

УДК 541.1

© 1990

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В. В. Иванко, Т. Д. Дидора

Методом матрицы плотности исследовано влияние электрического поля на магнетосопротивление материалов с узкими орбитально вырожденными зонами проводимости с учетом эффектов межэлектронных корреляций, магнитного упорядочения и рассеяния на оптических фононах. Показано, что увеличение электрического поля приводит к росту магнетосопротивления.

Актуальной задачей исследования гальваномангнитных свойств соединений переходных металлов (окислы, халькогенидные шпинели и др.), в которых возможны как электроперенос по широким зонам проводимости, так и трансляция d -электронов по узкой орбитально вырожденной энергетической зоне, является объяснение природы отрицательного магнетосопротивления (МС) [1].

Методом матрицы плотности [2] проведем исследование влияния внешнего электрического поля на электропроводность по узкой орбитально вырожденной зоне проводимости с учетом эффектов межэлектронных корреляций, магнитного упорядочения и рассеяния на оптических фононах, причем электроперенос предполагаем только по узким зонам проводимости, что оправдано в случае низких температур [1].

При наличии вырождения по орбитальному квантовому числу на одном узле кристаллической решетки могут размещаться два электрона с параллельными спинами. Состояния с одинаково направленными спинами в соответствии с правилом Хунда энергетически более выгодны. Это приводит к особенностям кинетических характеристик соединений переходных металлов в магнитном поле [1].

Подсистему d -электронов в соединениях переходных d -металлов можно описать на основе гамильтониана вырожденной модели Хаббарда с дополнительным учетом обменного взаимодействия электронов, локализованных на соседних узлах, и взаимодействия электронов с фононной подсистемой во внешнем магнитном поле [3]

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}, & H_0 &= \sum'_{i,j,\alpha,\beta,\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} a_{i\alpha\sigma}^{\dagger} a_{j\beta\sigma}, \\
 H_{el} &= \frac{U}{2} \sum_{i\alpha\beta\sigma} n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta-\sigma} + \frac{U-I}{2} \sum_{i, \alpha \neq \beta, \sigma} n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta\sigma} - \frac{J}{2} \sum'_{i,j,\alpha,\beta} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z + \sum_{i\alpha\sigma} \hbar(\sigma) n_{i\alpha\sigma}, \\
 H_{ph} &= \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + 1/2), \\
 H_{el-ph} &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \Lambda(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\alpha\sigma} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \tag{1}
 \end{aligned}$$

где $t_{ij}^{\alpha\beta}$ — интеграл переноса электронов; i, j — номера узлов; α, β — орбитали; σ — спиновое квантовое число; $a_{i\alpha\sigma}^{\dagger}, a_{i\alpha\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов; $n_{i\alpha\sigma} = a_{i\alpha\sigma}^{\dagger} a_{i\alpha\sigma}$; U, I — энергия кулонов-

ского отталкивания и обменного взаимодействия электронов, локализованных на одном узле; J — обменное взаимодействие на соседних узлах; $S_{i\alpha}^z = (n_{i\alpha+} - n_{i\alpha-})$; $\hbar(\sigma) = g\mu_B \text{sign}\sigma = \hbar \text{sign}\sigma$; g — фактор Ланде; μ_B — магнетон Бора; \mathcal{H} — внешнее магнитное поле; $\hbar\Omega(\mathbf{q})$ — энергия оптических фононов; $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ — операторы рождения и уничтожения фононов с квазиимпульсом \mathbf{q} ; $\Lambda(\mathbf{q})$ — функция электрон-фононной связи; Σ' означает суммирование по ближайшим соседям.

Воспользуемся методикой расчетов, развитой в работе [2]. Исходным является уравнение движения для матрицы плотности ρ_T

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H_T, \rho_T] = [H_T, \rho'] + [V, \rho], \quad (2)$$

где $H_T = H + V$; $\rho_T = \rho + \rho'$; H (H_T) и ρ (ρ_T) — гамильтониан и матрица плотности при $E=0$ ($E \neq 0$); E — напряженность внешнего электрического поля; ρ' характеризует взаимодействие электронов с внешним полем $V = ie \sum_{i\alpha\sigma} E n_{i\alpha\sigma}$.

Плотность электрического тока

$$j(t) = \text{Sp}(\rho_T j); \quad j = (ie/\hbar) \left[H, \sum_{i\alpha\sigma} R_{i\alpha} n_{i\alpha\sigma} \right] \quad (3)$$

— оператор тока; $R_{i\alpha}$ — радиус-вектор.

В дальнейшем используем методику расчета, развитую для поляронов малого радиуса [4] и примененную для системы сильно коррелирующих электронов [5]. В силу малости ширины d -зоны электронов и ее поляронного сужения j определим в линейном по t^2 приближении. Обоснованность этого приближения обусловлена соотношением $U \gg |kT|$, $kT \gg |t_{ij}|$, что соответствует оценкам параметров для реальных d -зон.

Расчет шпура в (2) осуществим путем приведения гамильтониана (1) к сумме одноузельных гамильтонианов, т. е. представим его в диагональном виде с помощью канонических преобразований

$$\begin{aligned} Q_i &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_i) (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+), \\ P_i &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_i) (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+), \end{aligned} \quad (4)$$

где Q_i , P_i — операторы координаты и импульса, описывающие колебательные движения i -узла. С помощью канонического преобразования

$$S = -\Lambda / (\hbar\Omega) \sum_{i\alpha\sigma} P_i n_{i\alpha\sigma}$$

исключим член, описывающий электрон-фононное взаимодействие. Тогда (1) переписется в виде

$$\begin{aligned} H'_0 &= \frac{U - \Gamma}{2} \sum_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta-\sigma} + \frac{U - T - \Gamma}{2} \sum_{i, \alpha \neq \beta, \sigma} n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta\sigma} + \sum_{i\alpha\sigma} h' \text{sign}\sigma n_{i\alpha\sigma} + \\ &+ \frac{\hbar\Omega}{2} \sum_i (P_i^2 + Q_i^2), \end{aligned} \quad (5)$$

где $h' = \hbar + mJz$; m — намагниченность одного узла системы; z — координационное число. При записи (5) пренебрегалось дисперсией фононов $\hbar\Omega(\mathbf{q}) \approx \hbar\Omega$ и дисперсией электрон-фононного взаимодействия $\Lambda(\mathbf{q}) \approx \Lambda$; $\Gamma = \Lambda^2 / (4\hbar\Omega)$ — поляронный сдвиг. Учет электрон-фононного взаимодействия сводится к перенормировке межэлектронного взаимодействия электронов на узле.

Рассматривая V как возмущение, проведем разложение матрицы плотности ρ по t_{ij} [2]

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 + \dots$$

$$\rho_0 = Z^{-1} \exp [-\beta (H_0 - \mu \hat{N}_{s1})], \quad \beta = 1/kT,$$

$$\rho_1 = -Z^{-1} \exp [\beta (H_0 - \mu \hat{N}_{s2})] \int_0^\beta dt_1 \exp [t_1 (H_0 - \mu \hat{N}_{s1})] H'_0 \exp [-t_1 (H_0 - \mu \hat{N}_{s2})], \quad (6)$$

где $\hat{N}_{s1} = \sum_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma}$; μ — химический потенциал невозмущенной задачи, который определялся путем численного решения уравнения электронейтральности

$$\hat{N}_{s1} = kT \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z, \quad Z = \text{Sp} \{ \exp [-\beta (H_0 - \mu \hat{N}_{s1})] \}. \quad (7)$$

С помощью канонического преобразования S статистическую сумму Z можно представить в виде

$$Z = Z_{ei} Z_{ph}, \quad Z_{ph} = [2/\text{sh} (\beta \hbar \Omega/2)]^{N_0}, \quad Z_{ei} = (Z_{ei}^i)^{N_0}. \quad (8)$$

Статистическая сумма одного узла Z_{ei}^i находилась путем расчета шпура с помощью перебора всех возможных электронных конфигураций на узле

$$Z_{ei}^i = 1 + 4e^{-\beta \mu'} + 4e^{\beta(2\mu' - U')} + 2e^{\beta(2\mu' - U'_1)} + 4e^{\beta(2\mu' - U')} + 2e^{\beta(2\mu' - U'_1)} + 4e^{\beta(2\mu' - 2U' - U'_1)} + e^{\beta(4\mu' - 4U' - 2U'_1)}, \quad U'_1 = U_1 - \Gamma, \quad U_1 = U - I, \quad U' = U - \Gamma, \quad \mu' = \mu + \Gamma/2. \quad (9)$$

Из условия минимума термодинамического потенциала одного узла Ω_{ei}^i находился параметр m

$$\partial \Omega_{ei}^i / \partial m = 0, \quad \Omega_{ei}^i = -kT \ln Z_{ei}^i. \quad (10)$$

В случае слабого электрического поля, исходя из (3), было получено выражение для $\sigma_E(\mathcal{H})$. Из-за громоздкости в общем случае приведем выражение для статической электропроводности в пределе, соответствующем оценкам параметров для реальных d -зон ($U > T \gg kT$, $n \ll 2$, n — концентрация электронов в расчете на один узел)

$$\sigma_E(\mathcal{H}) = \frac{16\sqrt{\pi} kT a^2 t^2}{\hbar^2 \Lambda \sqrt{2} \text{cth} (\beta \hbar \Omega/2)} \{ e^{-A(F+\Gamma)^2 + 3\mu} + e^{-A(F+U'_1)^2 + 2\beta\mu} \text{ch} (2\beta \hbar') + e^{-A(F-U'_1+2\Gamma) - \beta(U'_1-2\mu)} \text{ch} (2\beta \hbar') + e^{-A(F+\Gamma)^2 - \beta(U'_1-3\mu)} \text{ch} (\beta \hbar') \}, \quad A = (2\Lambda^2 \text{cth} (\beta \hbar \Omega/2))^{-1}. \quad (11)$$

где $F = eEa$, a — постоянная решетки. Взаимодействие электронов на одном узле приводит к расщеплению затравочной энергетической зоны на ряд подзон, из которых две нижние являются актуальными в рассматриваемом пределе.

Движение носителей при $n < 1$ происходит по пустым узлам и соответствует обычному переносу по невырожденной зоне. При $n > 1$ трансляция электронов возможна по узлам, спин которых сонаправлен со спином движущегося электрона. Под действием электрического поля электроны могут увеличивать свою кинетическую энергию на величину, превышающую зазор между подзонами. При этом электроны попадают в верхнюю подзону, где их подвижность меньше. Приложение внешнего магнитного поля приводит к увеличению $\sigma_E(\mathcal{H})$ во второй подзоне, что определяется упорядоченностью спинов, которая возрастает с увеличением \mathcal{H} . Таким образом, существенным становится эффект отрицательного МС, которое определяется выражением

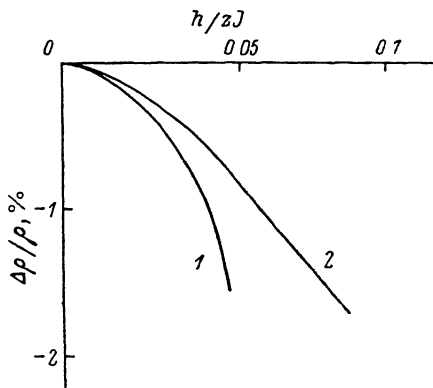
$$\Delta \rho / \rho = [\sigma_E(0) - \sigma_E(\mathcal{H})] / \sigma_E(\mathcal{H}), \quad (12)$$

где $\sigma_E(\mathcal{H})$ — электропроводность системы в магнитном поле, $\sigma(0)$ — в отсутствие магнитного поля. Увеличение внешнего электрического поля

приводит к росту отрицательного МС, что связано с увеличением $\sigma_E(\mathcal{H})$ (см. рисунок).

Экспериментально указанные особенности поведения МС проявляются в соединениях переходных металлов с зонной схемой, обуславливающей электропроводность по узкой d -зоне. К таким материалам относятся магнитные полупроводниковые шпинели типа CdCr_2Se_4 [1, 6].

Таким образом, при увеличении внешнего электрического поля в полупроводниковых материалах с узкими орбитально вырожденными зонами проводимости наблюдается рост величины отрицательного МС.



Зависимость магнетосопротивления от электрического поля.

$\hbar T/zJ=0.5$, $n=1.25$, $\hbar \Omega/zJ=0.1$, $\Delta/zJ=0.1$,
 $U_1/zJ=5$, $eEa/zJ=0.5$ (1) и 2 (2).

Список литературы

- [1] Белов К. П., Третьяков Ю. Д., Гордеев И. В., Королева Л. И., Кесслер Ф. А. Магнитные полупроводники — халькогенидные шпинели. М., 1981. 279 с.
- [2] Hattori K. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. N 7. P. 4246—4252.
- [3] Ионов С. П., Ионова Г. В., Майлыбаев А. Т. и др. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1981. Т. 45. № 3. С. 589—634.
- [4] Поляроны / Под ред. Ю. А. Фирсова. М., 1975. 424 с.
- [5] Bari R. // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. N 10. P. 4329—4339.
- [6] Balberg I., Pinch H. L. // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. N 14. P. 909—913.

Полтавский
государственный педагогический институт
им. В. Г. Короленко

Поступило в Редакцию
11 мая 1989 г.

В окончательной редакции
9 апреля 1990 г.