

## Магнитополяронные состояния сильнокоррелированного антиферромагнетика в окрестности спин-флип-перехода

© В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия  
Красноярский государственный университет,  
660000 Красноярск, Россия  
Красноярский государственный технический университет,  
660036 Красноярск, Россия

(Поступила в Редакцию 4 сентября 1997 г.)

Решена задача о спектре магнитополяронных состояний сильнокоррелированного проводящего антиферромагнетика в скошенной форме. Рассмотрение проводится при использовании атомного представления и диаграммной техники для операторов Хаббарда. Такой подход позволил последовательно учесть сильные внутриионные взаимодействия и получить дисперсионное уравнение для магнитополяронного спектра при произвольных значениях величины спина, температуры и магнитного поля. В окрестности спин-флип-перехода получено аналитическое выражение для спектра магнитополяронных состояний, выходящее за рамки квазиклассического приближения.

При экспериментальном изучении эффекта де Гаазаван Альфена (дГВА) в тяжелофермионном соединении  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  было обнаружено резкое изменение частоты осцилляций дГВА при переходе через спин-флип-точку [1].  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  в нормальной фазе обладает антиферромагнитным упорядочением с низким значением температуры Нееля. Поэтому в области сильных магнитных полей и низких температур имеет место сосуществование эффекта дГВА и фазового спин-флип-перехода.

Роль антиферромагнитного порядка в эффекте дГВА обсуждалась в работах [2,3]. Однако в них смена периода осцилляций не предсказывалась. Нами в рамках простой модели, включающей  $s-d(f)$ -обменную связь между спиновыми моментами коллективизированных и локализованных электронов, была продемонстрирована возможность изменения частоты осцилляций дГВА в проводящих антиферромагнетиках при переходе через спин-флип-точку [4]. Результаты работ [2–4] показали, что для последовательной расшифровки экспериментальных данных по осцилляциям дГВА важным является учет как антиферромагнетизма, так и обменной связи между коллективизированной и локализованной подсистемами.

Последнее обстоятельство является существенным и в сильнокоррелированных системах с низкой концентрацией носителей тока. К этому новому классу ССК относятся, например, монопниктиды редкоземельных элементов (R) с общей формулой  $\text{RX}$ , где  $X = \text{Bi, Sb, As, P}$ . Необычность их гальваномагнитных и термодинамических свойств привела к формированию новых концепций строения основного состояния компенсированных полуметаллов  $\text{RX}$ . Среди таковых отметим концепцию магнитополяронной жидкости и кристалла [5,6]. Ключевую роль при формулировке подобных сценариев электронного строения играют многочастичные эффекты, а также наличие дальнего антиферромагнитного упорядочения.

Для описания магнитополяронных состояний валентной зоны можно воспользоваться идеологией, развитой

в работах Нагаева [7]. При этом в соответствии с особенностями зонной структуры редкоземельных монопниктидов будем считать, что ширина затравочной валентной зоны мала по сравнению с характерной энергией  $s-f$ -взаимодействия. В таких узкозонных антиферромагнетиках, как известно [7], имеет место магнитополяронное сужение зоны. Это явление хорошо изучено для коллинеарной геометрии.

В настоящей работе решается задача о спектре магнитополяронных состояний сильнокоррелированного антиферромагнетика в условиях большого скаса магнитных подрешеток. Использование операторов Хаббарда [8–10] и диаграммной техники для них [11–16] позволило вывести дисперсионное уравнение, описывающее искомый спектр при произвольных значениях температуры, магнитного поля и спина. В области низких температур получено аналитическое выражение для энергии магнитополяронных состояний в окрестности спин-флип-перехода.

### 1. Гамильтониан сильнокоррелированного узкозонного антиферромагнетика

Рассмотрим сильнокоррелированный узкозонный антиферромагнетик (АФМ) с дырочным типом носителей тока. Изучаемую систему будем описывать в рамках  $s-d(f)$ -обменной модели [17]. Физика узкозонного варианта модели подробно описана в [7]. Сильные одноузельные корреляции удобно учитывать путем введения атомного представления [8–10] и диаграммной техники для операторов Хаббарда [11–16].

Гамильтониан модели запишем в виде

$$H = H_h + H_{sd} + H_m. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает зонные носители тока. Для описания антиферромагнитной фазы введем две

подрешетки  $F$  и  $G$ . Тогда в представлении Ванье и при учете хаббардовского отталкивания на одном узле

$$\begin{aligned}
 H_h = & \sum_{ff'\sigma} [t_{ff'} - \delta_{ff'}(2\mu_B H\sigma - \mu)] c_{f\sigma}^+ c_{f'\sigma} \\
 & + \sum_{fg\sigma} t_{fg}(c_{f\sigma}^+ d_{g\sigma} + \text{h.c.}) \\
 & + \sum_{gg'\sigma} [t_{gg'} - \delta_{gg'}(2\mu_B H\sigma - \mu)] d_{g\sigma}^+ d_{g'\sigma} \\
 & + \sum_f U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \sum_g U n_{g\uparrow} n_{g\downarrow}, \quad (2)
 \end{aligned}$$

где индексы  $f$ ,  $f'$  и  $g$ ,  $g'$  нумеруют узлы на  $F$ - и  $G$ -подрешетках соответственно, операторы  $c_{f\sigma}$  ( $c_{f\sigma}^+$ ) и  $d_{g\sigma}$  ( $d_{g\sigma}^+$ ) описывают процессы уничтожения (рождения) дырок в представлении Ванье в  $F$ - и  $G$ -подрешетках.

Второе слагаемое гамильтониана (1) описывает связь зонных носителей с локализованными спиновыми моментами посредством  $s-d(f)$ -обменного взаимодействия [17]

$$H_{sd} = -A \sum_f (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_f) - A \sum_g (\mathbf{S}_g \boldsymbol{\sigma}_g), \quad (3)$$

где  $A$  — параметр  $s-d(f)$ -обмена,  $\mathbf{S}_f$  — векторный оператор локализованного спина на узле  $f$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_f$  — векторный оператор спинового момента дырки в представлении Ванье для  $F$ -подрешетки. Аналогичное определение имеет место для  $G$ -подрешетки.

Последнее слагаемое в (1) описывает гейзенберговское взаимодействие в подсистеме локализованных спинов, а также их зеемановскую энергию.

В магнитном поле в изотропном антиферромагнетике имеет место скос подрешеток [18,19]. Для описания данного эффекта удобно перейти к локальным координатам так, чтобы для каждой подрешетки вектор равновесной намагниченности был ориентирован вдоль новой оси  $Oz$ . Вывод гамильтониана в локальных координатах был подробно описан в [4], где были приведены законы преобразования для фермиевских и спиновых операторов. Используя их нетрудно записать гамильтониан  $H'$ . При этом

$$\begin{aligned}
 H'_h = & \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} c_{f\sigma}^+ c_{f'\sigma} + \sum_{gg'\sigma} t_{gg'} d_{g\sigma}^+ d_{g'\sigma} \\
 & + \sum_{fg\sigma} t_{fg} (\cos \theta c_{f\sigma}^+ d_{g\sigma} + 2\sigma \sin \theta c_{f\sigma}^+ d_{g\sigma} + \text{h.c.}) \\
 & + \sum_{f\sigma} \left\{ \mu_B H \sin \theta c_{f\sigma}^+ c_{f\sigma} - (2\mu_B H \cos \theta \sigma - \mu) c_{f\sigma}^+ c_{f\sigma} \right\} \\
 & + \sum_f U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} - \sum_{g\sigma} \left\{ \mu_B H \sin \theta d_{g\sigma}^+ d_{g\sigma} \right. \\
 & \left. + (2\mu_B H \cos \theta \sigma - \mu) d_{g\sigma}^+ d_{g\sigma} \right\} + \sum_g U n_{g\uparrow} n_{g\downarrow}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Гамильтониан  $s-d(f)$ -обменного взаимодействия остается без изменений  $H'_{sd} = H_{sd}$ . Для подсистемы локализованных спиновых моментов преобразованный оператор описывается выражением

$$\begin{aligned}
 H'_m = & -\frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\mathbf{S}_g \mathbf{S}_{g'}) \\
 & - g\mu_B H \left\{ \sum_f S_f^z(\theta) + \sum_g S_g^z(\theta) \right\} \\
 & + \sum_{fg} K_{fg} \left\{ \cos 2\theta (S_f^x S_g^x + S_f^z S_g^z) + S_f^y S_g^y \right. \\
 & \left. + \sin 2\theta (S_f^z S_g^x - S_f^x S_g^z) \right\}. \quad (5)
 \end{aligned}$$

Из (4) видно, что в неколлинеарной фазе кроме зависимости эффективного интеграла перескока от угла  $\theta$  возникает дополнительное операторное слагаемое, формально соответствующее отмеченным выше процессам перескока дырок с изменением проекции спинового момента.

## 2. Гамильтониан узкозонного АФМ в неколлинеарной фазе в атомном представлении

При изучении узкозонного АФМ предполагается, что между константой  $s-d(f)$ -обмена и интегралом перескока выполняются неравенства  $|t_{fg}| \ll |A|$ . Поэтому  $s-d(f)$ -связь между локализованной и коллективизированной подсистемами необходимо учитывать точно [7,12]. С этой целью из полного гамильтониана  $H'$  выделим слагаемые, содержащие только одноузельные операторы

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ion}} = & \sum_f \left\{ -A(\mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_f) - \bar{H} S_f^z - h\sigma_f^z - h_{\perp} \sigma_f^x + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} \right\} \\
 & + \sum_g \left\{ -A(\mathbf{S}_g \boldsymbol{\sigma}_g) - \bar{H} S_g^z - h\sigma_g^z + h_{\perp} \sigma_g^x + U n_{g\uparrow} n_{g\downarrow} \right\}, \quad (6)
 \end{aligned}$$

где эффективное поле  $\bar{H}$  записано с учетом самосоглазованного поля

$$\bar{H} = g\mu_B H \cos \theta + I_0 R - K_0 \cos 2\theta R, \quad R = \frac{1}{N} \sum_f \langle S_f^z \rangle, \quad (7)$$

$I_0$  и  $K_0$  — фурье-образы обменных параметров при нулевом значении квазиимпульса. Продольная и поперечная составляющие магнитного поля, действующего на дырки, определяются выражениями

$$h = 2\mu_B H \cos \theta, \quad h_{\perp} = -2\mu_B H \sin \theta. \quad (8)$$

В дальнейшем будем предполагать, что хаббардовское отталкивание является сильным настолько, что можно



В этом графическом уравнении тонкой линии  $\frac{\Delta}{\alpha}$  соответствует внутриионный пропагатор

$$G_{\alpha}(\omega_n) = [i\omega_n + \alpha E]^{-1}, \quad \omega_n = (2n + 1)\pi T, \quad (19)$$

в котором скалярное произведение корневого вектора  $\alpha$  и вектора  $E$  определяется равенством  $\alpha E \equiv \alpha(M, n)E = E_M - E_n$ . Ввиду идентичности подрешеток и одинаковых значений одноионных уровней энергий для них  $G_{\alpha}(\omega_n)$  не зависит от индекса подрешетки. Волнистые линии при аналитическом расписывании диаграмм ставятся в соответствие Фурье-образ просуммированного по значению проекции спинового момента матричного элемента взаимодействия (16). Конкретные значения индексов матричных элементов взаимодействия определяются индексами линий функций Грина, которые соединены с волнистой линией. Например, в (18) при  $A = F$  и  $A_1 = G$  линии взаимодействия сопоставится выражение

$$\Gamma_{\mathbf{q}}^{\alpha\alpha_1} = \sum_{\sigma} \Gamma_{\mathbf{q}} [\cos \theta \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\alpha_1) + 2\sigma \sin \theta \gamma_{\sigma}(\alpha)^{-} \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha_1)],$$

$$\Gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_g t_{fg} \exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g)\}. \quad (20)$$

Если же  $A = F$ ,  $A_1 = F$ , то волнистой линии соответствует следующая аналитическая запись:

$$t_{\mathbf{q}}^{\alpha\alpha_1} = \sum_{\sigma} t_{\mathbf{q}} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\alpha_1),$$

$$t_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{f f'} t_{ff'} \exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})\}. \quad (21)$$

Остальные обозначения стандартные и подробно описаны в [11,15].

Из (18) следует система уравнений в аналитической форме

$$G_{\alpha\beta}^{FF}(\mathbf{k}, \omega_n) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}(\omega_n) + G_{\alpha}(\omega_n) b(\alpha) \left\{ t_{\mathbf{k}}^{\alpha\alpha_1} G_{\alpha_1\beta}^{FF}(\mathbf{k}, \omega_n) + \Gamma_{\mathbf{k}}^{\alpha\alpha_1} G_{\alpha_1\beta}^{GF}(\mathbf{k}, \omega_n) \right\}, \quad (22)$$

$$G_{\alpha\beta}^{GF}(\mathbf{k}, \omega_n) = G_{\alpha}(\omega_n) b(\alpha) \times \left\{ t_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha) \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha_1) G_{\alpha_1\beta}^{GF}(\mathbf{k}, \omega_n) + \left[ \Gamma_{\mathbf{k}} \cos \theta \sum_{\sigma\alpha_1} \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\alpha_1) + \Gamma_{\mathbf{k}} \sin \theta \sum_{\sigma\alpha_1} 2\sigma \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\alpha_1) \right] \times G_{\alpha_1\beta}^{FF}(\mathbf{k}, \omega_n) \right\}. \quad (23)$$

Для решения этой системы уравнений в общем виде существенное значение имеет расщепленный по индексам

корневых векторов  $\alpha, \alpha_1$  характер матричных элементов взаимодействия. Эта расщепленность хорошо видна из формул (20) и (21). Применяя метод решения таких уравнений с расщепленным ядром [13,14], находим, что дисперсионное уравнение может быть записано в виде

$$0 = [(1 - t_{\mathbf{k}} L_{\uparrow\uparrow})^2 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\uparrow}^2] [(1 - t_{\mathbf{k}} L_{\downarrow\downarrow})^2 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\downarrow\downarrow}^2] + \Gamma_{\mathbf{k}}^4 M_{\uparrow\downarrow}^2 M_{\downarrow\uparrow}^2 + 2(\Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\downarrow} M_{\downarrow\uparrow} - t_{\mathbf{k}}^2 L_{\uparrow\downarrow}^2) \times [(1 - t_{\mathbf{k}} L_{\uparrow\uparrow})(1 - t_{\mathbf{k}} L_{\downarrow\downarrow}) - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\uparrow} M_{\downarrow\downarrow}] + 2t_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}}^2 L_{\uparrow\downarrow} (M_{\uparrow\downarrow} - M_{\downarrow\uparrow}) (M_{\uparrow\uparrow} - M_{\downarrow\downarrow}) + t_{\mathbf{k}}^2 L_{\uparrow\downarrow}^2 [t_{\mathbf{k}}^2 L_{\downarrow\downarrow}^2 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 (M_{\uparrow\downarrow}^2 + M_{\downarrow\uparrow}^2)], \quad (24)$$

где

$$L_{\sigma\sigma_1}(\omega) = \sum_{\alpha} \bar{\gamma}_{\sigma}(\alpha) \bar{\gamma}_{\sigma_1}(\alpha) G_{\alpha}(\omega) b(\alpha),$$

$$M_{\sigma\sigma_1}(\omega) = L_{\sigma\sigma'}(\omega) \cos \theta + (2\sigma_1) L_{\sigma\bar{\sigma}_1}(\omega) \sin \theta. \quad (25)$$

При изучении эффекта дГВА нас интересует прежде всего область низких температур. Математическим отражением этого обстоятельства является неравенство  $T \ll T_N$ . Известно, что числа заполнения одноионных состояний распределены в соответствии с атомной статистикой. Поэтому в интересующей нас области температур существенными являются лишь числа  $N_1$  и  $N_S$ , тогда как остальные экспоненциально малы. Это приводит к резкому уменьшению числа внутриионных переходов, участвующих в формировании коллективного спектра квазичастиц, и упрощению вида дисперсионного уравнения. Дело в том, что при  $T \ll T_N$  вклады вносят только те переходы, в которых участвует по крайней мере одно из нижних состояний мультиплетов с дыркой либо без нее.

Другой фактор, позволяющий упростить структуру дисперсионного уравнения, заключается в использовании малого параметра ( $v/\varepsilon$ ) и проведении всех вычислений с квадратичной по этому параметру точностью. Необходимость проведения расчетов с такой точностью продиктована рассмотрением эффектов  $\sim \theta^2$  в окрестности перехода из скошенной фазы в коллинеарную.

#### 4. Спектр дырок в окрестности спин-флип-перехода

Проводя вычисления функций  $L_{\sigma_1\sigma_2}$  и  $M_{\sigma_1\sigma_2}$  с рассматриваемой точностью, получаем дисперсионное уравнение в следующем виде:

$$(1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\uparrow}^2)(1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\downarrow\downarrow}^2) + 2\Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\downarrow} M_{\downarrow\uparrow} (1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2 M_{\uparrow\uparrow} M_{\downarrow\downarrow}) = 0, \quad (26)$$

где предполагается сделанным аналитическое продолжение. Для упрощения считается, что отличны от нуля

только те матричные элементы  $t_{ij}$ , которые соответствуют перескоку носителей тока между ближайшими соседями.

Решая уравнение (26), находим интересующую нас ветвь фермиевских возбуждений

$$E(\mathbf{k}) = \frac{A(S+1)}{2} + \frac{\hbar}{2S+1} + \frac{h}{2} \frac{2S-1}{2S+1} - \frac{2S}{2S+1} |\Gamma_{\mathbf{k}}| \cos \theta + N_1 \left\{ \frac{2S-1}{(2S+1)^3} \left(\frac{v}{\varepsilon}\right)^2 |\Gamma_{\mathbf{k}}| + \frac{2(2S-1)}{(2S+1)^2} \left(\frac{v \sin \theta}{\varepsilon}\right) |\Gamma_{\mathbf{k}}| - \frac{2S-1}{(2S+1)^2} \left(\frac{v^2}{\varepsilon}\right) - \frac{\sin^2 \theta}{2S+1} |\Gamma_{\mathbf{k}}| \right\}. \quad (27)$$

Видно, что при  $H = H_c$ , когда  $\theta = 0$ , этот спектр переходит в полярный спектр, полученный ранее Нагаевым [7].

Приведенное решение задачи о спектре магнитополяронных состояний антиферромагнетика в скошенной фазе является основой для изучения многих кинетических и гальваномагнитных явлений в проводящих антиферромагнетиках в магнитном поле. Прежде всего сказанное относится к эффекту дГВА в таких системах. В данной работе ограниченность места не позволяет остановиться на исследовании влияния магнитополяронных состояний на осцилляции магнитного момента в квантующем магнитном поле. Соответствующие результаты, основанные на выводах настоящей работы, будут изложены в отдельной статье. Здесь же отметим, что полученные формулы позволяют проследить температурную эволюцию магнитополяронных состояний. Эти данные необходимы, например, при исследованиях температурного поведения магнитосопротивления проводящих антиферромагнетиков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки (грант № 5F0158).

## Список литературы

- [1] M. Hunt, P. Meeson, P.A. Probst, P. Reinders, M. Springford, W. Assmus, W. Sun. *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 6859 (1990).
- [2] J.W. Rusul, P. Schlottmann. *Physica* **B163**, 689 (1990).
- [3] R. Sollie, P. Schlottmann. *Phys. Rev.* **B41**, 8860 (1990).
- [4] В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили. *ФГТ* **39**, 2, 204 (1997).
- [5] T. Kasuya, T. Suzuki, Y. Haga. *J. Phys. Soc. Jap.* **62**, 2549 (1993).
- [6] T. Kasuya. *J. Phys. Soc. Jap.* **64**, 1453 (1995).
- [7] Э.Л. Нагаев. *Физика магнитных полупроводников*. Наука, М. (1979).
- [8] J. Habbard. *Proc. Roy. Soc.* **A285**, 545 (1964).
- [9] Л.А. Максимов, К.А. Кикоин. *ФММ* **28**, 43 (1969).
- [10] Л.А. Максимов, К.А. Кикоин. *ЖЭТФ* **58**, 2184 (1970).
- [11] Р.О. Зайцев. *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
- [12] М.Ш. Ерухимов, С.Г. Овчинников. *ТМФ* **67**, 237 (1986).
- [13] В.В. Вальков, Т.А. Валькова. *ФНТ* **11**, 951 (1985).
- [14] В.В. Вальков, Т.А. Валькова, С.Г. Овчинников. *ЖЭТФ* **88**, 550 (1985).
- [15] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*. Наука, М. (1987).
- [16] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. *Магнетизм коллективизированных электронов*. Физ.-мат. лит., М. (1994).
- [17] С.В. Вонсовский. *Магнетизм*. Наука, М. (1971).
- [18] А.С. Боровик-Романов. В кн.: *Антиферромагнетизм и ферриты*. АН СССР, М. (1962).
- [19] А.Г. Гуревич. *Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках*. Наука, М. (1973).