Точный спектр фермиевских квазичастиц в ферромагнитной решетке Кондо–Андерсона

© С.Г. Овчинников, Л.Е. Якимов

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

(Поступила в Редакцию 15 мая 2002 г.
В окончательной редакции 30 октября 2002 г.)

Для описания электронной структуры манганитов с явным учетом сильных электронных корреляций в рамках периодической модели Андерсона с учетом $s-d$-обменного взаимодействия исследован спектр фермиевских возбуждений невырожденного ферромагнитного полупроводника в случае $T = 0$ и одного электрона. Получены точные дисперсионные уравнения и функции Грина для разных проекций спина. Построены кривые плотности состояний для различных расположений d-уровня относительно дна зоны.

Работа выполнена при поддержке ФЦП Интеграция (грант № Б 0017) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-02-97705).

Для исследования Кондо-систем, или систем с переменной валентностью, каковыми являются манганиты $La_{1-x}Ca_xMnO_3$, $La_{1-x}Sr_xMnO_3$, в данной работе используется периодическая модель Андерсона, дополненная $s-d$-обменом.

Интерес к манганитам вызван наблюдаемым в них эффектом колоссального магнитосопротивления, максимум которого достигается при $x = 0.33$. В этом случае систему можно рассматривать как ферромагнитную [1] решетку локализованных спинов ионов Mn^{4+} с электронной конфигурацией $3d^3$ (спин $S = 3/2$), в которую добавлены дополнительные электроны с соответствующей концентрацией. Эти электроны могут оставаться делокализованными и взаимодействовать со спинами решетки посредством обменного взаимодействия гейзенберговского типа. В результате возможного процесса гибридизации они могут локализоваться, образуя в узле решетки ион Mn^{3+} конфигурации $3d^4$. Эти два типа состояний и два взаимодействия отражены в гамильтониане модели, которая представляет собой периодическую модель Андерсона с $s-d$-обменными взаимодействиями.

В данной работе рассматривается специфический случай, когда система содержит один электрон-носитель заряда при $T = 0$. Оказалось (и это очень важно), что при таких условиях задача имеет точное решение. Формально этот случай соответствует нижнему пределу концентрации, при котором $x \to 0$ и основное состояние локализованной спиновой подсистемы манганитов является антиферромагнитным. Не претендуя на описание этого антиферромагнитного случая, мы хотим указать на важность данного точного решения для манганитов в той области параметров, где основное состояние локализованной спиновой подсистемы является ферромагнитным ($x = 0.15-0.4$). Если взять какое-либо приближенное решение для этой области и рассматривать концентрацию носителей как параметр, то устремление этого параметра к нулю (при „заморозке“ локализованной спиновой подсистемы в ферромагнитном основном состоянии) должно приводить к данному точному решению. Таким образом, его наличие может быть весьма полезным для построения или проверки приближенных решений в области параметров, соответствующей ферромагнетизму в локализованной спиновой подсистеме.

Этот случай является также обобщением задачи о магнитном поляроне [2–4], которое заключается в дополнительном учете гибридизационного взаимодействия. Если записать волновую функцию конфигурации d^ns^m как $|n, S, M; m, \sigma\rangle$, где S и M — спин и его проекция для d^n-иона, $m = 0$, или 1 — число s-электронов ячейки, σ — проекция спина s-электрона, то к процессам, идущим за счет $s-d$-обмена,

$$|n, S, S; 1, \downarrow\rangle \leftrightarrow |n, S, S-1; 1, \uparrow\rangle \tag{1}$$

добавятся процессы, вызванные наличием гибридизации,

$$|n, S, S; 1, \downarrow\rangle \leftrightarrow |n+1, S \pm 1/2, S-1/2; 0\rangle \leftrightarrow \leftrightarrow |n, S, S-1; 1, \uparrow\rangle, \tag{2}$$

$$|n, S, S; 1, \uparrow\rangle \leftrightarrow |n+1, S+1/2, S+1/2; 0\rangle, \tag{3}$$

которые учтены в данной работе. Знаки плюс и минус в формуле (2) соответствуют двум возможным ситуациям при формировании суммарного спина на узле. В общем случае при локализации электрона новый спин узла может принять значение $S' = S + 1/2$ или $S' = S - 1/2$. Соответствующие случаи называются высокоспиновым и низкоспиновым. Решение для низкоспинового случая было получено в работе [5]. В манганитах же при локализации зонного электрона реализуется высокоспиновый случай: конфигурация $3d^4$ обладает спином $S' = 2$, что и используется далее. В высокоспиновом случае снимаются правила запрета, из-за наличия которых в низкоспиновом были запрещены возбуждения квазичастиц с определенной проекцией спина. В результате одночастичная плотность состояний в высокоспиновом случае радикально отличается от характерной для низкоспинового случая.

В разделе 1 настоящей работы записан модельный гамильтониан, описаны необходимые преобразования и приведены точные результаты — дисперсионные уравнения и функции Грина. В разделе 2 обсуждаются рассчитанные на основании точного решения плотности состояний.

1. Точные одночастичные функции Грина

Исходя из учитываемых взаимодействий, запишем гамильтониан модели

$$H = H_{0a} + H_{0d} - J\sum_f S_f\sigma_f + V\sum_{f\sigma}\left(d^\dagger_{f\sigma}a_{f\sigma} + \text{H.c.}\right). \quad (4)$$

Здесь $H_{0a} = \sum_{k\sigma}\varepsilon_k a^\dagger_{k\sigma}a_{k\sigma}$ описывает делокализованные состояния. Гамильтониан H_{0d}, описывающий локализованные состояния, в общем виде можно записать как

$$H_{0d} = \sum_{f,\lambda,\sigma}\varepsilon_\lambda d^\dagger_{f\lambda\sigma}d_{f\lambda\sigma} + \sum_{\substack{\Gamma_1,\Gamma_2,\Gamma_3,\Gamma_4\\ \sigma,\sigma'}}\langle\Gamma_1,\Gamma_2|\nu|\Gamma_3,\Gamma_4\rangle d^\dagger_{\Gamma_1\sigma}d^\dagger_{\Gamma_2\sigma'}d^\dagger_{\Gamma_4\sigma'}d^\dagger_{\Gamma_3\sigma}. \quad (5)$$

Во втором слагаемом совокупность номера узла f и орбиталя λ обозначена как Г; ν обозначает кулоновское взаимодействие.

Перейдем к пространству собственных состояний гамильтониана H_{0d}. Каждое из них определяется тремя квантовыми числами — числом электронов, величиной суммарного спина и его проекцией ($|n, S, M\rangle$) — и имеет энергию $E_{n,S,M}$. В этом представлении H_{0d} запишется в виде

$$H_{0d} = \sum_{f,n,S,M}E_{n,S,M}X_f^{n,S,M;\,n,S,M} \quad (6)$$

с использованием операторов Хаббарда

$$X_f^{n_1,S_1,M_1;\,n_2,S_2,M_2} = |n_1, S_1, M\rangle\,\langle n_2, S_2, M_2|. \quad (7)$$

Можно заметить, что в рамках данной задачи для магнанитов полуцелым проекциям суммарного спина однозначно будут соответствовать значения оставшихся двух квантовых чисел $n = 3$ и $S = 3/2$, а целым — $n = 4$ и $S' = 2$, поэтому далее в операторах Хаббарда ограничимся лишь указанием квантового числа проекции полного спина, а оставшиеся квантовые числа будем подразумевать:

$$X_f^{M_1,M_2} = |n_1, S_1, M\rangle\,\langle n_2, S_2, M_2|. \quad (8)$$

Поскольку в задаче фигурируют только две различные по энергии конфигурации локализованных электронов на узле, можно положить энергию состояния $|n = 3, S = 3/2, M\rangle$ равной нулю, а энергию второго состояния $|n = 4, S' = 2, M'\rangle$ обозначить как Ω.

В результате H_{0d} можно записать в виде [6]

$$H_{0d} = \Omega\sum_f\sum_{M'=-S'}^{S'}X_f^{M',M'}. \quad (9)$$

Для дальнейших вычислений все операторы, действующие на локализованные состояния, выразим через операторы Хаббарда. Компоненты операторов S_f при этом имеют вид

$$S_f^Z = \sum_{M=-S}^{S}MX_f^{M,M} + \sum_{M'=-S'}^{S'}M'X_f^{M',M'}, \quad (10)$$

$$S_f^+ = (S_f^-)^\dagger = \sum_{M=-S}^{S}\gamma_S(M)X_f^{M+1,M} + \sum_{M'=-S'}^{S'}\gamma_{S'}(M')X_f^{M'+1,M'}, \quad (11)$$

$$\gamma_S(M) = \sqrt{(S-M)(S+M+1)}. \quad (12)$$

Операторы рождения и уничтожения электрона на локализованном d-уровне запишутся следующим образом:

$$d^\dagger_{f\uparrow} = (d_{f\uparrow})^\dagger = \sum_M\sqrt{\frac{S+1+M}{2S+1}}X_f^{M+\frac{1}{2},M}, \quad (13)$$

$$d^\dagger_{f\downarrow} = (d_{f\downarrow})^\dagger = \sum_M\sqrt{\frac{S+1-M}{2S+1}}X_f^{M-\frac{1}{2},M}. \quad (14)$$

Исходя из необходимости получить плотности состояний для квазичастиц, мы использовали двухвременны́е запаздывающие функции Грина, построенные на операторах рождения и уничтожения соответствующих квазичастиц с использованием ферромагнитного основного состояния локализованной спиновой подсистемы (таким образом было учтено ферромагнитное упорядочение в локализованной спиновой подсистеме, возникающее из-за спинового обмена между ионами марганца):

$$\langle\langle a_{p\sigma}(t)|a^\dagger_{p\sigma}(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t') \times \left\langle FM\left|[a_{p\sigma}(t), a^\dagger_{p\sigma}(t')]_+\right|FM\right\rangle. \quad (15)$$

Здесь

$$\theta(t) = \begin{cases}1, t > 0,\\ 0, t < 0.\end{cases} \quad (16)$$

Матричный элемент взят по состоянию $|FM\rangle$ — ферромагнитному основному состоянию системы в отсутствие носителей. В этом состоянии зона пуста: $a_{f\sigma}|FM\rangle = 0$, а на каждом узле решетки имеется спин величиной S с максимальной проекцией $S_f^Z|FM\rangle = S|FM\rangle$.

Уравнения движения приводят к системе вида

$$\begin{bmatrix} E - \varepsilon_p + \frac{JS}{2} & -V \\ -V & E - \Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle\langle a_{p\uparrow} | a^\dagger_{p\uparrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle X_p^{S,S+\frac{1}{2}} | a^\dagger_{p\uparrow} \rangle\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

из которой получаем дисперсионное уравнение и точное выражение для функции Грина (спин вверх)

$$D_1(E) = E - \varepsilon_p - \frac{JS}{2} - \frac{V^2}{E - \Omega} = 0, \quad (18)$$

$$\langle\langle a_{p\uparrow} | a^\dagger_{p\uparrow} \rangle\rangle = D_1(E)^{-1}. \quad (19)$$

Из вида системы (17) можно сделать вывод, что локализованной квазичастице со спином вверх соответствует гриновская функция вида $\langle\langle X_p^{S,S+\frac{1}{2}} | X_p^{S+\frac{1}{2},S} \rangle\rangle$. Аналогичные расчеты для нее дают

$$D_2(E) = E - \Omega - \frac{V^2}{E - \varepsilon_p + \frac{JS}{2}} = 0, \quad (20)$$

$$\left\langle\left\langle X_p^{S,S+\frac{1}{2}} \middle| X_p^{S+\frac{1}{2},S} \right\rangle\right\rangle = D_2(E)^{-1}. \quad (21)$$

Для зонной и локализованной квазичастиц со спином вниз вследствие большего разнообразия многочастичных процессов (см. (1)–(3)) система получается более сложной, но (при $T = 0$ и одном носителе) тоже замкнутой и допускающей точное решение. При этом существенно используется ферромагнитный порядок основного состояния. Точные дисперсионное уравнение и выражение для функции Грина (зонная квазичастица со спином вниз) имеют вид

$$D_3(E) = E - \varepsilon_p - \frac{JS}{2} + \frac{2V_1^2 JS - \frac{1}{2} J^2 S (E - \Omega) - V_1^2 \big(\Delta^{-1}(E) - J/2\big)}{(E - \Omega)\big(\Delta^{-1}(E) - J/2\big) - 2V_1^2 S} = 0 \quad (22)$$

$$\langle\langle a_{p\downarrow} | a^\dagger_{p\downarrow} \rangle\rangle = D_3(E)^{-1}. \quad (23)$$

В случае локализованной квазичастицы со спином вниз

$$D_4(E) = E - \Omega + \frac{2V_1^2 JS - 2V_1^2 S\left(E - \varepsilon_p - \frac{JS}{2}\right) - V_1^2\big(\Delta^{-1}(E) - J/2\big)}{\left(E - \varepsilon_p - \frac{JS}{2}\right)\big(\Delta^{-1}(E) - J/2\big) - \frac{J^2 S}{2}} = 0, \quad (24)$$

$$\left\langle\left\langle X_p^{S,S-\frac{1}{2}} \middle| X_p^{S-\frac{1}{2},S} \right\rangle\right\rangle = D_4(E)^{-1}. \quad (25)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\Delta(E) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{E - \varepsilon_k + \frac{JS}{2}}, \quad V_1 = \frac{V}{\sqrt{2S + 1}}. \quad (26)$$

Отметим, что если в выражениях (19) и (23) исключить гибридизационные эффекты, положив $V = 0$, то они в точности совпадут с результатами для магнитного полярона [2–4], полученными для случая ферромагнитного насыщенного полупроводника, в частности для EuO при $T = 0$ [7].

2. Одночастичные плотности состояний

Для иллюстрации полученного точного решения были вычислены плотности состояний для каждой из квазичастиц. При получении расчетной формулы использовалась замена переменных $\varepsilon_p = E'$:

$$n(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_p \operatorname{Im} G(p, E + i0)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int dE' n_0(E') \operatorname{Im} G(E', E + i0). \quad (27)$$

Чтобы вычислить плотность состояний для локализованных электронов, нужно установить связь между гриновскими функциями $\langle\langle d_{p\sigma} | d^\dagger_{p\sigma} \rangle\rangle$ и найденными $\langle\langle X_p^{S,S\pm\frac{1}{2}} | X_p^{S\pm\frac{1}{2},S} \rangle\rangle$. Для этого используем определение функции Грина, связь между операторами (13) и (14) и то свойство основного состояния, что в нем проекция любого локализованного спина равна S,

$$\langle\langle d_{p\downarrow} | d^\dagger_{p\downarrow} \rangle\rangle = \sum_{M,M'} \sqrt{\frac{S + 1 - M}{2S + 1}} \sqrt{\frac{S + 1 - M'}{2S + 1}} \times \left\langle\left\langle X_p^{M,M-\frac{1}{2}} \middle| X_p^{M'-\frac{1}{2},M'} \right\rangle\right\rangle = \frac{1}{2S + 1} \left\langle\left\langle X_p^{S,S-\frac{1}{2}} \middle| X_p^{S-\frac{1}{2},S} \right\rangle\right\rangle. \quad (28)$$

Для квазичастицы со спином вверх соответствующие гриновские функции равны

$$\langle\langle d_{p\uparrow} | d^\dagger_{p\uparrow} \rangle\rangle = \left\langle\left\langle X_p^{S,S+\frac{1}{2}} \middle| X_p^{S+\frac{1}{2},S} \right\rangle\right\rangle. \quad (29)$$

Константы для расчетов взяты исходя из значений параметров, характерных для манганитов: $J = 0.5$ eV, $V = 0.1$ eV, $W = 4$ eV, $S = 3/2$.

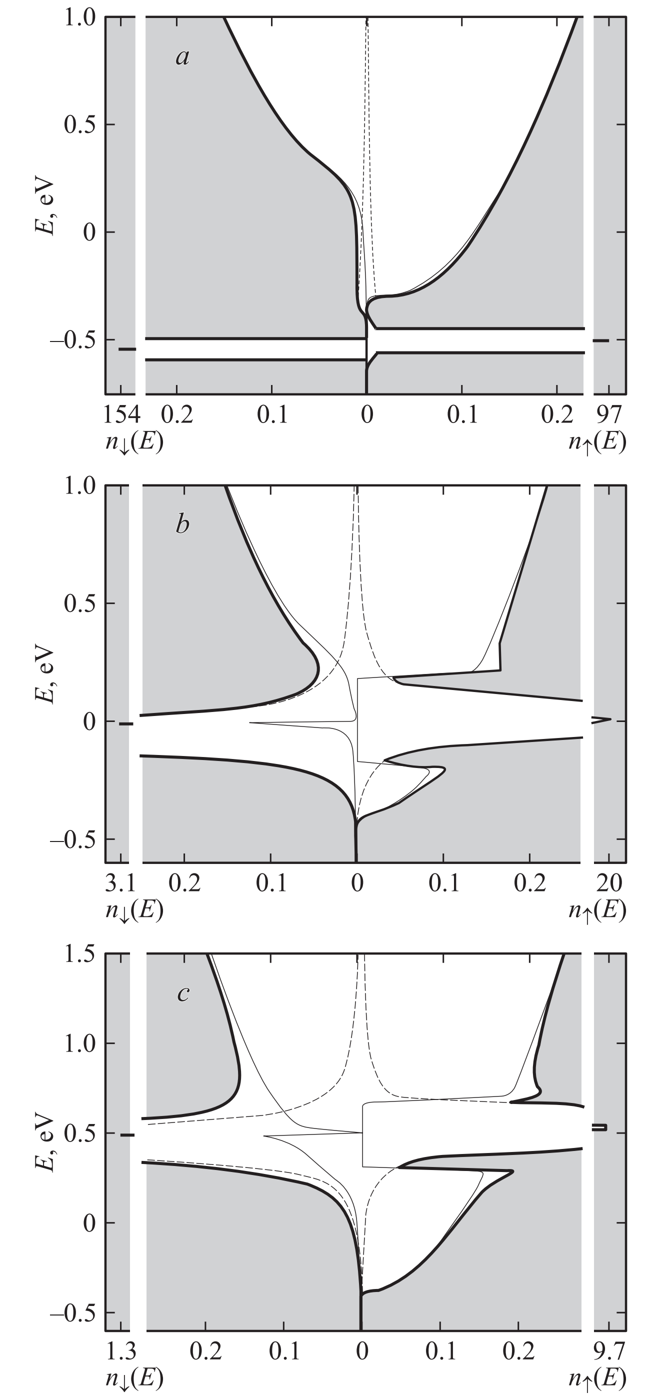
Следует иметь в виду, что параметры, получаемые из подгонки под эксперимент, являются модельно-зависящими. Так, в нашем случае W — это ширина затравочной зоны. Результирующая зона квазичастиц, как видно далее, содержит две зоны, нижняя из которых узкая и для нее выполняется узкозонный предел [8], а верхняя широкая с шириной, большей обменного параметра J.

Использовавшийся для расчетов квадратичный закон дисперсии и соответствующая ему плотность состояний записываются в виде

$$\varepsilon_x = \begin{cases} W x^2, & x \in [-1, 1], \\ 0, & x \notin [-1, 1], \end{cases} \quad (30)$$

где $x = p/p_B$,

$$n_0(E) = \begin{cases} \frac{3}{2W} \sqrt{\frac{E}{W}}, & E \in [0, W] \\ 0, & E \notin [0, W]. \end{cases} \quad (31)$$



Плотности состояний при $\Omega = -0.5$ (a), 0 (b) и 0.5 eV (c). По горизонтали отложены: влево — плотность состояний со спином вниз, вправо — со спином вверх. Тонкая сплошная линия — зонная квазичастица, штриховая — локализованная; жирная сплошная линия — суммарная плотность $J = 0.5$ eV, $V = 0.1$ eV, $W = 4$ eV, $S = 3/2$.

Энергия локализации Ω выбиралась так, чтобы она попадала в один из трех энергетических участков, на которые ось энергии делится точками $\pm JS/2 = \pm 0.375$ eV. Для каждого из значений Ω были вычислены плотности состояний для зонной и локализованной квазичастиц для обеих проекций спина. Результаты представлены на рисунке.

На рисунке, a показаны плотности состояний для значения константы $\Omega = -0.5$ eV. При этом локализованный уровень лежит ниже зоны. Зонные плотности состояний для обеих проекций спина здесь имеют тот же вид, что и для $s-d$-модели. Проявляется известный для $s-d$-модели эффект — неквазичастичное поведение электронов со спином вниз в области $(-JS/2, JS/2)$. Плотность состояний локализованной квазичастицы для обеих проекций спина имеет узкий пик в области -0.5 eV. Для обеих проекций спина имеется ненулевой вклад вблизи дна зоны проводимости, обусловленный гибридизацией.

Рассматриваемый случай (локализованный уровень лежит ниже зоны) напоминает ситуацию, возникающую в $s-d$-модели с отрицательным параметром $s-d$-обмена, когда появлятеся глубокий дискретный уровень, соответствующий зоне спин-поляронных состояний [3]. Однако в данном случае локализованный уровень, расположенный под зоной, имеет лишь незначительную примесь поляронных и зонных состояний, появляющуюся за счет гибридизации. В основном же он состоит из локализованных состояний d-электрона.

На рисунке, b представлены плотности состояний для $\Omega = 0$ eV. Здесь картина более сложная, так как локализованный уровень пересекает зону в области стонеровской щели $(-JS/2, JS/2)$. Гибридизационные эффекты выражаются в размытии пиков плотностей локализованных состояний.

Для спина вверх в области d-уровня наблюдаются гибридизационная щель для зонной квазичастицы и пик для локализованной. Следует заметить, что этого не происходит при рассмотрении низкоспинового случая [5], поскольку для него гибридизация из этого начального состояния (зонный спин с проекцией вверх) невозможна. Интересно отметить, что в суммарной плотности состояний проявляются оба эффекта: доминирует пик от локализованных состояний, но видны также и провалы (псевдощель) за счет гибридизационной щели.

Наложение локализованного уровня на область неквазичастичного поведения (зонная квазичастица со спином вниз) приводит к появлению в ней узкого пика, над которым наблюдается узкая псевдощель. Тем не менее в суммарной плотности состояний доминируют локализованные d-состояния.

Качественно похожая картина возникает при $\Omega = +0.5$ eV (рисунок c). Отличие состоит в том, что в данном случае локализованный уровень лежит выше стонеровской щели. При этом зонная плотность состояний (спин вниз) видоизменяется так же, как и при $\Omega = 0$ eV. Видна узкая щель, а под ней менее выраженный пик.

Таким образом, полученные в настоящей работе точные дисперсионные уравнения и функции Грина описывают при $T = 0$ один носитель, движущийся на фоне ферромагнитного основного состояния решетки.

В режиме сильных корреляций учтены два типа взаимодействий: $s-d$-обмен и гибридизация. Данный случай соответствует нижнему пределу концентрации x. Хотя при малых x манганиты уже не являются ферромагнетиками, все решения для области ферромагнетизма $(x = 0.15-0.4)$ в пределе малых концентраций и температур должны воспроизводить результаты, полученные в данной работе.

Список литературы

[1] Э.Л. Нагаев. УФН **166**, *8*, 833 (1996).
[2] Э.Л. Нагаев. ЖЭТФ **56**, *3*, 1013 (1969).
[3] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. ЖЭТФ **59**, *2*, 553 (1970).
[4] B.S. Shastry, D.C. Mattis. Phys. Rev. B **24**, *9*, 5340 (1981).
[5] М.Ш. Ерухимов, С.Г. Овчинников, С.И. Яхимович. ФТТ **31**, *5*, 52 (1989).
[6] В.В. Вальков, С.Г. Овчинников. Квазичастицы в сильно коррелированных системах. Изд-во РАН, Новосибирск (2001). С. 31.
[7] W. Nolting, G.G. Reddy, A. Ramakanth, D. Meyer. Phys. Rev. B **64**, *15*, 15 5109 (2001).
[8] E.L. Nagaev. Phys. Rep. **346**, *6*, 387 (2001).