

01,05

## Особенности квантовых осцилляций намагниченности в квазидвумерных антиферромагнитных полуметаллах

© Д.М. Дзедзисавили<sup>1</sup>, А.А. Худайбердыев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет им. акад. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

E-mail: ddm&iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 15 октября 2015 г.)

Теоретически рассмотрены особенности квантовых осцилляций намагниченности в квазидвумерных антиферромагнитных широкозонных полуметаллах с низкой концентрацией носителей тока. Показано, что в отмеченных системах энергия Ферми, определяемая из анализа частоты эффекта де Гааза-ван Альфена по стандартной методике, может существенно отличаться от истинного значения. Для корректного определения величины энергии Ферми в скошенной фазе предложено проводить анализ квантовых осцилляций намагниченности  $M$  не как функции обратного магнитного поля  $1/H$ , а как функции  $1/\cos\gamma$ , где угол  $\gamma$  характеризует наклон магнитного поля к плоскости квазидвумерного полуметалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-42-04372), а также фонда „Династия“.

### 1. Введение

Соединения, в которых динамика носителей тока существенно ограничена плоскостями кристалла, представляют большой теоретический и экспериментальный интерес. Достаточно сказать, что к отмеченному классу систем, относятся высокотемпературные купратные сверхпроводники (например  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ ), тяжелофермионные соединения типа  $1-1-5$ ,  $\text{CeMIn}_5$  ( $M = \text{Co, Rh, Ir}$ ), а также открытые относительно недавно сверхпроводники на основе железа [1,2,3].

Задача экспериментального определения формы поверхности Ферми (ПФ), в ВТСП на основе меди на первых порах решалась в основном методом электронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [4]. Позднее, с усовершенствованием экспериментальной технологии и качества образцов, появилась возможность измерять поверхность Ферми методами, основанными на анализе квантовых осцилляций намагниченности (эффект де Гааза-ван Альфена (дГВА) [5,6]) и проводимости (эффект Шубникова-де Гааза [7]). Оба эти метода (ARPES и эффект дГВА) активно применялись и при изучении топологии ПФ в тяжелофермионных системах  $1-1-5$  [8,9] и сверхпроводниках на основе железа [10,11].

При сравнении результатов, получаемых разными экспериментальными методами, нередко возникают расхождения в оценке величины и формы ПФ. Так, например, в слабо легированном  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  дырочные ПФ, получаемые в ARPES экспериментах представляются как дуги Ферми [4]. В то же время из экспериментов по квантовым осцилляциям следует, что ПФ являются замкнутыми и составляют примерно 2% от площади зоны Бриллюэна [7,12]. Причем, как оказалось [13], эти

ПФ — электронные, что является необычным для ВТСП  $p$ -типа. Возможное объяснение появления небольших электронных карманов связано с перестройкой ПФ за счет формирования волны зарядовой и спиновой плотности [14].

Нельзя однако игнорировать и тот факт, что сильное магнитное поле в некоторых системах с сильными электронными корреляциями само по себе может привести к перестройке ПФ. В том случае если напряженность магнитного поля  $H$  достаточно велика, чтобы изменить размер или топологию ПФ, частота квантовых осцилляций уже не будет соответствовать ПФ в отсутствие магнитного поля.

В системах с сильной связью зарядовых и спиновых степеней свободы возможен и другой механизм, обуславливающий несоответствие частоты дГВА фактическому размеру ПФ в отсутствие поля. Причем этот механизм не предполагает существенной перестройки ПФ. Как было показано в работе [15], при анализе эффекта дГВА в широкозонных антиферромагнитных (АФМ) полуметаллах возникающий в магнитном поле скос намагниченностей подрешеток вследствие  $s-d$ -обменной связи приводит к движению зон носителей тока. В условиях пиннинга химпотенциала это движение вызывает существенное изменение частоты квантовых осцилляций в скошенной фазе. Несмотря на то что основной акцент в работе [15] был сделан на обосновании возможности экспериментального наблюдения резкого изменения частоты дГВА в точке спин-флип перехода, из формул, полученных в [15], однозначно следует, что в скошенной фазе частота осцилляций дГВА не будет соответствовать величине истинной ПФ.

Отмеченные выше сверхпроводники на основе железа наиболее близки по электронной структуре к рассмотренным в работе [15] АФМ-полуметаллам. Недопирированные соединения на основе железа являются

компенсированными полуметаллами с дырочными ПФ в  $\Gamma$ -точке зоны Бриллюэна и электронными ПФ в  $M$ -точках. При температурах  $\simeq 100$  К в этих системах возникает дальний антиферромагнитный порядок. Для описания экспериментально наблюдаемого разнообразия магнитных структур была предложена спин-фермионная модель [16,17]. Ключевая идея работ [16,17] состоит в возможности разбиения электронных  $3d$ -состояний иона железа на два типа: к первому типу относятся  $d_{xz}$ - и  $d_{yz}$ -состояния, которые рассматриваются как коллективизированные, а ко второму — все остальные  $d$ -состояния, считающиеся хорошо локализованными. Помимо кинетической энергии носителей тока гамильтониан спин-фермионной модели учитывает суперобменное взаимодействие между локализованными спинами и хундовское ферромагнитное взаимодействие между локализованными моментами и коллективизированными электронами и дырками. Причем хундовское взаимодействие является ключевым для описания типа магнитной структуры.

В настоящей работе на основе спин-фермионной модели будут рассмотрены особенности квантовых осцилляций намагниченности коллективизированных квазичастиц в квазидвумерных (2D) компенсированных АФМ-полуметаллах, с параметрами модели, соответствующими железосодержащим сверхпроводникам. В частности, будет показано, что в скошенной АФМ-фазе вследствие сильного хундовского взаимодействия частота осцилляций дГВА будет определяться не только размером ПФ, но и динамикой скоса магнитных подрешеток. Поэтому восстановление величины ПФ в скошенной фазе непосредственно по частоте осцилляций дГВА будет приводить к существенной ошибке.

Учитывая, однако, что двумерный характер движения носителей тока дает возможность наблюдать квантовые осцилляции намагниченности при изменении угла наклона  $\gamma$  магнитного поля к плоскости 2D-полуметалла, будет предложена методика, позволяющая корректно воспроизводить величину ПФ. Эта методика основана на анализе частоты квантовых осцилляций намагниченности как функции параметра  $1/\cos\gamma$ .

## 2. Гамильтониан квазидвумерного АФМ-полуметалла

Носители тока (электроны и дырки), а также подсистему локализованных спиновых моментов, находящихся во внешнем магнитном поле, будем описывать на основе гамильтониана спин-фермионной модели

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_h + \hat{\mathcal{H}}_m + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_Z. \quad (1)$$

Первое и второе слагаемые в выражении (1) отвечают операторам энергии невзаимодействующих электронов и дырок соответственно. Третье слагаемое  $\hat{\mathcal{H}}_m$  описывает локализованные спиновые моменты, связанные между собой обменной связью антиферромагнитного типа. Четвертое слагаемое учитывает хундовское взаимодействие локализованных моментов с носителями тока: дырками

и электронами. Последний член в уравнении (1) соответствует оператору зеемановской энергии системы в магнитном поле.

В представлении вторичного квантования сумма операторов  $\hat{\mathcal{H}}_e$  и  $\hat{\mathcal{H}}_h$  имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_h = \sum_{\lambda k \sigma} (\varepsilon_{\lambda k} - \mu_{\lambda}) c_{\lambda k \sigma}^+ c_{\lambda k \sigma}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_{\lambda k}$  — энергия квазичастицы сорта  $\lambda$  ( $\{e, h\}$ ) в состоянии с квазиимпульсом  $k$ . Химический потенциал для электронов  $\mu_e = \mu$ , а для дырок  $\mu_h = -\mu$ . Оператор  $c_{\lambda k \sigma}^+$  ( $c_{\lambda k \sigma}$ ) рождает (уничтожает) квазичастицу сорта  $\lambda$  в состоянии  $k$  и с проекцией спинового момента  $\sigma$ , принимающей два значения  $\pm 1/2$ .

Антиферромагнитное состояние локализованной спиновой подсистемы, как известно, удобно описывать в двухподрешеточном представлении. Вследствие хундовской связи удвоение периода решетки в АФМ-фазе вызывает модификацию спектра носителей тока [18]. Для описания отмеченного эффекта перейдем в гамильтониане (2) в представление Ванье и введем две подрешетки. В результате получаем

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_h = & \sum_{\lambda f f' \sigma} t^{\lambda}(f, f') c_{\lambda f \sigma}^+ c_{\lambda f' \sigma} \\ & + \sum_{\lambda g g' \sigma} t^{\lambda}(g, g') d_{\lambda g \sigma}^+ d_{\lambda g' \sigma} + \sum_{\lambda f g \sigma} t_{f g}^{\lambda} \left( c_{\lambda f \sigma}^+ d_{\lambda g \sigma} + d_{\lambda g \sigma}^+ c_{\lambda f \sigma} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

В выражении (3) узлы, относящиеся к  $F$ -подрешетке, обозначены индексами  $f$  и  $f'$ , а к  $G$ -подрешетке — индексами  $g$  и  $g'$ . Операторы рождения (уничтожения) квазичастицы сорта  $\lambda$  со спином  $\sigma$  на узле  $g$ , принадлежащем  $G$ -подрешетке, обозначены посредством  $d_{\lambda g \sigma}^+$  ( $d_{\lambda g \sigma}$ ). Для операторов, рождающих и уничтожающих соответствующие квазичастицы на узле  $f$  из  $F$ -подрешетки, используются прежние обозначения  $c_{\lambda f \sigma}^+$  ( $c_{\lambda f \sigma}$ ). Первые две суммы в (3) описывают переходы квазичастиц в пределах одной и той же подрешетки  $F$  или  $G$ , с интегралами туннелирования  $t_{f f'}^{\lambda}$  и  $t_{g g'}^{\lambda}$ . Третья сумма отвечает переходам из разных подрешеток с параметром перескока  $t_{f g}^{\lambda}$ . При этом

$$t^{\lambda}(f, f') = t_{f f'}^{\lambda} + \delta_{f f'} (\varepsilon_{\lambda} - \mu_{\lambda}), \quad (4)$$

где  $\delta_{f f'}$  — символ Кронекера, параметры  $\varepsilon_e$  и  $\varepsilon_h$  обозначают энергии связи электронов и дырок на узле  $f$ . Определение функции  $t^{\lambda}(g, g')$  следует из формулы (4) если произвести замену  $f \rightarrow g$ .

Третье слагаемое в гамильтониане (1), учитывающее обменное взаимодействие в локализованной спиновой подсистеме, опишем в рамках модели Гейзенберга

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_m = & -\frac{1}{2} \sum_{f f'} I_{f f'} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{g g'} I_{g g'} (\mathbf{S}_g \mathbf{S}_{g'}) \\ & + \sum_{f g} K_{f g} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $\mathbf{S}_{f(g)}$  — векторный оператор спинового момента на узле  $f(g)$  из  $F(G)$ -подрешетки.  $I_{f f'}$  и  $I_{g g'}$  — интегралы

лы обменных взаимодействий для спиновых моментов из одной и той же подрешетки, а параметр  $K_{fg}$  отвечает энергии обменного взаимодействия спинов из разных подрешеток. Для реализации дальнего АФМ-порядка все отмеченные параметры обмена должны быть положительными. Отметим, что в отношении магнитных свойств рассматриваемые системы являются трехмерными. Термин квазидвумерность в настоящей работе используется только для характеристики транспортных свойств АФМ-полуметаллов.

Оператор хундовского взаимодействия между локализованными магнитными моментами и спиновыми моментами носителей тока (четвертое слагаемое в (1)) запишем в виде

$$\hat{\mathcal{H}}_H = - \sum_{f\lambda} J_\lambda (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\lambda f}) - \sum_{g\lambda} J_\lambda (\mathbf{S}_g \boldsymbol{\sigma}_{\lambda g}), \quad (6)$$

где интенсивность хундовской связи локализованного спина с квазичастицами сорта  $\lambda$  определяется параметром  $J_\lambda$ , а компоненты операторов спинового момента носителей тока  $\boldsymbol{\sigma}_{\lambda f(g)}$  имеют следующее представление через фермиевские операторы:

$$\begin{aligned} \sigma_{\lambda f}^+ &= c_{\lambda f \uparrow}^+ c_{\lambda f \downarrow}, \quad \sigma_{\lambda f}^- = c_{\lambda f \downarrow}^+ c_{\lambda f \uparrow}, \quad \sigma_{\lambda f}^z = \sum_{\sigma} \sigma c_{\lambda f \sigma}^+ c_{\lambda f \sigma}, \\ \sigma_{\lambda g}^+ &= d_{\lambda g \uparrow}^+ d_{\lambda g \downarrow}, \quad \sigma_{\lambda g}^- = d_{\lambda g \downarrow}^+ d_{\lambda g \uparrow}, \quad \sigma_{\lambda g}^z = \sum_{\sigma} \sigma d_{\lambda g \sigma}^+ d_{\lambda g \sigma}. \end{aligned} \quad (7)$$

Учитывая представления (7), запишем последнее слагаемое в гамильтониане (1), отвечающее зеемановской энергии, в виде

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_Z &= -2\mu_B \left( \sum_{f\lambda} \sigma_{\lambda f} + \sum_{g\lambda} \sigma_{\lambda g} \right) \mathbf{H} \\ &\quad - g_L \mu_B \left( \sum_f \mathbf{S}_f + \sum_g \mathbf{S}_g \right) \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $g_L$  — фактор Ланде,  $\mu_B$  — магнетон Бора, а  $\mathbf{H}$  — вектор напряженности внешнего магнитного поля. Первое слагаемое в выражении (8) описывает взаимодействие с магнитным полем коллективизированных электронов и дырок, а второе — локализованных спиновых моментов.

Кроме того, мы предполагаем, что в подсистеме локализованных спиновых моментов имеется сильная анизотропия типа „легкая плоскость“, и эта плоскость совпадает с областью движения носителей тока.

### 3. Унитарные преобразования гамильтониана

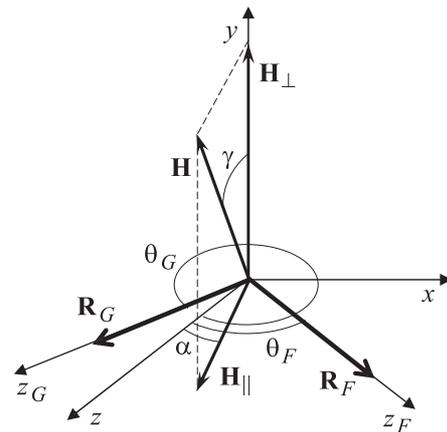
Специфика данной задачи определяется не только тем, что движение носителей тока ограничено двумерной плоскостью, но и тем, что магнитное поле направлено под углом к этой плоскости. Геометрия рассматриваемой задачи представлена на рис. 1. Ось  $y$  направлена перпендикулярно к плоскости, в пределах которой движутся заряды. Соответственно оси  $x$  и  $z$  лежат в этой плоскости.

Угол между направлением внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$  и нормалью к плоскости обозначен посредством  $\gamma$ , а угол между проекцией магнитного поля на плоскость  $zx$  и осью  $x$  — через  $\alpha$ .

Вследствие сильной анизотропии типа легкая плоскость локализованные магнитные моменты лежат в плоскости  $zx$ . Поэтому скос векторов намагниченности подрешеток [19] происходит также в пределах плоскости  $zx$ . При этом сам скос обусловлен исключительно параллельной плоскости  $zx$  компонентой магнитного поля  $\mathbf{H}_{\parallel}$ .

Для идентичных подрешеток, с которыми мы здесь имеем дело, угол между вектором равновесной намагниченности  $\mathbf{R}_F$  для  $F$ -подрешетки и направлением вектора проекции магнитного поля  $\mathbf{H}_{\parallel}$ , совпадает с углом между вектором  $\mathbf{R}_G$  из  $G$ -подрешетки и полем  $\mathbf{H}_{\parallel}$ . Заметим, однако, что при наличии в плоскости легкого намагничивания дополнительной одноионной анизотропии, например, тетрагональной симметрии, эти углы уже не обязательно будут одинаковыми. В настоящей работе мы не будем рассматривать влияние дополнительной анизотропии на квантовые осцилляции. Тем не менее спектр фермиевских возбуждений рассчитаем для этого, более общего случая. Для описания несимметричного скоса векторов намагниченности подрешеток введем углы  $\theta_F$  и  $\theta_G$ , определяющие направления векторов  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  относительно оси  $z$ .

Состояние локализованной подсистемы из-за хундовского взаимодействия, вообще говоря, должно определяться с учетом коллективизированных электронов и дырок. Однако в соединениях с низкой концентрацией носителей тока их влиянием на локализованную спиновую подсистему можно пренебречь. Это означает,



**Рис. 1.** Относительные ориентации внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$  и векторов равновесной намагниченности  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  в  $F$ - и  $G$ -подрешетках. Движение носителей тока ограничено плоскостью  $zx$ . Поле  $\mathbf{H}$  направлено под углом  $\gamma$  к оси  $y$ . Угол между осью  $z$  и направлением проекции магнитного поля  $\mathbf{H}_{\parallel}$  на плоскость  $zx$  обозначен посредством  $\alpha$ . Векторы  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$ , составляющие с осью  $z$  углы  $\theta_F$  и  $\theta_G$ , вследствие сильной анизотропии лежат в плоскости  $zx$ . Новые оси локальных систем координат  $z_F$  и  $z_G$  после унитарных преобразований (10) направлены вдоль векторов  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  соответственно.

что равновесная конфигурация локализованных спиновых моментов определяется в главном приближении взаимодействиями (5) и (8). В то же время спектральные свойства электронов и дырок благодаря хундовскому взаимодействию (6) в значительной степени обусловлены состоянием подсистемы локализованных спинов. Заметим в этой связи, что концентрация носителей тока в сверхпроводниках на основе железа составляет величину порядка  $\sim 0.06$  на элементарную ячейку [2]. Поэтому в настоящей работе мы ограничимся рассмотрением случая низкой концентрации зонных квазичастиц.

Для нахождения спектра квазичастиц АФМ-полуметалла в магнитном поле перейдем для каждой из магнитных подрешеток в свою локальную систему координат. Новая система координат выбирается таким образом, чтобы вектор равновесной намагниченности в подрешетке  $F(G)$  был направлен вдоль новой оси  $z_F(z_G)$  (см. рис. 1). Для этого выполним унитарное преобразование гамильтониана (1)

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}' = \hat{U} \hat{\mathcal{H}} \hat{U}^+, \quad (9)$$

где унитарный оператор  $\hat{U}$  выберем в виде

$$\hat{U} = \prod_{fg} \exp\{i\theta_F(S_f^y + \sigma_{ef}^y + \sigma_{hf}^y)\} \times \exp\{i\theta_G(S_g^y + \sigma_{eg}^y + \sigma_{hg}^y)\}. \quad (10)$$

Выбор в качестве генераторов преобразований  $y$ -компонент операторов спинного момента означает, что унитарное преобразование (10) описывает поворот в спиновом пространстве локализованной и коллективизированной подсистем вокруг оси  $y$  на угол  $\theta_F$  для  $F$ -подрешетки и на угол  $\theta_G$  для  $G$ -подрешетки.

Используя выражение (10), получаем законы преобразований для электронных и дырочных операторов

$$c_{\lambda f \sigma}(\theta_F) = \hat{U} c_{\lambda f \sigma} \hat{U}^+ = c_{\lambda f \sigma} \cos \frac{\theta_F}{2} + 2\bar{\sigma} c_{\lambda f \bar{\sigma}} \sin \frac{\theta_F}{2}, \quad (11)$$

а также для спиновых операторов

$$\begin{aligned} S_f^x(\theta_F) &= \hat{U} S_f^x \hat{U}^+ = S_f^x \cos \theta_F + S_f^z \sin \theta_F, \\ S_f^y(\theta_F) &= \hat{U} S_f^y \hat{U}^+ = S_f^y, \\ S_f^z(\theta_F) &= \hat{U} S_f^z \hat{U}^+ = S_f^z \cos \theta_F - S_f^x \sin \theta_F, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\bar{\sigma} = -\sigma$ . Законы преобразований для операторов  $d_{\lambda g \sigma}$  и  $S_g^{x(y,z)}$ , относящихся к  $G$ -подрешетке, следуют из формул (11) и (12) после замены  $\theta_F \rightarrow \theta_G$ .

Проводя унитарные преобразования (10) для слагаемых гамильтониана (1), после перехода к представлению квазиимпульса по формулам

$$\begin{aligned} t_{ff'}^\lambda &= \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-f')} t_k^\lambda, & t_{gg'}^\lambda &= \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(g-g')} t_k^\lambda, \\ t_{fg}^\lambda &= \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(f-g)} \Gamma_k^\lambda, \\ c_{\lambda f \sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} c_{\lambda k \sigma}, & d_{\lambda g \sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikg} d_{\lambda k \sigma} \end{aligned} \quad (13)$$

получаем электрон-дырочный гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eh} &= \sum_{\lambda k \sigma} \left[ \varepsilon_{\lambda k \sigma}^F c_{\lambda k \sigma}^+ c_{\lambda k \sigma} + \varepsilon_{\lambda k \sigma}^G d_{\lambda k \sigma}^+ d_{\lambda k \sigma} \right. \\ &+ \Gamma_k^\lambda \cos\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) (c_{\lambda k \sigma}^+ d_{\lambda k \sigma} + d_{\lambda k \sigma}^+ c_{\lambda k \sigma}) \\ &+ 2\sigma \Gamma_k^\lambda \sin\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) (c_{\lambda k \sigma}^+ d_{\lambda k \bar{\sigma}} + d_{\lambda k \bar{\sigma}}^+ c_{\lambda k \sigma}) \\ &\left. + h_\sigma(\theta_F) c_{\lambda k \bar{\sigma}}^+ c_{\lambda k \sigma} + h_\sigma(\theta_G) d_{\lambda k \bar{\sigma}}^+ d_{\lambda k \sigma} \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

При записи выражения (14) были введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\lambda k \sigma}^{F(G)} &= \varepsilon_\lambda + t_k^\lambda - \mu_\lambda - 2\sigma \mu_B H_{\parallel} \cos(\alpha - \theta_{F(G)}) - \sigma J_\lambda R_{F(G)}, \\ h_\sigma(\theta) &= -\mu_B H_{\parallel} \sin(\alpha - \theta) - 2\sigma i \mu_B H_{\perp}, \end{aligned}$$

где  $R_F$  и  $R_G$  — абсолютные значения векторов намагниченности в  $F$ - и  $G$ -подрешетках.

При получении выражения для  $\hat{\mathcal{H}}_{eh}$  в гамильтониане  $\hat{\mathcal{H}}_H$  после унитарного преобразования было проведено обычное выделение слагаемых, соответствующих учету среднего поля. Эти слагаемые учитываются в выражениях для  $\varepsilon_{\lambda k \sigma}^{F(G)}$ . Возможность использования приближения среднего поля обусловлена как малой концентрацией носителей тока, так и низкими температурами ( $T \ll T_N$ ).

#### 4. Энергетический спектр электронов и дырок в антиферромагнитном полуметалле

Для нахождения энергетического спектра носителей тока в антиферромагнитном полуметалле в скошенной АФМ-фазе воспользуемся методом уравнений движения для двухвременных температурных функций Грина [20]. Определим два типа функций Грина

$$\begin{aligned} G_{\lambda k}^{\sigma' \sigma}(t-t') &= -i\theta(t-t') \langle \{c_{\lambda k \sigma'}(t), c_{\lambda k \sigma}^+(t')\} \rangle, \\ F_{\lambda k}^{\sigma' \sigma}(t-t') &= -i\theta(t-t') \langle \{d_{\lambda k \sigma'}(t), c_{\lambda k \sigma}^+(t')\} \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь  $\Theta(t-t')$  — ступенчатая функция Хевисайда, равная единице при  $t > t'$ , и нулю при  $t < t'$ . Угловые скобки означают усреднение по большому каноническому ансамблю с гамильтонианом (14). Фигурные скобки обозначают антикоммутатор. Все операторы в формулах (16) берутся в представлении Гейзенберга.

Систему уравнений движения для Фурье-образов функций Грина  $G_{\lambda k}^{\sigma' \sigma}(\omega)$  и  $F_{\lambda k}^{\sigma' \sigma}(\omega)$  удобно записать в матричной форме

$$\hat{M} \mathbf{G} = \mathbf{B}, \quad (17)$$

где  $\mathbf{G}$  — вектор-столбец, элементами которого являются четыре функции Грина:  $G_{\lambda k}^{\sigma \sigma}(\omega)$ ,  $G_{\lambda k}^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}}(\omega)$ ,  $F_{\lambda k}^{\sigma \sigma}(\omega)$  и

$F_{\lambda k}^{\sigma\sigma}(\omega)$ , вектор  $\mathbf{V}$  равен  $(1, 0, 0, 0)^T$ , а матрица  $\hat{M}$  имеет вид

$$\begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{\lambda k\sigma}^F & -h_{\sigma}(\theta_F) & -\Gamma_k^{\lambda} \cos\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & -2\sigma \Gamma_k^{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) \\ -h_{\sigma}(\theta_F) & \omega - \varepsilon_{\lambda k\sigma}^F & 2\sigma \Gamma_k^{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & -\Gamma_k^{\lambda} \cos\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) \\ -\Gamma_k^{\lambda} \cos\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & 2\sigma \Gamma_k^{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & \omega - \varepsilon_{\lambda k\sigma}^G & -h_{\sigma}(\theta_G) \\ -2\sigma \Gamma_k^{\lambda} \sin\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & -\Gamma_k^{\lambda} \cos\left(\frac{\theta_F - \theta_G}{2}\right) & -h_{\sigma}(\theta_G) & \omega - \varepsilon_{\lambda k\sigma}^G \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Электрон-дырочный спектр находится из решения уравнения четвертой степени:  $\det|\hat{M}| = 0$ . Вычисление детерминанта  $\det|\hat{M}|$  существенно упрощается если предварительно провести унитарное преобразование матрицы  $\hat{M}$ :

$\hat{M}' = \hat{T}^+ \hat{M} \hat{T}$ , где унитарный оператор  $\hat{T}$  определяется с помощью матриц второго порядка  $\hat{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}$

выражением:  $\hat{T} = \begin{pmatrix} \hat{u} & 0 \\ 0 & \hat{u} \end{pmatrix}$ . В результате для детерминанта матрицы  $\hat{M}'$  находим

$$\begin{vmatrix} \tilde{\omega} - 2\sigma \mu_B H_{\perp} & \sigma \tilde{H}_F & -\Gamma_k^{\lambda} e^{-i2\sigma \frac{\theta_F - \theta_G}{2}} & 0 \\ \sigma \tilde{H}_F^{\dagger} & \tilde{\omega} + 2\sigma \mu_B H_{\perp} & 0 & -\Gamma_k^{\lambda} e^{i2\sigma \frac{\theta_F - \theta_G}{2}} \\ -\Gamma_k^{\lambda} e^{i2\sigma \frac{\theta_F - \theta_G}{2}} & 0 & \tilde{\omega} - 2\sigma \mu_B H_{\perp} & \sigma \tilde{H}_G \\ 0 & -\Gamma_k^{\lambda} e^{-i2\sigma \frac{\theta_F - \theta_G}{2}} & \sigma \tilde{H}_G^{\dagger} & \tilde{\omega} + 2\sigma \mu_B H_{\perp} \end{vmatrix}, \quad (19)$$

где  $\tilde{\omega} = \omega - \varepsilon_{\lambda} - t_k^{\lambda} + \mu_{\lambda}$ , а эффективное поле:  $\tilde{H}_{F(G)} = 2\mu_B H_{\parallel} e^{i2\sigma(\alpha - \theta_{F(G)})} + J_{\lambda} R_{F(G)}$ .

Раскрывая детерминант (19) и приравнявая его нулю, получаем биквадратное уравнение, определяющее энергетический спектр электронов и дырок. Четыре решения биквадратного уравнения можно записать в виде

$$E_{\lambda k\sigma}^{\pm} = \varepsilon_{\lambda} + t_k^{\lambda} - \mu_{\lambda} \pm \sqrt{-C_2 + 2\sigma \sqrt{C_2^2 - C_0}}, \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} C_2 &= -\Gamma_k^{\lambda 2} - \mu_B^2 \mathbf{H}^2 - \frac{J_{\lambda}^2}{8} (R_F^2 + R_G^2) - \frac{1}{2} J_{\lambda} \mu_B H_{\parallel} \\ &\quad \times [R_F \cos(\alpha - \theta_F) + R_G \cos(\alpha - \theta_G)], \\ C_0 &= \left(\frac{J_{\lambda}}{2}\right)^4 R_F^2 R_G^2 + \left(\Gamma_k^{\lambda 2} - (\mu_B \mathbf{H})^2\right)^2 \\ &\quad + \left(\frac{J_{\lambda}}{2}\right)^2 (\mu_B \mathbf{H})^2 (R_F^2 + R_G^2) + \left(\Gamma_k^{\lambda 2} - (\mu_B \mathbf{H})^2\right) J_{\lambda} \mu_B H_{\parallel} \\ &\quad \times [R_F \cos(\alpha - \theta_F) + R_G \cos(\alpha - \theta_G)] \\ &\quad - \frac{J_{\lambda}^3}{4} \mu_B H_{\parallel} R_F R_G [R_F \cos(\alpha - \theta_G) + R_G \cos(\alpha - \theta_F)] \\ &\quad + \frac{J_{\lambda}^2}{2} R_F R_G \left[ (\mu_B H_{\parallel})^2 - \Gamma_k^{\lambda 2} \right] \cos(\theta_F - \theta_G) \\ &\quad + (\mu_B H_{\parallel})^2 \cos(2\alpha - \theta_F - \theta_G). \end{aligned} \quad (21)$$

Выражения (20) и (21) дают решение задачи о спектре электронов и дырок антиферромагнитного полуметалла в скошенной АФМ фазе в наиболее общем случае: произвольных направлений магнитного поля и векторов равновесного намагничивания подрешеток (см. рис. 1).

Принимая во внимание симметрию изначально поставленной задачи, направим ось  $z$  вдоль проекции магнитного поля  $\mathbf{H}_{\parallel}$  (т.е. положим  $\alpha = 0$ ). При этом возникает связь между значениями углов и намагниченностей из разных подрешеток

$$\theta_F = -\theta_G = \theta, \quad R_F = R_G = R. \quad (22)$$

Учитывая данные равенства выражение для спектра (20) можно существенно упростить и представить в виде

$$\begin{aligned} E_{\lambda k\sigma}^{\pm} &= \varepsilon_{\lambda} + t_k^{\lambda} - \mu_{\lambda} \\ &\quad \pm \left\{ \left[ \Gamma_k^{\lambda} + 2\sigma \sqrt{(\mu_B H_{\perp})^2 + \left(\mu_B H_{\parallel} + \frac{J_{\lambda} R}{2} \cos \theta\right)^2} \right]^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{J_{\lambda} R}{2}\right)^2 \sin^2 \theta \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (23)$$

Заметим, что при дополнительном условии  $\mathbf{H}_{\perp} = 0$  и  $\mathbf{H}_{\parallel} = \mathbf{H}$  выражение (23) совпадает с электрон-дырочным энергетическим спектром, полученным ранее в работе [15].

Предположим, что движение квазичастиц по квадратной решетке обусловлено их перескоками только между ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Тогда для функций  $\Gamma_k^{\lambda}$  и  $t_k^{\lambda}$  можем записать

$$\begin{aligned} \Gamma_k^{\lambda} &= 4t_1^{\lambda} \cos(k_x b/2) \cos(k_y b/2), \\ t_k^{\lambda} &= 2t_2^{\lambda} (\cos(k_x b) + \cos(k_y b)), \end{aligned} \quad (24)$$

где  $t_1^{\lambda}$  и  $t_2^{\lambda}$  — интегралы перескока квазичастиц сорта  $\lambda$  между первыми и вторыми соседями соответственно,  $b$  — параметр квадратной решетки в АФМ-фазе.

Если ширина зоны  $W$ , определяемая интегралами туннелирования  $t_1^\lambda$  и  $t_2^\lambda$ , много меньше хундовского взаимодействия  $J_\lambda$ , то рассматриваемая здесь модель соответствует модели двойного обмена, используемой, например, для описания фазовой диаграммы манганитов. В сверхпроводниках на основе железа ситуация обратная:  $W \gg J_\lambda$ . Так, например, в работе [21] была получена оценка для хундовского обмена:  $J_\lambda \sim 0.35$  eV. В настоящей работе будут использоваться следующие соотношения между параметрами модели

$$W \gg J_\lambda \sim \mu_\lambda \gg K_0 \sim T_N \sim \mu_B H \gg T. \quad (25)$$

Учитывая (25), а также то, что в полуметаллах с низкой концентрацией носителей тока термодинамические свойства электрон-дырочной подсистемы определяются малыми значениями квазиимпульса  $\mathbf{k}$ , энергетический спектр (23), отвечающий нижней зоне запишем в виде

$$E_{\lambda\sigma}^- = -\Delta_\lambda + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\lambda} - \mu_\lambda - 2\sigma \bar{H}_\lambda, \quad (|\mathbf{k}|b \ll 1). \quad (26)$$

В этой формуле параметр  $-\Delta_\lambda = \varepsilon_\lambda + 4(t_2^\lambda - |t_1^\lambda|)$  задает отсчет энергии квазичастиц. Для электронов значение  $\varepsilon_e$  подбирается из условия  $\Delta_e = 0$ , а для дырок величина  $\Delta_h$  выбирается положительной. Эффективные массы дырок  $m_h$  и электронов  $m_e$  в формуле (26) выражаются через интегралы туннелирования

$$\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} = \left( \frac{|t_1^\lambda|}{2} - t_2^\lambda \right) b^2, \quad (27)$$

а эффективное поле  $\bar{H}_\lambda$  определено выражением

$$\bar{H}_\lambda^2 = (\mu_B H_\perp)^2 + \left( \mu_B H_\parallel + \frac{1}{2} J_\lambda R \cos \theta \right)^2. \quad (28)$$

Как отмечалось выше, в системах с низкой концентрацией носителей тока равновесная конфигурация локализованных спиновых моментов обусловлена главным образом обменным (5) и зеемановским (8) взаимодействиями. Проводя унитарное преобразование (9) операторов взаимодействия (5) и (8) и дальнейшее расщепление в приближении среднего поля, получаем условие на равновесный угол  $\theta$

$$\cos \theta = g_L \mu_B H_\parallel / 2RK_0. \quad (29)$$

Здесь  $K_0 = zK_1$ , где  $K_1$  — обменный интеграл между ближайшими спиновыми моментами, а  $z$  — число ближайших соседей, равное для квадратной решетки четырем. Уравнение (29) позволяет найти величину критического поля  $H_c = 2RK_0 / g_L \mu_B \sin \gamma$ , при котором происходит схлопывание намагниченностей подрешеток: угол  $\theta$  обращается в ноль.

Из уравнений (26), (28) и (29) следует, что в скошенной АФМ-фазе при изменении внешнего магнитного поля (как абсолютной величины  $\mathbf{H}$ , так и его направления) происходит смещение точки отсчета дисперсионных зависимостей без изменения эффективной массы квазичастиц. Причем если в коллинеарной фазе ( $H > H_c$ ) скорость этого смещения  $dE_{\lambda\sigma}^- / dH \sim \mu_B$ , то в скошенной фазе ( $H < H_c$ ) скорость движения спектра возрастает существенно — примерно в  $J_\lambda / K_0$  раз.

## 5. Особенности квантовых осцилляций в 2D-АФМ-полуметаллах

Для изучения квантовых осцилляций намагниченности в квазидвумерных антиферромагнитных полуметаллах воспользуемся формулой (см. например [22])

$$M_\sim = - \sum_{\lambda\sigma} M_0^\lambda \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n \sin \left( \frac{2\pi \tilde{\mu}_{\lambda\sigma}}{\hbar \omega_{c\lambda}} n \right)}{\sinh \left( \frac{2\pi^2 T}{\hbar \omega_{c\lambda}} n \right)}. \quad (30)$$

В приведенном выражении  $M_\sim$  — осциллирующая часть намагниченности,  $\omega_{c\lambda} = |e|H_\perp / m_\lambda c$  — циклотронная частота,  $T$  — температура, выраженная в энергетических единицах, а  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$  — перенормированный химпотенциал, совпадающий при низких температурах с энергией Ферми

$$\tilde{\mu}_{\lambda\sigma} = \Delta_\lambda + \mu_\lambda + 2\sigma \bar{H}_\lambda. \quad (31)$$

Амплитуду квантовых осцилляций намагниченности  $M_0^\lambda$  в формуле (30) можно записать в виде

$$M_0^\lambda = \frac{T}{(|t_1^\lambda| - 2t_2^\lambda)} \frac{\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}}{\mu_B H_\perp} \frac{\mu_B}{b^3}, \quad (32)$$

если считать толщину 2D-слоя равной параметру решетки  $b$ .

Для выявления особенностей эффекта дГВА в АФМ-полуметаллах заметим, что в условиях скоса намагниченностей подрешеток ( $\theta < \pi/2$ ) и при учете соотношений (25) для эффективного поля (28) можно написать:  $\bar{H}_\lambda \approx J_\lambda R \cos \theta / 2$ . Видно, что хундовское взаимодействие  $J_\lambda$  ( $\sim \mu_\lambda$ ) дает существенный вклад в энергию квазичастиц, который при  $H < H_c$  зависит от магнитного поля линейно. Тогда, учитывая выражения (29) и (31), получаем, что фаза осциллирующих слагаемых (т.е. аргумент функции  $\sin$  с  $n = 1$  в формуле (30)) при  $H < H_c$

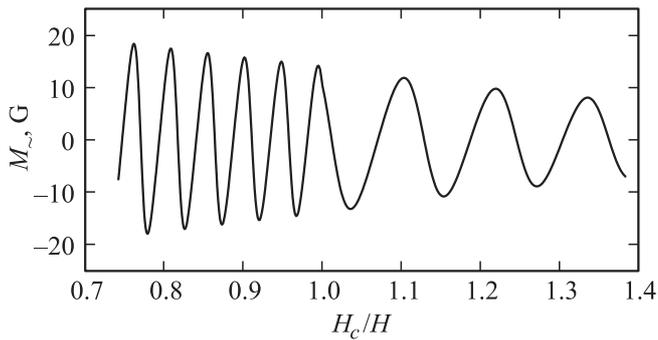
$$\phi_{\lambda\sigma}^< = \frac{\pi m_\lambda}{m_0} \left( \frac{\Delta_\lambda + \mu_\lambda}{\mu_B H \cos \gamma} + \frac{\sigma J_\lambda g_L}{2K_0} \tan \gamma \right), \quad (33)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона. Если  $H > H_c$ , то фаза определяется выражением

$$\phi_{\lambda\sigma}^> = \frac{\pi m_\lambda}{m_0} \frac{\Delta_\lambda + \mu_\lambda + \sigma J_\lambda R}{\mu_B H \cos \gamma}. \quad (34)$$

При записи (33) и (34) было учтено, что  $H_\parallel = H \sin \gamma$  и  $H_\perp = H \cos \gamma$ .

Формула (33) показывает, что за счет линейной зависимости от  $H$  энергии Ферми (31) в скошенной антиферромагнитной фазе частота осцилляций эффекта дГВА определяется не ренормированным химпотенциалом  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ , который непосредственно отвечает за число носителей тока и соответственно за размер поверхности Ферми, а параметром  $\Delta_\lambda + \mu_\lambda$ . Последний отличается от энергии Ферми на величину  $\bar{H}_\lambda$ , имеющую в скошенной фазе тот же порядок, что и  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ .



**Рис. 2.** Резкая смена частоты осцилляций эффекта дГВА при переходе спиновой подсистемы из скошенной АФМ-фазы в коллинеарную ферромагнитную. Параметры модели выбирались следующие:  $t_1^e = t_1^h = -1$  eV,  $t_2^e = t_2^h = 0$ ,  $J_e = J_h = 0.15$  eV,  $\Delta = 0.15$  eV,  $R = 3/2$ ,  $g_L = 2$ ,  $K_0 = 5.5 \cdot 10^{-3}$  eV. При расчете магнитное поле составляло угол  $\gamma = 45^\circ$  по отношению к нормали к плоскости.  $T = 10$  К, а параметр решетки  $b = 2 \cdot 10^{-8}$  см.

При увеличении напряженности магнитного поля до значений, равных критическому, происходит спин-флип переход и угол  $\theta$  обращается в ноль. В ферромагнитной фазе (при  $H > H_c$ ) вклад в энергию квазичастиц за счет хундовской связи практически не зависит от магнитного поля. Как следует из формулы (34), в этом случае частота осцилляций дГВА будет пропорциональна энергии Ферми  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ .

Таким образом, при переходе через спин-флип точку должна наблюдаться резкая смена частоты осцилляций намагниченности. Отмеченный эффект был впервые предсказан в работе [15] при изучении трехмерных АФМ-полуметаллов.

По изменению частоты осцилляций эффекта дГВА можно, в частности, определять отношение величины хундовского взаимодействия  $J_\lambda$  к энергии Ферми  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ . Действительно, учитывая связь между изменением фазы  $\Delta\phi$  и частотой осцилляций  $F_{\lambda\sigma}$ :  $\Delta\phi = 2\pi F_{\lambda\sigma}\Delta(1/H)$ , и используя выражения (33) и (34) получаем

$$\frac{F_{\lambda\sigma}^> - F_{\lambda\sigma}^<} {F_{\lambda\sigma}^>} = \frac{J_\lambda} {\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}} \sigma R, \quad (35)$$

где  $F_{\lambda\sigma}^<$  ( $F_{\lambda\sigma}^>$ ) — частота эффекта дГВА при  $H$  меньшем (большем)  $H_c$ .

Отмеченная особенность эффекта дГВА продемонстрирована на рис. 2. Для простоты параметры, определяющие энергетический спектр электронов и дырок, выбирались одинаковыми. Константа  $K_0$  по приближенной формуле  $T_N \approx S(S+1)K_0/3$  связывалась с температурой Нееля  $T_N$ , которая полагалась равной 80 (К). Поскольку расчет  $M_{\sim}$  производился при температуре  $T \ll T_N$ , то средняя намагниченность  $R \approx S$ . Значение спина  $S$  принималось равным 3/2. Величина химического потенциала  $\mu_\lambda$  находилась самосогласованно для каждого значения магнитного поля  $H$  из условия равенства числа дырок и электронов. При выбранных значениях параметров модели заполненными оказываются только подзоны

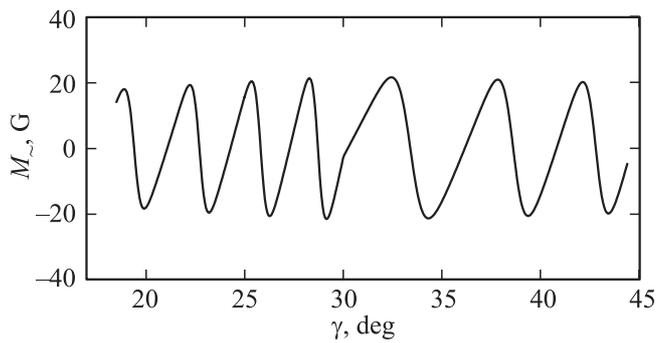
квазичастиц с  $\sigma = +1/2$  (подзоны с  $\sigma = -1/2$  — пустые). Поэтому с каждой стороны от точки спин-флип перехода ( $H = H_c$ ) наблюдается только по одной частоте осцилляций. Кривая намагниченности, представленная на рис. 2, демонстрирует двукратное увеличение частоты осцилляций при переходе из скошенной фазы в коллинеарную. Оценка значения константы хундовской связи  $J_\lambda$  по формуле (35) дает две трети от величины энергии Ферми  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ .

Отметим, что для наблюдения резкой смены частоты эффекта дГВА в 2D-АФМ-полуметаллах необходимо, чтобы обе компоненты магнитного поля  $H_{\parallel}$  и  $H_{\perp}$  не были равны нулю. В отличие от трехмерных АФМ-полуметаллов, в данном случае роль компонент  $H_{\parallel}$  и  $H_{\perp}$  различна, как по объекту воздействия, так и по результату воздействия. Параллельная плоскости компонента поля  $H_{\parallel}$  действует только на локализованную спиновую подсистему и вызывает скос намагниченности подрешеток. Перпендикулярная составляющая магнитного поля  $H_{\perp}$ , действуя только на носители тока, приводит к квантованию их энергетического спектра и, как следствие, к квантовым осцилляциям намагниченности. В этом состоит первая особенность обсуждаемого эффекта, характерная для квазидвумерных АФМ-полуметаллов.

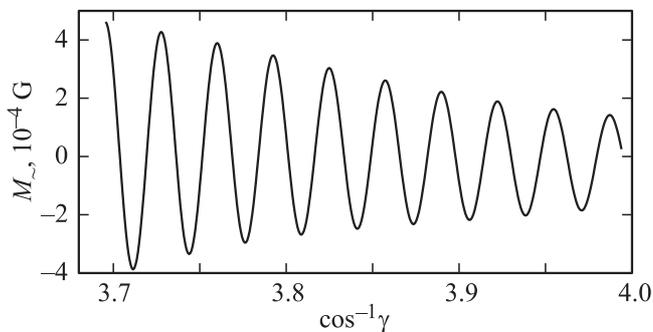
Вторая особенность связана с зависимостью фазы осциллирующих слагаемых в формуле (30) от угла наклона магнитного поля  $\mathbf{H}$  к плоскости 2D-полуметалла. Если величина магнитного поля фиксирована и достаточна для того, чтобы при некотором значении угла наклона  $\gamma_c$  произошел спин-флип переход, то в эксперименте также должна наблюдаться резкая смена частоты осцилляций намагниченности как функции угла  $\gamma$ , в точке  $\gamma = \gamma_c$ . Из анализа формул (33) и (34) следует, что, как и раньше, смена частоты осцилляций намагниченности связана с зависимостью величины энергии Ферми  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$  от хундовского взаимодействия. При этом если спин-флип переход происходит при углах  $\gamma_c$  близких к  $\pi/2$  (при которых  $\sin \gamma_c$  близок к 1), то смена частоты осцилляций  $M_{\sim}(\gamma)$  практически не заметна. Если же угол  $\gamma_c$  мал, то набег фазы  $\phi_{\lambda\sigma}^<$  за счет второго слагаемого в формуле (33) незначителен, в сравнении с аналогичным слагаемым в формуле (34) для фазы  $\phi_{\lambda\sigma}^>$ . В этом случае смена частоты осцилляций намагниченности  $M_{\sim}$  как функции угла наклона  $\gamma$  должна четко проявляться. Представленные на рис. 3 численные расчеты  $M_{\sim}(\gamma)$  при  $\gamma_c = 30^\circ$ , подтверждают сделанные выводы.

Следует отметить, что для экспериментального наблюдения эффектов, связанных со спин-флип переходом в АФМ-полуметаллах с температурной Нееля  $\sim 100$  К, необходимы магнитные поля с напряженностью  $\sim 180$  Т. В настоящее время создание таких сильных полей является довольно сложной задачей.

С этой точки зрения важное значение приобретает следующее обстоятельство, также связанное с угловой зависимостью фазы осциллирующих слагаемых в формуле (30), но имеющее место при значительно меньших магнитных полях (меньших  $H_c$ ). Как было



**Рис. 3.** Резкая смена частоты осцилляций намагниченности  $M_{\sim}$  как функции угла  $\gamma$  при спин-флип переходе. Значения параметров модели выбирались такими же, как и на рис. 2. Напряженность магнитного поля  $H$  подбиралось из условия  $\gamma_c = 30^\circ$ .



**Рис. 4.** Осцилляции намагниченности  $M_{\sim}$  как функции  $1/\cos \gamma$ . Параметры модели выбирались такими же, как и на рис. 2. Напряженность магнитного поля  $H = 74$  Т.

показано выше, в скошенной фазе энергия Ферми в АФМ-полуметаллах, восстанавливаемая из эффекта дГВА (т.е. из анализа  $M_{\sim}$  как функции  $1/H$ ), может отличаться в два раза от истинного значения. Связано это с тем, что достаточно большой вклад в энергию Ферми, обусловленный хундовской связью (т.е. слагаемым  $2\sigma \tilde{H}_{\lambda}$ ), в главном приближении линеен по  $H$ . При подстановке в формулу (30) этот вклад (после деления на  $\hbar\omega_{c\lambda}$ ) приводит лишь к фазовому сдвигу функции  $M_{\sim}(1/H)$  и поэтому в экспериментах по эффекту дГВА себя не обнаруживает.

Однако если проводить Фурье-анализ  $M_{\sim}$  не как функции обратного магнитного поля, а как функции  $\cos^{-1} \gamma$ , то в интервале углов, не слишком далеких от  $\pi/2$ , частота осцилляций  $M_{\sim}(\cos^{-1} \gamma)$  будет пропорциональна величине истинного химпотенциала  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ . Действительно, поправка к энергии Ферми при  $H < H_c$  дается выражением  $\tilde{H}_{\lambda} \approx \frac{J_{\lambda} R}{2} \cos \theta = \frac{J_{\lambda}}{4K_0} g_L \mu_B H \sin \gamma$ , и при значениях углов  $\gamma$ , близких к  $\pi/2$ , слабо зависит от  $\gamma$ . В этом случае зависимость фазы  $\phi_{\lambda\sigma}^<$  от угла  $\gamma$  в главном приближении будет определяться отношением  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}/\cos \gamma$ , а частота осцилляций  $M_{\sim}(\cos^{-1} \gamma)$  будет пропорциональна  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ .

На рис. 4 представлена зависимость намагниченности  $M_{\sim}$  от обратного значения косинуса угла наклона магнитного поля. Видно, что период осцилляций остается постоянным практически на всем интервале изменения угла  $\gamma$ . Принципиальное значение в данном случае имеет тот факт, что энергия Ферми, восстановленная из Фурье-анализа частоты осцилляций функции  $M_{\sim}(\cos^{-1} \gamma)$ , всего на 2% отличается от значения  $\tilde{\mu}_{\lambda\sigma}$ , полученного в результате решения уравнения для химпотенциала.

## 6. Заключение

Главным результатом проведенных исследований является предложенная методика корректного определения энергии Ферми двумерного широкозонного антиферромагнитного полуметалла с низкой концентрацией носителей тока в скошенной АФМ-фазе. Методика заключается в Фурье-анализе частоты осцилляций намагниченности  $M_{\sim}$  как функции  $1/\cos \gamma$ , где  $\gamma$  — угол наклона магнитного поля к плоскости 2D-полуметалла. В обычных экспериментах по измерению эффекта дГВА регистрируется частота осцилляций  $M_{\sim}$  как функции обратного магнитного поля  $1/H$ . Для 2D-АФМ-полуметаллов такой подход приемлем только при  $H_{\parallel} = 0$  или  $H > H_c$ . В скошенной фазе, как показано в работе, анализ частоты осцилляций функции  $M_{\sim}(1/H)$  может привести к неверным значениями энергии Ферми. В то же время изучение намагниченности  $M_{\sim}$  как функции  $1/\cos \gamma$  позволяет получать значения энергии Ферми, практически не отличающиеся от истинных.

Следует отметить, что значительная погрешность в определении энергии Ферми из частотного анализа функции  $M_{\sim}(1/H)$  возникает в том случае, если энергия хундовской связи сопоставима по величине с энергией Ферми. Это обстоятельство приводит к необходимости искать отмеченный эффект в системах с низкой концентрацией носителей тока. Кроме того, экспериментальное обнаружение значительной разницы между значениями энергий Ферми, получаемых в скошенной фазе из анализа частотной зависимости намагниченности  $M_{\sim}$  как функции  $1/H$  и как функции  $1/\cos \gamma$ , могло бы служить косвенным подтверждением наличия хундовской связи в рассматриваемых системах.

Резкая смена частоты осцилляций эффекта дГВА в точке спин-флип перехода впервые была предсказана для трехмерных АФМ-полуметаллов в работе [15]. В настоящей работе показано, что для наблюдения этого эффекта в квазидвумерных широкозонных АФМ-полуметаллах магнитное поле должно быть направлено под углом к плоскости:  $0 < \gamma < \pi/2$ . Кроме того, в работе приведена формула (35), позволяющая по экспериментально измеренным частотам осцилляций дГВА в левой и правой окрестностях точки спин-флип перехода определять отношение константы хундовской связи к энергии Ферми. Отмечено также, что резкая смена частоты квантовых осцилляций намагниченности в 2D-АФМ-полуметаллах может наблюдаться и при изменении угла  $\gamma$ .

Еще одним результатом исследований следует считать выражение (20) для энергетического спектра электронов и дырок в двумерных широкозонных антиферромагнитных полуметаллах с хундовской связью между локализованными спиновыми моментами и коллективизированными квазичастицами. Новизна полученного выражения состоит в том, что оно описывает электрон-дырочный спектр при произвольной относительной ориентации векторов равновесной намагниченности подрешеток и внешнего магнитного поля, и поэтому имеет более широкую область применения в сравнении с той, что была рассмотрена в настоящей работе. Так, например, во многих двумерных системах помимо анизотропии типа „легкая плоскость“ имеются дополнительные взаимодействия, снимающие вырождение по направлению магнитного момента в плоскости. Эти взаимодействия приводят, в частности, к преимущественной ориентации векторов равновесной намагниченности  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  вдоль высокосимметричных осей кристаллической решетки, лежащих в рассматриваемой плоскости. Поэтому, при наличии параллельной плоскости составляющий магнитного поля  $\mathbf{H}_{\parallel}$ , вектора  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  уже не обязательно будут составлять одинаковые углы с вектором  $\mathbf{H}_{\parallel}$ . Формула (20) для энергетического спектра носителей тока в 2D-АФМ-полуметаллах применима и в этом более общем случае. Необходимость в использовании выражения (20) для спектра носителей тока может также возникнуть при изучении ферромагнитных полуметаллов во внешнем магнитном поле, у которых по определению абсолютные значения векторов намагниченности  $\mathbf{R}_F$  и  $\mathbf{R}_G$  разные.

Авторы выражают благодарность В.В. Валькову и М.М. Коршунову за полезные замечания и обсуждение результатов исследований.

## Список литературы

- [1] М.В. Садовский. УФН **178**, 1243 (2008).
- [2] Ю.А. Изюмов, Э.З. Курамаеву УФН **178**, 1307 (2008).
- [3] P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, I.I. Mazin. Rep. Prog. Phys. **74**, 124 508 (2011).
- [4] A. Damascelli, Z. Hussain, Z.X. Shen. Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
- [5] S. Sebastian, N. Harrison, E. Palm, T.P. Murphy, C.H. Mielke, R. Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, G.G. Lonzarich. Nature, **454**, 200 (2008).
- [6] E.A. Yelland, J. Singleton, C.H. Mielke, N. Harrison, F.F. Balakirev, B. Dabrowski, J.R. Cooper. PRL **100**, 047 003 (2008).
- [7] N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J.-B. Bonnemaision, R. Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, L. Taillefer. Nature, **447**, 565 (2007).
- [8] R. Settai, H. Shishido, S. Ikeda, Y. Murakawa, M. Nakashima, D. Aoki, Y. Haga, H. Harima, Y. Onuki. J. Phys.: Cond. Matter, **13**, L627 (2001).
- [9] A. Koitzsch, T.K. Kim, U. Treske, M. Knupfer, B. Buchner, M. Richter, I. Opahle, R. Follath, E.D. Baurer, J.L. Sarrao. PRB, **88**, 035 124 (2013).
- [10] V.B. Zabolotnyy, D.S. Inosov, D.V. Evtushinsky, A. Koitzsch, A.A. Kordyuk, G.L. Syn, J.T. Park, D. Haug, V. Hinkov, A.V. Boris, C.T. Lin, M. Knupfer, A.N. Yaresko, B. Buchner, A. Varykhalov, R. Follath, S.V. Borisenko. Nature, **457**, 569 (2009).
- [11] T. Terashima, N. Kurita, M. Kimata, M. Tomita, S. Tsuchiya, M. Imai, A. Sato, K. Kihou, C.-H. Lee, H. Kito, H. Eisaki, A. Iyo, T. Saito, H. Fukazawa, Y. Kohori, H. Harima, S. Uji. PRB, **87**, 224 512 (2013).
- [12] S.E. Sebastian, N. Harrison, G.G. Lonzarich. Rep. Prog. Phys. **75**, 102 501 (2012).
- [13] D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, N. Levallois, R. Daou, J.-B. Bonnemaision, N.E. Hussey, L. Balicas, B.J. Ramshaw, R. Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, S. Adachi, C. Proust, L. Taillefer. Nature, **450**, 533 (2007).
- [14] H. Yao, D.H. Lee, S. Kivelson. PRB, **84**, 012 507 (2011).
- [15] В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисавили. ФТТ, **39**, 204 (1997).
- [16] W.-G. Yin, C.-C. Lee, W. Ku. PRL, **105**, 107 004 (2010).
- [17] W. Lv, F. Kruger, P. Phillips. PRB, **82**, 045 125 (2010).
- [18] Э.Л. Нагаев. Физика магнитных полупроводников. М. (1979).
- [19] А.С. Боровик-Романов. Антиферромагнетизм. В кн.: Антиферромагнетизм и ферриты. АН СССР, М. (1962). 325 с.
- [20] Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. Наука, М. (1971). 416 с.
- [21] K. Haule, G. Kotliar. New J. Phys., **11**, 025 021 (2009).
- [22] Д. Шенберг. Магнитные осцилляции в металлах. Мир, М. (1986). 408 с.