

Для возбуждения звука использовались преобразователи из ниобата лития. В качестве акустической склейки применялось силиконовое масло. Эхо-импульсная ультразвуковая установка работала на частоте 5 МГц с фиксированной фазой сигнала и позволяла измерять абсолютные значения скорости звука с точностью 0.1 %, а ее относительное изменение — с точностью 0.01 %. Температурные измерения скорости звука проводились в термостате в динамическом режиме. Скорость изменения температуры образца не превышала 0.5 К/мин. Температурные зависимости скоростей  $v_L$  продольных и  $v_S$  сдвиговых волн с поляризацией вдоль [100], распространяющихся в направлении акустической оси кристалла [001], представлены на рисунке.

По полученным данным можно рассчитать температурные зависимости упругих модулей  $c_{33}$  и  $c_{44}$ . Результаты работы могут быть использованы для оптимизации работы акустооптических устройств.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Harris S. E., Niech ST. K., Feigelson R. S. // Appl. Phys. Lett. 1970. V. 17. N 5. P. 223—225.  
 [2] Tracy G. // Opt. Eng. 1980. V. 20. N 5. P. 716—717.  
 [3] Антипов В. В., Анненков А. Н., Блистанов А. А. и др. // А. с. 1354790.

Новомосковский филиал  
 Московского химико-технологического института  
 им. Д. И. Менделеева  
 Новомосковск

Поступило в Редакцию  
 23 августа 1989 г.  
 В окончательной редакции  
 29 ноября 1989 г.

## ФЕРРОМАГНЕТИЗМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Ю. А. Изюмов, Б. М. Летфулов, Е. В. Шипицын

В последнее время в связи с изучением высокотемпературной сверхпроводимости значительно усилилось внимание к модели Хаббарда с сильным, но конечным по величине кулоновским отталкиванием  $U$ , т. е. при  $\kappa \ll 1$ , где  $\kappa = t/U$ ,  $t$  — интеграл переноса электрона на ближайшие узлы. В этом случае вместо исходного гамильтониана Хаббарда можно использовать эффективный гамильтониан, получаемый во втором порядке теории возмущений по  $\kappa$  [1], который в  $X$ -операторах Хаббарда имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{l\sigma} \epsilon_{\sigma} X_l^{\sigma\dagger} + t \sum_{l\Delta\sigma} X_l^{\sigma\dagger} X_{l+\Delta}^{0\sigma} + \kappa t \sum_{l\Delta} [X_l^{\dagger} X_{l+\Delta}^{-\dagger} - X_l^{\dagger\dagger} X_{l+\Delta}^{-}], \quad (1)$$

где  $\epsilon_{\sigma} = -\mu - c\hbar/2$ ;  $\sigma = \pm = \uparrow, \downarrow$ ;  $\hbar = g\mu_B H$ ;  $H$  — внешнее магнитное поле;  $\Delta$  — вектор, нумерующий ближайшие узлы.

Большой интерес представляет изучение магнитных свойств гамильтониана (1). Нагаока [2] показал, что при  $\kappa=0$  и  $T=0$  вблизи  $n=1$  в ПК-решетке основное состояние ферромагнитно; позже этот результат был подтвержден в [3]. Так как результаты работы [2] справедливы в приближении  $1-n \ll 1$ , то ее автору не удалось получить значение критической концентрации  $n_c$ , ниже которой система становится парамагнитной. Поэтому потребовалась специальная интерполяционная процедура при расщеплении цепочки уравнений для одноэлектронной функции Грина (Рот [4]), при которой учитывались спиновые и зарядовые флуктуации на соседних узлах; при  $\kappa=0$  и  $T=0$  для ПК-решетки она привела к значению  $n_c=0.36$ . Недавно гамильтониан (1) при  $\kappa=0$  был исследован в [5], где полученные общие уравнения совпадают с [4].

Проблема теперь состоит в исследовании магнитных свойств гамильтониана (1) при  $x > 0$  во всей концентрационной области  $0 \leq n \leq 1$ . Наиболее надежный результат в этом направлении был получен Нагаока [2], который в рамках приближения  $1-n \ll 1$  показал, что в ПК-решетке при  $T=0$  ферромагнитное состояние является основным при  $x < 0.246$  ( $1-n$ ). (По этому поводу см. также [3, 6].)

В данном сообщении мы представляем результаты исследований по определению на основе гамильтониана (1) области существования ферромагнитной фазы на плоскости  $(x, n)$  при  $T=0$ . Для этого при помощи схемы расщепления [4] мы вычислили одноэлектронную функцию Грина, из которой можно получить систему самосогласованных уравнений

$$n_{\sigma} = (1 - n_{-\sigma}) \int \rho(\varepsilon) f(E_{-\sigma}) d\varepsilon,$$

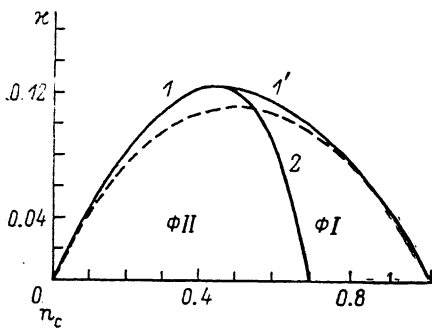
$$E_{\sigma} = (1 - n_{\sigma}) \varepsilon + \frac{\sigma h}{2} - xWn_{\sigma} - \frac{W + x\varepsilon}{W(1 - n_{\sigma})} \psi_{\sigma} -$$

$$- \frac{\varepsilon + xW}{W^2(1 - n)(1 - n_{\sigma})} [(1 - n_{\sigma}) \psi_{\sigma} + \psi_{-\sigma}] \psi_{\sigma},$$

$$\psi_{\sigma} = (1 - n_{-\sigma}) \int \varepsilon \rho(\varepsilon) f(E_{-\sigma}) d\varepsilon, \quad (2)$$

где  $\rho(\varepsilon)$  — одноэлектронная плотность состояний,  $f(\varepsilon)$  — функция Ферми—Дирака,  $W=zt$ ,  $z$  — число ближайших соседей. При  $x=0$  и  $h=0$  уравнения (2) переходят в соответствующие уравнения работ [4, 5].

Из (2) можно получить уравнение для намагниченности  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  и выражение для парамагнитной восприимчивости  $\chi = (\partial m / \partial h)_{h=0}$ . Для



Ферромагнитная фазовая диаграмма при  $\rho(\varepsilon) = 1/2W$  и  $T=0$ .

прямоугольной полосы  $\rho(\varepsilon) = 1/2W$  при  $T=0$  уравнение для намагниченности решается точно. Исследование намагниченности как функции  $x$  и  $n$  показывает (см. рисунок), что ферромагнитное состояние является основным в области, ограниченной кривыми 1, 1' и осью абсцисс. При  $x=0$  ферромагнетизм существует во всей концентрационной области, кроме точек  $n=0$  и  $n=1$ , и является насыщенным ( $m=n$ ). С увеличением  $x$  ферромагнитное состояние подавляется. Ниже штриховой кривой ферромагнетизм является насыщенным, а выше ее, до кривых 1 и 1' — ненасыщенным ( $m < n$ ).

Кривая 2 на рисунке разделяет всю ферромагнитную область на две подобласти, обозначенные как  $\Phi I$  и  $\Phi II$  и отличающиеся друг от друга температурным поведением намагниченности. В подобласти  $\Phi I$  намагниченность обращается в нуль скачком при  $T=T_c$ , т. е. обнаруживает фазовый переход первого рода по температуре, а в подобласти  $\Phi II$  обращение намагниченности в нуль происходит плавно (без скачка), т. е. наблюдается фазовый переход второго рода по температуре. Кривые 1 и 2 получены из расходимости парамагнитной восприимчивости  $\chi$  при  $\rho(\varepsilon) = 1/2W$  и  $T=0$ .

Расчет для ПК-решетки показывает, что качественный вид фазовой диаграммы остается таким же, за исключением того, что критическая концентрация  $n_c$  в отличие от случая прямоугольной полосы становится конечной и при  $T=0$  равна 0.34.

- [1] Anderson P. W. // Science. 1987. V. 235. N T-10. P. 1196—1198.  
 [2] Nagaoka Y. // Phys. Rev. 1966. V. 147. N 1. P. 392—405.  
 [3] Nikolaev M. Yu., Ryzhanova N. V., Vedyayev A. V., Zubritskii S. M. // Phys. St. Sol. (b). 1985. V. 128. N 2. P. 513—523.  
 [4] Roth L. M. // Phys. Rev. 1969. V. 184. N 2. P. 451—459.  
 [5] Goryachev E. G., Kuzmin E. V. // Phys. Lett. A. 1988. V. 131. N 7—8. P. 481—485.  
 [6] Nolting W., Borgiel W. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 10. P. 6962—6978.

Институт физики металлов  
 УрО АН СССР  
 Свердловск

Поступило в Редакцию  
 3 сентября 1989 г.  
 В окончательной редакции  
 1 декабря 1989 г.

УДК 541.67

© Физика твердого тела, том 32, № 5, 1990  
 Solid State Physics, vol. 32, N 5, 1990

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{CuFeSe}_2$ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОСТАВА И ТЕМПЕРАТУРЫ

*В. Г. Плещев, Р. Ф. Габбасов*

Среди тройных алмазоподобных полупроводников особую группу составляют соединения типа  $\text{AFeX}_2$  ( $\text{A}=\text{Ag}, \text{Cu}$ ;  $\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) [1, 2], присутствие в которых элемента с незаполненной  $3d$ -оболочкой делает возможным существование при определенных условиях магнитного упорядочения при сохранении полупроводникового характера проводимости. Наиболее изученным в этой группе соединений является халькопирит ( $\text{CuFeS}_2$ ), обладающий полупроводниковыми свойствами и антиферромагнитным упорядочением ниже 820 К [3]. Другое соединение из этой группы  $\text{CuFeSe}_2$  является малоизученным материалом. Имеющиеся сведения показывают, что данное соединение может существовать с некоторым отклонением от стехиометрического состава [4, 5]. Систематические исследования физических свойств  $\text{CuFeSe}_2$  отсутствуют, однако близость его по химическому составу к халькопириту позволяет предполагать и некоторое сходство их физических свойств. Так, по имеющимся данным  $\text{CuFeSe}_2$  представляет собой полупроводник с малой шириной запрещенной зоны [2].

В настоящей работе проведены исследования электропроводности  $\sigma$ , коэффициента термоэдс  $\alpha$ , магнитной восприимчивости  $\chi$  образцов  $\text{Cu}_{1-x}\text{FeSe}_2$  ( $0 \leq x \leq 0.1$ ) в интервале температур 80—500 К. Образцы для исследований были синтезированы в вакууме методом твердофазных реакций из чистых элементов и по своему составу соответствовали однофазному состоянию. На рис. 1 представлены результаты исследования электропроводности ( $a$ ) и коэффициента термоэдс ( $b$ ) для  $x=0$  (1), 0.05 (2), 0.08 (3), 0.1 (4).

Поскольку исследуемые образцы отличаются концентрацией дефектов, связанных с отклонением от стехиометрического состава, то низкотемпературные участки зависимостей  $\sigma(T)$  могут быть связаны с примесной проводимостью, которая при повышении температуры уступает место собственной. На зависимостях  $\ln \sigma(1/T)$  трудно выделить достаточно протяженные линейные участки, поэтому определение энергий активации проводимости представляется затруднительным. Однако приближенная оценка показывает увеличение энергии активации при возрастании температуры примерно на порядок величины до значения, полученного ранее для  $\text{CuFeSe}_2$  и равного 0.16 эВ [2]. Коэффициент термоэдс у синтезированных образцов  $\text{Cu}_{1-x}\text{FeSe}_2$  также обнаруживает зависимость от состава