrow}^\dagger |0\rangle + (V/\sqrt{2S+1}) \sum_q F_{kq} |0\rangle, \\ (E - E_0 - \varepsilon_{q\uparrow}) F_{kq} |0\rangle &= (J/2) \sum_p F_{kp} |0\rangle - (J/2) \sqrt{2S} a_{k\downarrow}^\dagger |0\rangle + \\ &+ (V/\sqrt{(2S+1)}) X_k^{S-1/2, S} |0\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $F_{kq} = X_{k-q}^{s-1} s a_{qt}^+$. Дисперсионное уравнение можно записать в следующем виде:

$$D(\varepsilon) \equiv \varepsilon - \varepsilon_{k\downarrow} - \frac{V_0^2}{\varepsilon - \Omega} - \frac{(JS + V_0^2/\varepsilon - \Omega)^2 \Delta(\varepsilon)}{2S - (JS + V_0^2/\varepsilon - \Omega) \Delta(\varepsilon)} = 0, \quad (9)$$

где $\varepsilon = E - E_0$, $V_0 = V\sqrt{2S/(2S+1)}$, $\Delta(\varepsilon) = \sum_p (\varepsilon - \varepsilon_{p\uparrow})^{-1}$. Последнее слагаемое в (9) есть массовый оператор $\Sigma(\varepsilon)$, и при $\Sigma=0$ получаем известный в периодической модели Андерсона хартри-фоковский спектр в виде двух гибридизованных подзон

$$\varepsilon_{k\downarrow}^{\pm} = 1/2 (\varepsilon_{k\downarrow} + \Omega \pm \sqrt{(\varepsilon_{k\downarrow} - \Omega)^2 + 4V_0^2}). \quad (10)$$

При $V_0=0$ уравнение (9) переходит в дисперсионное уравнение s - d -модели [3, 5]. Для нахождения плотности состояний нам понадобятся функции Грина

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{k\downarrow} | a_{k\downarrow}^+ \rangle\rangle_{\varepsilon} &= D^{-1}(\varepsilon), \\ \langle\langle X_k^s, s^{-1/2} | X_k^{s-1/2}, s \rangle\rangle_{\varepsilon} &= \frac{(2S - JS\Delta(\varepsilon))(\varepsilon - \varepsilon_{k\downarrow}) - J^2\Delta(\varepsilon)}{[(2S - JS\Delta(\varepsilon))(\varepsilon - \Omega) - V_0^2\Delta(\varepsilon)] D(\varepsilon)} \frac{2S}{2S+1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Аналогично для высокоспинового d^{n+1} -состояния получаем закон дисперсии для $\sigma = +1/2$, совпадающий с хартри-фоковским

$$\varepsilon_{k\uparrow}^{\pm} = 1/2 (\varepsilon_{k\uparrow} + \Omega \pm \sqrt{(\varepsilon_{k\uparrow} - \Omega)^2 + 4V^2}). \quad (12)$$

Для спина $\sigma = -1/2$ дисперсионное уравнение имеет вид

$$D(\varepsilon) = \varepsilon - \varepsilon_{k\downarrow} - \frac{V_1^2}{\varepsilon - \Omega} - \frac{2S(J/2 - V_1^2/\varepsilon - \Omega)^2 \Delta(\varepsilon)}{1 - (J/2 + 2SV_1^2/\varepsilon - \Omega) \Delta(\varepsilon)} = 0, \quad (13)$$

где $V_1 = V/\sqrt{2S+1}$.

2. Анализ спектра и плотности состояний квазичастиц при $J > 0$

Вид спектра и, в частности, наличие или отсутствие затухания существенно зависят от взаимного расположения уровня Ω и хартри-фоковских подзон $\varepsilon_{k\sigma}$. Будем отсчитывать энергию от дна зоны в парамагнитной фазе, считая $\varepsilon_{k\sigma=0} = 0$. Тогда при $\varepsilon < -JS/2$, $\varepsilon > -JS/2 + W$ (W — ширина зоны) затухание, как и в s - d -модели, отсутствует. Поэтому при $\Omega < -JS/2$ нижняя ветвь спектра близка к хартри-фоковской и ее перенормировка обусловлена лишь действительной частью $\Delta(\varepsilon)$. Плотность состояний s - и d -электронов для этого случая показана на рис. 1. Для вычислений использовался квадратичный закон дисперсии $\varepsilon_q = W(q/q_B)^2$ с плотностью состояний

$$\rho_0(\varepsilon) = \begin{cases} (3/2W)\sqrt{\varepsilon/W}, & 0 < \varepsilon < W, \\ 0, & \varepsilon < 0, \varepsilon > W. \end{cases}$$

В этом случае

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Delta(\varepsilon) &= \begin{cases} -\frac{3}{W} \left(1 - \frac{a}{2} \ln \left| \frac{1+a}{1-a} \right| \right), & a^2 = (\varepsilon + JS/2)/W \geq 0, \\ (-3/W)(1 - b \operatorname{arctg} b^{-1}), & b^2 = -(\varepsilon + JS/2)/W > 0, \end{cases} \\ \operatorname{Im} \Delta(\varepsilon) &= -\pi \rho_0(\varepsilon + JS/2). \end{aligned}$$

Плотности состояний для s - и d -электронов вычислялись обычным образом

$$\rho_{\xi}^{\sigma}(\varepsilon) = -1/\pi \operatorname{Sp} G_{\lambda}^{\sigma}(k, \varepsilon + i\delta), \quad (14)$$

где $\lambda = s, d$ и соответствующие функции Грина определены выражением (11). Отметим, что для $\sigma = +1/2$ плотность d -электронов при $T=0$ обращается в нуль для низкоспиновой конфигурации d^{n+1} . Формально это следует из

равенства нулю вычета функции Грина $\ll d | d^+ \gg$, а физически связано с тем, что рождение d -электрона со спином вверх на фоне основного состояния должно привести к терму с $S^z = S + 1/2$, который отсутствует при $S^z = S - 1/2$.

В интервале $\Omega < \varepsilon < -JS/2$ имеет место щель, а при $\varepsilon > -JS/2$ отлична от нуля плотность s -состояний для обеих проекций спина. Такой хвост плотности состояний для $\sigma = -1/2$ известен и для $s-d$ -модели и связан с неквазичастичным поведением ($\text{Im } \Delta \neq 0$). Отметим также, что вблизи дна зоны проводимости за счет гибридизации появляется отличный от нуля вклад d -состояний.

Более интересен случай, когда d -уровень Ω лежит внутри интервала $(-JS/2, JS/2)$. В приближении Хартри—Фока этот интервал определяет

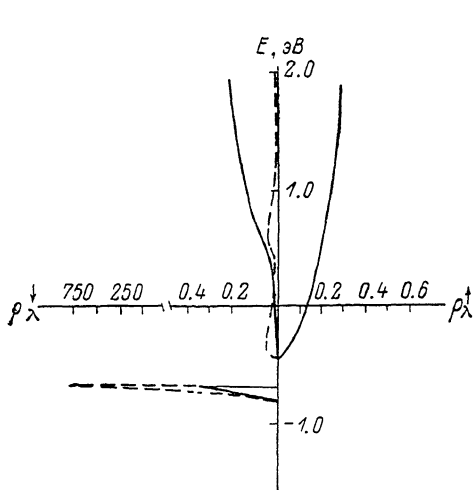


Рис. 1. Плотность состояний s - и d -электронов при $W=4$, $J=+0.6$, $V=0.4$, $\Omega=-0.6$ эВ, $S=3/2$.

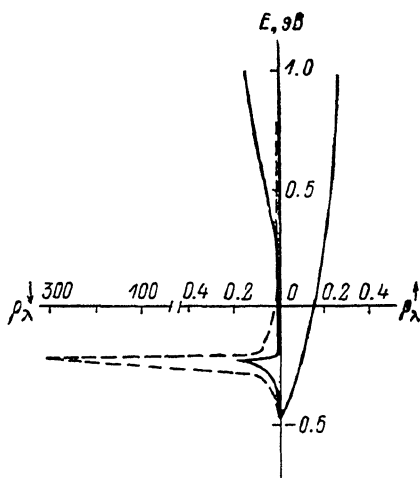


Рис. 2. Плотность состояний для $J=0.6$, $V=0.4$, $\Omega=-0.2$, $W=4$.

щель Стонера. Ненулевое затухание приводит к сильной модификации спектра. Гибридизационная щель в плотности состояний замыкается, а d -пик уширяется. Следует различать две возможности: если дно гибридизированной хартри-фоковской зоны $\varepsilon_{k\downarrow}$ (формула (10)) лежит выше дна зоны $\varepsilon_{k\uparrow}$, то имеет место полное взаимное проникновение спиновых подзон, как и в $s-d$ -модели. Условие $\varepsilon_{k=0, \downarrow} > \varepsilon_{k=0, \uparrow}$ выполняется при $\Omega > -JS/2 + V_0^2/JS$. Плотность состояний с такими параметрами показана на рис. 2. В обратном случае $\Omega < -JS/2 + V_0^2/JS$ нижними по энергии являются состояния со спином вниз, для которых затухание равно нулю.

Если уровень Ω лежит высоко в зоне, $\Omega > JS/2$, то в окрестности d -уровня имеется размытый пик плотности состояний, а вблизи края зоны поведение $\rho(\varepsilon)$ такое же, как и в $s-d$ -модели.

3. Спектр и плотность состояний при $J < 0$

Для $J < 0$ мы ограничимся случаем, когда уровень Ω лежит вблизи дна зоны $\varepsilon_{k\downarrow}$. Тогда в результате нижняя ветвь спектра формируется в основном d -состояниями и дает пик в плотности состояний. Верхняя зона отделена щелью гибридизационного происхождения от нижней и сформирована в основном s -состояниями (рис. 3). В то же время имеется заметный вклад s -состояний в нижнюю и d -состояний в верхнюю зоны.

Наибольшей особенностью случая $J < 0$ для $s-d$ -модели является связанное спин-поляронное состояние. При $V_0=0$ дисперсионное уравнение (9) может быть записано в виде

$$1 - \frac{JS}{\varepsilon - \varepsilon_{k\uparrow}} - \frac{J}{2} \Delta(\varepsilon) = 0.$$

Это уравнение является основой исследования магнитных поляронов в $s-d$ -модели [3, 5]. В нашей модели также возникают связанные состояния гибридных электронов с магнонами.

В узкозонном пределе $s-d$ -модели спектр полярона описывается выражением [2]

$$\xi_k = J(S+1)/2 + \varepsilon_k \cdot 2S/(2S+1). \quad (15)$$

Как следует из (9), при $J < 0$ и $W \ll JS$ спектр нижней ветви квазичастиц со спином вниз имеет вид (в первом порядке по ε_k/JS)

$$\varepsilon = 1/2 [\xi_k + \Omega - \sqrt{(\xi_k - \Omega)^2 + 4V^2}]. \quad (16)$$

В отличие от (10), где хартри-фоковская гибридизация определялась перенормированным параметром $V_0 = V(2S/(2S+1))^{1/2}$, в спектр (16) входит затравочный матричный элемент V .

4. Обсуждение результатов

Хотя мы и ограничились низкоспиновой d^{n+1} конфигурацией, рассмотрение спектра для высокоспиновой можно аналогично провести на основе уравнения (13).

Наши расчеты могут быть применены не только к перечисленным в начале статьи веществам, но и к магнитным полупроводникам, содержащим незаполненные d - или f -оболочки. В частности, подобная модель привлекалась для описания электронной структуры хромовых халькогенидных шпинелей ACr_2X_4 [8, 9], где $A = Cd, Hg, X = S, Se$. В работах [8, 9] спектр квазичастиц рассчитывался в обобщенном приближении Хартри—Фока. Сравнение хартри-фоковских результатов с точными показывает, что наибольшее отличие возникает внутри щели Стонера, где затухание квазичастиц замыкает гибридизационную щель. В модели [9] одновременно

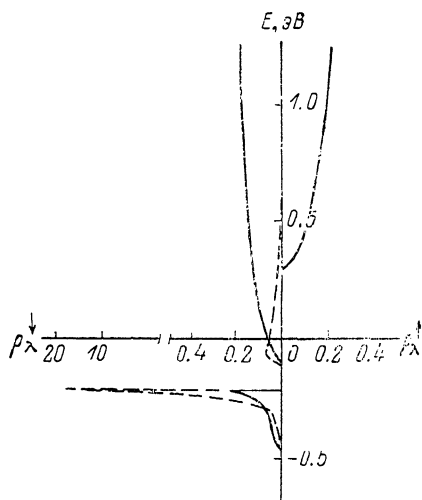


Рис. 3. Плотность состояний для $J = -0.4$, $\Omega = -0.2$, $V = 0.2$, $W = 4$.

учитывались два возбужденных состояния d^{n+1} -конфигурации — и высокоспиновое, и низкоспиновое, — поэтому непосредственное сопоставление результатов расчета [9] с данными настоящей работы невозможно. В то же время вид плотности состояний вблизи дна зоны (в интервале энергий около 0.5 эВ) $HgCr_2Se_4$ и $CdCr_2Se_4$ должен быть похож на зависимости $\rho(\varepsilon)$ (рис. 1, 2 соответственно).

Для получения более точной плотности состояний реального магнитного полупроводника можно использовать результаты зонных расчетов для коллективизированных электронов и подставлять их вместо $\rho_0(\varepsilon)$ при вычислении шпура в (14). Подобная процедура проделана недавно для EuO [10] в рамках $s-d$ -модели.

В заключение отметим, что найденные спектры квазичастиц в задаче с одним носителем справедливы и для невырожденного полупроводника с конечной, но малой концентрацией носителей.

При конечных температурах точное определение спектра квазичастиц невозможно. Многочастичные поправки, связанные с гибридизацией, малы в меру малости концентрации носителей. Более существенны магнитные эффекты, которые приводят к степенным добавкам к спектру, например $(T/T_k)^{5/2}$ для $s-d$ -модели [11]. Поэтому при низких по сравнению с температурой Кюри температурах можно приближенно сравнивать наши результаты с экспериментом.

Список литературы

- [1] Boppart H., Wachter P. Moment formation in solids. N. Y., 1984. Series B: Physics. V. 117. P. 229—236.
- [2] Нагаев Э. Л. // ЖЭТФ. 1969. Т. 56. № 3. С. 1013—1028.
- [3] Изюмов Ю. А., Медведев М. В. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 2. С. 553—560.
- [4] Shastri B. S., Mattis D. C. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 9. P. 5340—5348.
- [5] Mathfessel S., Mattis D. C. Magnetic semiconductors. Berlin, 1968. V. 18. N 1. P. 389—562.
- [6] Вальков В. В., Овчинников С. Г. // ТМФ. 1982. Т. 50. № 3. С. 446—476.
- [7] Erukhimov M. Sh., Ovchinnikov S. G. // Phys. St. Sol. (b). 1984. V. 123. N 1. P. 105—114.
- [8] Ерухимов М. Ш., Овчинников С. Г. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 2. С. 351—357.
- [9] Гавричков В. А., Ерухимов М. Ш., Овчинников С. Г., Эдельман И. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. № 4. С. 1275—1287.
- [10] Nolting W., Borstel G., Borgiel W. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 13. P. 7015—7024.
- [11] Нагаев Э. Л. Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979. 432 с.

Институт физики
им. Л. В. Киренского СО АН СССР
Красноярск

Поступило в Редакцию
13 апреля 1988 г.
В окончательной редакции
11 октября 1988 г.