

Особенности электронных переходов в почти ферромагнитных полупроводниках (на примере FeSi)

© К.А. Шумихина, А.Г. Волков, А.А. Повзнер

Уральский государственный технический университет,
620002 Екатеринбург, Россия

E-mail: fka@kf.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 24 октября 2002 г.)

В рамках спин-флуктуационной теории рассматривается возможность возникновения андерсоновских локализованных состояний, обусловленных сильным рассеянием электронов на флуктуациях спиновой плотности в почти ферромагнитных полупроводниках. Полученные результаты проанализированы на примере FeSi.

1. Магнитные полупроводники на основе соединений переходных и редкоземельных металлов претерпевают электронные превращения изолятор–металл, которые в разных веществах протекают по-разному и характеризуются особенностями, природа которых остается невыясненной. Обнаруженная корреляция электрических и магнитных свойств, несомненно, вызывает интерес к этим соединениям как экспериментаторов, так и теоретиков. Тем не менее, несмотря на многообразие подходов, объясняющих наблюдаемые явления, до сих пор нет установившейся общепринятой теории.

Например, в ферромагнитных полупроводниках на основе манганита лантана со структурой перовскита переход из металлического в полупроводниковое состояние происходит с повышением температуры. При этом данный фазовый переход имеет место в ферромагнитной фазе, а его температура практически совпадает с температурой Кюри T_c . Кроме того, этот переход сопровождается скачкообразным изменением транспортных и оптических свойств. В работе [1] было показано, что явления, наблюдаемые в манганитах лантана, нельзя связывать с конкретными особенностями этих веществ (эффектами Яна-Теллера и двойного обмена), поскольку в сходных с ними по свойствам ферромагнитных полупроводниках, таких как EuO, EuS, CdCr₂Se₄ и т.д., эти особенности отсутствуют. Для описания свойств данных соединений в [1,2] была предложена модель разделения фаз, согласно которой с увеличением температуры соединение становится магнитно-неоднородным, так как ферромагнитное упорядочение вблизи примесных центров разрушается более медленно, чем в остальной части кристалла. Это ведет к возникновению и росту с температурой (однако лишь ниже точки Кюри) пространственных флуктуаций намагниченности, что обуславливает усиление рассеяния электронов проводимости и, следовательно, резкое немонокотное изменение проводимости и других электрических свойств. Далее в работе [3] было высказано предположение, что в однородных по своему составу ферромагнитных полупроводниках сильное рассеяние и даже андерсоновская локализация носителей тока могут быть вызваны растущими с температурой термодинами-

ческими магнитными флуктуациями. Подтверждением этого является установленная из температурной зависимости электросопротивления этих соединений взаимосвязь квадрата намагниченности и энергии активации носителей тока. На основе найденного соотношения в [3] удалось количественно описать основные закономерности перехода металл–изолятор в сильно легированных ферромагнитных полупроводниках на основе манганита лантана.

Кроме того, хотя предложенные модели электронных превращений [1–3] применимы лишь к ферромагнитным полупроводникам с локализованными магнитными моментами (ЛММ), аналогичные превращения наблюдаются также в почти ферромагнитных полупроводниках, например FeSi [4] и Fe_{1-x}Co_xSi, $x \ll 0.05$ (которые отличаются малым значением $M_0(0)$ — намагниченности на узел вблизи абсолютного нуля температуры). Особенностью этих веществ является увеличение с ростом температуры амплитуды ЛММ и последующее ее насыщение. При этом ниже температуры насыщения ЛММ [5] в них не доминируют поперечные флуктуации (флуктуации направления) спиновой плотности (как в ферромагнитных полупроводниках на основе соединений переходных и редкоземельных металлов), а наряду с ними имеют место продольные флуктуации, связанные с температурным изменением модуля ЛММ. Согласно [6], флуктуации ведут к перенормировке электронного спектра и его трансформации с температурой. В частности, в [7] было показано, что в почти ферромагнитном полупроводнике FeSi эта перенормировка ведет к уменьшению ширины энергетической щели, а затем к ее исчезновению. В [5–7] отмечалось, что в слабых зонных магнетиках имеют место большие, растущие с температурой как поперечные, так и продольные динамические флуктуации спиновой плотности d -электронов, не связанные с неоднородностями состава магнитных полупроводников. Однако вопрос о рассеянии электронов проводимости на этих флуктуациях и о возможности возникновения эффекта андерсоновской локализации не рассматривался.

2. Для исследования процессов рассеяния сильно коррелированных электронов на их спиновых и зарядовых флуктуациях воспользуемся моделью Хаббарда, гамильтониан которой имеет вид

$$H = H_0 + H_U, \quad (1)$$

где

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} - \quad (2)$$

гамильтониан невзаимодействующих d -электронов,

$$H_U = U \sum_{\mathbf{v}} N_{\mathbf{v}, \uparrow} N_{\mathbf{v}, \downarrow} - \quad (3)$$

гамильтониан внутриатомного хаббардовского отталкивания d -электронов, который может быть выражен через фурье-образы операторов зарядовой и спиновой плотности (см., например, [5])

$$H_U = U \sum_{\mathbf{q}} |S_{\mathbf{q}}^{(z)}|^2 - U \sum_{\mathbf{q}} |N_{\mathbf{q}}/2|^2, \quad (4)$$

$\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — одноэлектронные зонные энергии; $a_{\mathbf{k}, \sigma}^+$ ($a_{\mathbf{k}, \sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) d -электрона с квазиимпульсом \mathbf{k} и спином σ ; U — параметр внутриатомного кулоновского отталкивания d -электронов; $N_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma} N_{\mathbf{q}, \sigma}$, $N_{\mathbf{q}, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}$ — фурье-образ оператора плотности числа d -электронов на узле со спином σ ; \mathbf{q} — квазиимпульс; $S_{\mathbf{q}}^{(z)} = \sum_{\sigma} \sigma N_{\mathbf{q}, \sigma}$ — фурье-образ оператора проекции на ось квантования вектора спиновой плотности d -электронов на узле.

Расчет статистической суммы системы сильно коррелированных электронов — сложная задача многих тел; один из возможных методов ее решения основан на использовании преобразования Стратоновича–Хаббарда [5]

$$\exp(a^2) = \pi^{-1/2} \int dx \exp(-x^2 + ax),$$

где a — произвольный действительный оператор, а переменную интегрирования x можно считать случайной величиной, которая флуктуирует в соответствии с гауссовым законом. Таким образом, преобразование Стратоновича–Хаббарда позволяет свести многочастичную задачу о движении взаимодействующих электронов к одночастотной задаче о движении свободного электрона в поле случайного потенциала.

Учитывая известное определение статистической суммы

$$Z = \text{Sp} T_{\tau} \exp \left\{ - \int_0^{\beta} H(\tau) d\tau \right\} \quad (5)$$

(где $Y(\tau)$ — гамильтониан (1) в мацубаровском представлении взаимодействия, а $\beta = 1/T$) и применяя к (5)

преобразование Стратоновича–Хаббарда, имеем

$$Z = \iint \exp \left[- \sum_{\mathbf{v}} |V_{\mathbf{v}, \sigma}|^2 / UT \right] Z(V) (d\xi d\eta), \quad (6)$$

где $Z(V) = \text{Sp} T_{\tau} \{ \exp[-\beta H(V)] \}$ — статистическая сумма, отвечающая движению электронов в поле одной из конфигураций случайного потенциала, с эффективным гамильтонианом

$$H(V) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} - \sum_{\mathbf{v}, \sigma} V_{\mathbf{v}, \sigma} N_{\mathbf{v}, \sigma}, \quad (6a)$$

в котором $V_{\mathbf{v}, \sigma}$ — случайный потенциал взаимодействия электрона с внутренними обменным ξ и зарядовым η полями,

$$V_{\mathbf{v}, \sigma} = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{v}} (C_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^z \sigma + i C_{\mathbf{q}} \eta_{\mathbf{q}} / 2), \quad (7)$$

$\xi_{\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{q}}^{(1)} + i \xi_{\mathbf{q}}^{(2)} (1 - \delta_{\mathbf{q}, 0})$, $\eta_{\mathbf{q}} = \eta_{\mathbf{q}}^{(1)} + i \eta_{\mathbf{q}}^{(2)} (1 - \delta_{\mathbf{q}, 0})$, $\mathbf{q} = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$, ω_{2n} — мацубаровская бозевская частота,

$$(d\xi d\eta) = (d\xi_0^{(1)} d\eta_0^{(1)} / \pi) \prod_{\mathbf{q} \neq 0, j=1, 2} (d\xi_{\mathbf{q}}^{(j)} d\eta_{\mathbf{q}}^{(j)} / \pi^{1/2}),$$

$$C_{\mathbf{q}} = (UT)^{1/2}, \quad \mathbf{v} = (\mathbf{v}; \tau); \quad \sum_{\mathbf{v}} (\dots) = \sum_{\mathbf{v}} T \int_0^{\beta} (\dots) d\tau,$$

$$\sum_{\mathbf{q}} (\dots) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\omega_n} (\dots),$$

$a_{\mathbf{k}, \sigma}^+$ и $a_{\mathbf{k}, \sigma}$ — фурье-образы операторов рождения ($a_{\mathbf{v}, \sigma}^+$) и уничтожения ($a_{\mathbf{v}, \sigma}$) (в мацубаровском представлении взаимодействия) d -электронов со спином σ на узле \mathbf{v} , $k = (\mathbf{k}, \omega_{2n+1})$, ω_{2n+1} — мацубаровская фермиевская частота, $N_{\mathbf{v}, \sigma} = a_{\mathbf{v}, \sigma}^+ a_{\mathbf{v}, \sigma}$ — оператор числа частиц на узле \mathbf{v} в мацубаровском представлении взаимодействия.

Гамильтониан (6a) аналогичен гамильтониану модели хаотического сплава с „вертикальным“ беспорядком, рассмотренным Андерсоном в [8], но отличается от последнего тем, что глубина $V_{\mathbf{v}, \sigma}$ периодически расположенных потенциальных ям изменяется случайным образом не только в пространстве (как это имело место в [8,9]), но и во времени. Кроме того, случайный потенциал $V_{\mathbf{v}, \sigma}$ (в поле которого происходит движение электрона) зависит от спина. Однако эти отличия не сказываются на главном выводе задачи о движении электрона в поле потенциальных ям с вертикальным беспорядком — возможности андерсоновской локализации электронных состояний.

Как показано в [10], одноэлектронная функция Грина в рамках настоящего подхода и приближения однородных локальных полей [11] имеет вид

$$G_{k, \sigma} = \langle G_{k, \sigma}(V) \rangle, \quad (8)$$

где

$$\langle\langle \dots \rangle\rangle = \frac{1}{Z} \iint \exp \left[- \sum_v |V_{v,\sigma}|^2 / (UT) \right] \times Z(V)(\dots)(d\xi d\eta) -$$

процедура усреднения по всем возможным конфигурациям случайного потенциала;

$$G_{k,\sigma}(V) = \sum_{\alpha} (1 + \alpha \sigma V_{v,\sigma}^z / |V_{v,\sigma}|) \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \alpha \Sigma(V)} -$$

функция Грина, отвечающая движению электронов в случайном потенциале $V_{v,\sigma}$, $\Sigma(V) = \sqrt{|V_{v,\sigma}|^2 + \Gamma}$ — собственно энергетическая часть,

$$\Gamma(k, \omega) = G_{k-\sigma}^{-1} \sum_q (G_{k+q\sigma} - G_{k\sigma}) V_{qz}^2 + G_{k-\sigma}^{-1} \times \sum_q (G_{k+q,-\sigma} - G_{k,-\sigma}) (V_{qx}^2 + V_{qy}^2) -$$

величина, обусловленная рассеянием электронов на неоднородностях флуктуаций случайного потенциала $V_{v,\sigma}$ и описывающая величину затухания электронных состояний.

Для вычисления функциональных интегралов, определяющих статистическую сумму (6), и усреднения функции Грина воспользуемся методом перевала. Эта процедура и результаты оценки наиболее вероятного значения глубины потенциальных ям, а также величины ее флуктуаций подробно описаны в работе [6], где, однако, удалось описать лишь энергетический спектр электронных состояний со слабым затуханием ($\Gamma \ll |\mu \pm Um|$, где химический потенциал μ отсчитывается от ближайшего края зоны). При этом было показано, что спиновые и зарядовые флуктуации приводят к перенормировке плотности электронных состояний, расщепляя ее на две подзоны, отвечающие разным направлениям спина на флуктуирующую в пространстве и времени ось квантования, и изменяя емкость этих подзон

$$g_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} g_0 \left(\varepsilon + \alpha U \sqrt{\langle |\xi_v|^2 \rangle} \right) \times \left(1 + \alpha \sigma \frac{M_0 + H/U}{\sqrt{\langle |\xi_v|^2 \rangle}} \right), \quad (9)$$

где M_0 — однородная намагниченность на узел, H — внешнее магнитное поле в единицах удвоенного магнетона Бора, $\langle |\xi_v|^2 \rangle = 1/N_0 \sum_{q \neq 0} m_q^2 + M_0^2 = \langle m^2 \rangle + M_0^2 = m^2$ — среднеквадратичный магнитный момент на узел, $m_q = 1/\sqrt{2}(D^{-1} + X_q)$ — перевальное значение переменной r_q при $q \neq 0$, $g_0(\varepsilon)$ — плотность состояний невзаимодействующих электронов ($U = 0$),

$\sigma = \pm 1$ — спиновое квантовое число,

$$D^{-1} = 1 - \frac{\langle m_{\perp}^2 \rangle + M_0^2 n_{ef}}{m^2} - \frac{\langle m_z^2 \rangle}{m^2} U \tilde{g}(\mu, m) -$$

фактор обменного усиления,

$$\tilde{g}(\mu) = g_0(\mu + Um)g_0(\mu - Um)/g(\mu).$$

Для оценки величины затухания учтем, что гауссова полуширина флуктуаций на узле составляет

$$\sqrt{\langle (\xi_v - \langle \xi_v \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle m^2 \rangle} \quad (10a)$$

для спиновых флуктуаций и

$$\sqrt{\langle (\eta_v - \langle \eta_v \rangle)^2 \rangle} = \left(\sum_{\alpha=\pm 1} a g_0(\varepsilon + \alpha Um) / \sum_{\alpha=\pm 1} g_0(\varepsilon + \alpha Um) \right) \sqrt{\langle m^2 \rangle} \quad (10b)$$

для зарядовых флуктуаций. В результате этого амплитуда (среднеквадратичное значение) флуктуаций величины (модуля) случайного потенциала на узле оказывается равной

$$\langle\langle (\delta V_{v,\sigma})^2 \rangle\rangle = U^2 (\langle \xi_v^2 - \langle \xi_v \rangle^2 \rangle + \langle \eta_v^2 - \langle \eta_v \rangle^2 \rangle) = U^2 (\tilde{g}(\mu)/g(\mu)) \langle m^2 \rangle, \quad (11)$$

где $g(\mu) = g_0(\mu + Um) + g_0(\mu - Um)$.

Далее учтем, что в соответствии с результатами Андерсона локализованные состояния возникают в области энергий шириной E_C (где E_C — край подвижности или порог протекания, положение которого отсчитывается от ближайшего края зоны). Значение E_C до настоящего времени удается определить лишь в простейших моделях плотности электронных состояний и только с точностью до постоянного множителя $E_C = \langle\langle (\delta V_{v,\sigma})^2 \rangle\rangle / \Delta$, где Δ — эффективная ширина зоны. Тогда в соответствии с развиваемой аналогией в рамках спин-флуктуационной теории имеем

$$E_C = \tilde{g}(\mu) U^2 \langle m^2 \rangle / g(\mu) \Delta. \quad (12)$$

В частном случае, когда $Um \ll \mu$ (химический потенциал отсчитывается от края зоны), магнитный момент m слабо меняется с температурой и

$$\langle\langle (\delta V_{v,\sigma})^2 \rangle\rangle = U^2 (m^2 - M_0^2) = (Um)^2 \left(1 - \frac{M_0^2}{m^2} \right),$$

тогда

$$E_C = \Delta (Um/\Delta)^2 \left(1 - \frac{M_0^2}{m^2} \right).$$

Подобное выражение для порога протекания было получено в работе [3] для магнетиков с ЛММ.

Из (12), в частности, следует, что в случае больших спиновых флуктуаций (например, вблизи температуры магнитного разупорядочения или в сильно парамагнитных материалах) и слабой зависимости $g_0(\epsilon)$ (т.е. $g_0(\mu + Um) \approx g_0(\mu - Um)$) порог протекания сильно сдвинут относительно края зоны и может оказаться выше положения химического потенциала. Поэтому в случае сильных магнетиков (таких как железо или никель), d -зоны которых почти заполнены, а амплитуда спиновых флуктуаций столь велика, что Um оказывается больше или равной расстоянию от химического потенциала до края зоны (т.е. $g_0(\mu + Um) = 0$ и $\tilde{g}(\mu) = 0$), $E_C = 0$ и локализованные состояния в зоне отсутствуют.

Таким образом, флуктуации спиновой плотности приводят не только к расщеплению электронного спектра, но и к возникновению локализованных электронных состояний (сильно затухающих в пространстве) в области энергий, лежащих между E_C и ближайшим к нему краем зоны. При этом температурная зависимость края подвижности должна быть наиболее сильной в почти ферромагнитных полупроводниках, ширина энергетической щели в электронном спектре которых мала, а величина амплитуды спиновых флуктуаций быстро изменяется с температурой и оказывается сравнимой с шириной щели.

Температуру перехода металл-изолятор T_{MI} можно определить из условия $E_C(T_{MI}, H) = \mu(T_{MI}, H)$. Для этого разложим в ряд по $\langle m^2(T) \rangle - \langle m^2(T_C) \rangle$ уравнение магнитного состояния [7]

$$M_0(D^{-1} + \gamma M_0^2) = h, \quad (13)$$

$$h = \frac{H}{U}, \quad D^{-1} = 1 - \frac{\langle m_{\perp}^2 \rangle + M_0^2 \frac{n_{ef}}{m}}{m^2} - \frac{\langle m_z^2 \rangle}{m^2} U \tilde{g}(\mu, m),$$

$$\gamma = \frac{1}{m^2} \left(\frac{n_{ef}}{m} - U \tilde{g}(\mu, m) \right),$$

и, учитывая [15], что $\langle m^2 \rangle = m^2 - M_0^2 = (T/T_C)^{4/3} m_C^2$ (m_C^2 — магнитный момент вблизи температуры Кюри, который определяется из условия обращения в нуль знаменателя восприимчивости при $T \rightarrow T_C$), получим

$$T_{MI} = T_C \left(1 + \frac{H - \beta M_0^3}{\alpha M_0} \right)^{3/4}, \quad (14)$$

где $\alpha = \gamma(T_C, B) m_C^2$, $\beta = (5/2)\alpha$, $B = UM_0(H) + H$.

Выражение (14) отличается от установленного в [3] показателем степени, ответственным за полевую зависимость, что соответствует учету динамического характера спиновых флуктуаций. Однако в статическом пределе ($\omega \ll T$) это отличие исчезает. Кроме того, коэффициенты α и β зависят от внешнего магнитного поля, а не являются постоянными, как в случае, рассмотренном в [3]. Характер этой зависимости определяется зонной структурой и может быть различным.

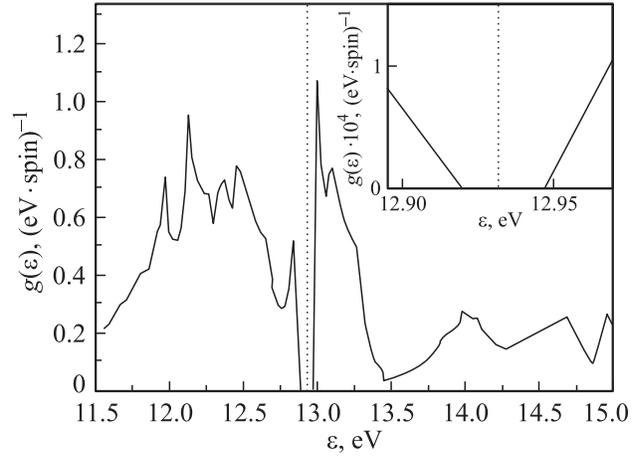


Рис. 1. Модельная кривая не перенормированной спиновыми флуктуациями плотности электронных состояний, построенная по данным [12]. Пунктирная вертикальная линия соответствует положению химического потенциала.

3. Для анализа возможности электронных фазовых переходов в почти ферромагнитных полупроводниках, обусловленных андерсоновской локализацией, обратимся к FeSi, зонная структура которого известна [12]. Согласно зонным расчетам [12], одноэлектронный спектр этого соединения состоит из двух зон, разделенных энергетической щелью $E_g \approx 0.02$ eV (рис. 1). При этом, хотя нижняя (валентная) зона полностью заполнена, а верхняя (проводимости) пуста, согласно экспериментальным данным [13], основное состояние FeSi является металлическим. Это противоречие в результатах зонных расчетов и эксперимента, как было показано ранее [6], может быть связано с тем, что в моносилициде железа при сверхнизких температурах имеют место относительно большие нулевые спиновые флуктуации. Выполненные в [6] оценки амплитуды нулевых спиновых флуктуаций показали, что в соответствии с (9) энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует (рис. 2. a), а химический потенциал располагается в области разрешенных энергий. Однако в [6] не были учтены зарядовые и продольные спиновые флуктуации, а, следовательно, факт возможного сильного спин-флуктуационного рассеяния игнорировался. Полученные при этом результаты описывали изменение электронных характеристик FeSi лишь при $T < 5$ K и находились в противоречии с экспериментальными данными в области температур от 5 до 100 K. Кроме того, для объяснения наблюдаемой в эксперименте кюри-вейсовской зависимости магнитной восприимчивости в [6] предполагалось, что плотность состояний вблизи верхнего и нижнего краев валентной зоны и зоны проводимости должна иметь большие значения первой производной. Это предположение противоречит результатам зонных расчетов из [14] (см. вставку на рис. 1). В рамках же развиваемого подхода наличие спиновых флуктуаций (в случае FeSi нулевых) должно

привести к продольным спиновым и зарядовым флуктуациям и, как следствие этого, к андерсоновской локализации электронных состояний с энергиями, лежащими в интервале шириной E_C ниже верхнего края валентной зоны и выше нижнего края зоны проводимости. Если принять эффективные ширины валентной зоны Δ_1 и зоны проводимости Δ_2 равными: $\Delta_1 = 0.33$ и $\Delta_2 = 0.33$ (оценивая их из условия равенства плотностей состояния на краях подвижности), то, согласно (11), при $T \rightarrow 0$ электронные состояния валентной зоны локализованы в интервале энергий $E_C^{(1)} > E^{(1)} - \varepsilon > 0$, а состояния зоны проводимости — в интервале $E_C^{(2)} < \varepsilon - E^{(2)} < 0$; $E^{(1)}$ и $E^{(2)}$ — положения верхнего и нижнего краев этих зон соответственно, $E_C^{(1)}$ и $E_C^{(2)}$ — значения порогов подвижности для валентной зоны и зоны проводимости, отсчитанные от $E^{(1)}$ и $E^{(2)}$ (рис. 2, *a*). При этом из-за спин-флуктуационного расщепления химический потенциал оказывается в области делокализованных электронных состояний (рис. 2, *a*), а основное состояние FeSi будет металлическим. Далее, поскольку с увеличением температуры амплитуда нулевых спиновых флуктуаций убывает быстрее, чем растет амплитуда тепловых спиновых флуктуаций [6], спин-флуктуационное расщепление электронного спектра уменьшается и при $5 < T < 50$ К химический потенциал оказывается в области локализованных состояний (рис. 2, *b, c*). При этом в данном интервале температур спин-флуктуационное расщепление электронного спектра велико настолько, что энергетическая щель оказывается „схлопнутой“ (рис. 2, *b, c*). В этом интервале температур реализуется прыжковая электропроводность, и соответственно электросопротивление должно изменяться по закону $\ln \rho \sim T^{1/4}$, что и наблюдается в эксперименте [13,15]. Также в этой области температур восприимчивость будет изменяться по закону Кюри–Вейса с постоянной Кюри $C = \mu_B^2 n_{\text{loc}}$, где n_{loc} — число занятых локализованных состояний, которое в соответствии с (9) и (11) может быть найдено как

$$n_{\text{loc}} = \int_{E^{(1)} - E_C^{(1)}}^{E^{(1)}} g(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon + \int_{E^{(2)}}^{E_C^{(2)} + E^{(2)}} g(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon.$$

Получающееся при этом значение постоянной Кюри $C = 8.81 \cdot 10^{-5} \text{ emu} \cdot \text{K/mol}$ совпадает с найденным из эксперимента [13]. Дальнейшее увеличение температуры ведет к исчезновению нулевых спиновых флуктуаций и возникновению энергетической щели в электронном спектре (рис. 2, *d*). При этом в силу того, что тепловые флуктуации спиновой плотности увеличиваются с ростом T медленнее, чем исчезают нулевые спиновые флуктуации, энергетическая щель возникает скачком. Ее ширина ($E_g(T)$) из-за спин-флуктуационного расщепления электронного спектра будет меньше значения $E_g^{(0)}$ (найденного путем одноэлектронных зонных расчетов)

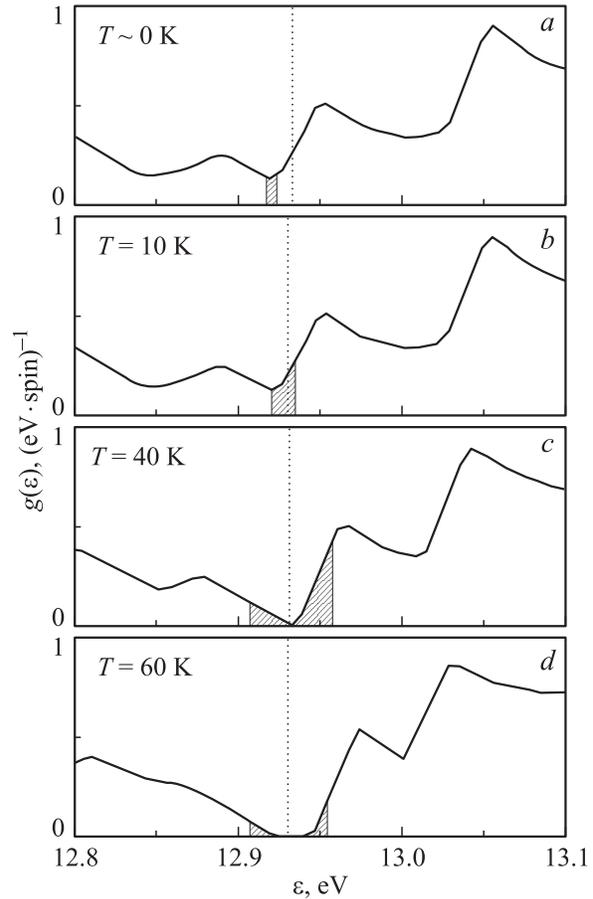


Рис. 2. Зависимость плотности электронных состояний FeSi от энергии при различных температурах. Пунктирная линия соответствует положению химического потенциала, заштрихованные области — локализованным состояниям.

на величину $2Um$,

$$E_g(T) = E_g^{(0)} - 2Um. \quad (15)$$

Вследствие этого при $T \sim 50$ К FeSi претерпевает электронный фазовый переход в полупроводниковое состояние, а характер температурной зависимости его электросопротивления скачком изменится с прыжкового на активационный. Значение энергии активации E_a будет отличаться от ширины запрещенной зоны, так как области энергий шириной $E_C^{(1)}$ ниже энергетической щели и шириной $E_C^{(2)}$ выше ее отвечают локализованным электронным состояниям. Таким образом, энергия активации носителей тока определяется соотношением

$$E_a = E_C^{(1)} + E_C^{(2)} + E_g^{(0)} - 2Um \quad (16)$$

и убывает с ростом температуры. Однако в силу того, что амплитуда тепловых спиновых флуктуаций линейно возрастает с температурой, уменьшение E_a с ростом T не может быть обнаружено в экспериментах по электросопротивлению ($\rho(T) \sim \exp(-E_a/T)$), а $m(T) \sim T$. Значение энергии активации, найденное

из температурной зависимости электросопротивления, будет определяться соотношением $\tilde{E}_a = E_C^{(1)} + E_C^{(2)} + E_g^{(0)}$ и, согласно оценкам значений порогов протекания, равно $\tilde{E}_a = 0.088$ eV. Этим и объясняется несовпадение значений энергии активации, найденных путем зонных расчетов и из эксперимента. Дальнейшее возрастание амплитуды тепловых спиновых флуктуаций (с ростом T) приведет вновь к схлопыванию энергетической щели, смещению порога протекания в валентной зоне (зоне проводимости) вверх (вниз) относительно химического протенциала и вследствие этого к обращению в нуль энергии активации (см. (13)) при $T_{MI} \sim 81$ K. Таким образом, при $T_{MI} \sim 81$ K FeSi вновь претерпевает электронный фазовый переход, но теперь из полупроводникового в металлическое состояние. Последующие особенности и механизмы формирования его электрических свойств рассматривались в [10]. При этом было установлено, что роль спин-флуктуационной перенормировки спектра продолжает оставаться решающей вплоть до температуры $T \sim 300$ K, выше которой формирование металлического состояния (в частности, увеличение числа носителей тока) завершается. Выше 300 K определяющими в формировании температурного изменения электросопротивления становятся механизмы рассеяния, и $\rho(T)$ FeSi возрастает с увеличением T . Эта область температур была исследована в [10] и не является предметом обсуждения данной работы.

Таким образом, сформулированное обобщение спин-флуктуационной теории позволяет описать последовательность электронных превращений, наблюдаемых в почти ферромагнитных полупроводниках. На основе анализа экспериментальных данных о FeSi можно сделать вывод о возможности сильного спин-флуктуационного рассеяния, обуславливающего возникновение области локализованных электронных состояний. Учет этого обстоятельства важен для дальнейшего развития представлений об электронных фазовых переходах в почти ферромагнитных полупроводниках и полуметаллических слабых зонных магнетиках. Можно также ожидать, что рассмотренный механизм электронных превращений имеет место и в кондо-системах (например, SmB_6), поведение которых аналогично FeSi [16].

Список литературы

- [1] Э.Л. Нагаев. УФН **168**, 8, 917 (1998).
- [2] Э.Л. Нагаев. УФН **166**, 8, 833 (1996).
- [3] N.G. Bebenin, V.V. Ustinov. J. Phys.: Cond. Matter. **10**, 6301 (1998).
- [4] P. Rhodes, E.P. Wohlfarth. Proc. Roy. Soc. A **273**, 1353, 247 (1963).
- [5] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [6] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянкин. ФТТ **40**, 8, 1437 (1998).
- [7] А.Г. Волков, А.А. Повзнер, В.В. Крюк, П.В. Баянкин, Ю.Б. Кудасов. ЖЭТФ **116**, 5 (11), 1770 (1999).
- [8] P.W. Anderson. Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [9] Н.Ф. Мотт. Переходы металл–изолятор. Наука, М. (1979). С. 342.
- [10] А.Г. Волков, А.А. Повзнер, В.В. Крюк, П.В. Баянкин, ФТТ **41**, 10, 1792 (1999).
- [11] J.A. Hertz, M.A. Klenin. Phys. Rev. B **10**, 3, 1084 (1974).
- [12] Л.И. Винокурова, А.В. Власов, Э.Т. Кулатов. ИОФАН **32**, 4, 463 (1991).
- [13] M.B. Hunt, M.A. Chernikov, E. Felder. Phys. Rev. B **50**, 20, 14933 (1994).
- [14] H. Ohta, S. Kimura, E. Kulatov, S. Halilov, T. Nanba, M. Motokawa, M. Sato, K. Nagasaka. J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 4206 (1994).
- [15] Sh. Takagi, H. Yasuoka, Sh. Ogawa. J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 8, 2539 (1981).
- [16] Н.Е. Случанко, В.В. Глушков, С.В. Демишев, М.В. Кондрин. Письма в ЖЭТФ **68**, 10, 774 (1998).