

МЕЖУЗЕЛЬНОЕ ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

А. А. Повзнер

1. В теории ферромагнетизма переходных металлов и их соединений актуальным является исследование механизмов ферромагнитного упорядочения в модели Хаббарда, где наряду с зонным движением электронов учитывается внутриатомное кулоновское взаимодействие между ними (см., например, [1-3]). Согласно проведенным ранее исследованиям основного состояния электронной системы в модели Хаббарда, в пределе сильной связи происходит расщепление исходной зоны на две подзоны единиц (одиночных электронов) и доек (пар электронов с противоположными спинами), разделенных энергетической щелью, примерно равной Q (параметр кулоновского взаимодействия). При этом, когда среднее число электронов на узел близко к единице, кулоновские корреляции приводят к переходу от антиферромагнитного упорядочения электронных спинов ($n = 1$) к ферромагнитному [2]. Возникающее в этом случае основное ферромагнитное состояние характеризуется раздвинутыми по шкале энергий подзоной свободных электронов со спином σ , параллельным намагниченности, и пустой подзоной сильно затухающих σ -состояний. Однако в модели Хаббарда не описывается стонеровский ферромагнетизм почти свободных σ - и σ -электронов, энергетическая раздвижка между состояниями которых может оказаться много меньше энергии Ферми ε_F , как это имеет место в слабых зонных ферромагнетиках [1].

2. В настоящей работе исследуется ферромагнетизм в модели Хаббарда, дополненной межузельным обменным взаимодействием электронов J . Учитывая малость последнего по сравнению с внутриатомным $J \ll Q$, можно, следуя [4, 5], воспользоваться для его описания приближением среднего поля

$$H = H_X - \sum_{\nu\sigma} J n_{\sigma} n_{\nu\sigma}, \quad (1)$$

где H_X — гамильтониан Хаббарда (см. [2, 6]), $n_{\nu\sigma}$ — операторы чисел заполнения состояний со спином σ на узле ν , $n_{\sigma} = \langle n_{\nu\sigma} \rangle$.

Далее при описании ферромагнетизма в модели с гамильтонианом (1) можно воспользоваться методом расчета электронных функций Грина из [6], который в рамках приближения неупорядоченного хаббардовского сплава позволяет корректно описать температурную зависимость парамагнитной восприимчивости при переходе от систем с антиферромагнитным основным состоянием к ферромагнетикам в пределе сильной связи. Проводя в уравнениях для функций Грина [6] замены энергий атомных урвней

$$\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_{1\sigma} = \varepsilon_1 - J n_{\sigma},$$

получаем с учетом вкладов от процессов электронного рассеяния и спиновых переворотов следующие выражения для функций Грина единиц:

$$G_{\nu\sigma}(\varepsilon) \approx n_{\sigma} [\varepsilon - \varepsilon_{1\sigma} - n_{\sigma} t_{\nu}]^{-1}, \quad (2)$$

$$G_{\nu\bar{\sigma}}(\varepsilon) \approx n_{\bar{\sigma}} [\varepsilon - \varepsilon_{1\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}} t_{\nu} - \lambda_{\bar{\sigma}}]^{-1}. \quad (3)$$

Здесь рассмотрен интервал температур $T \gg T_{1, 2}$, где в рамках приближения эллиптических зон

$$k_B T_1 = (W/32) (2\pi)^{-3/2} (1 - n)^{4/3},$$

$$k_B T_2 = (3/16\pi) (W^2/Q) (1 - n), \quad (4)$$

а поправка к энергиям электронов за счет рассеяния и спиновых переворотов

$$\lambda_{\bar{\sigma}} = (\pi W/4)^2 G_{\text{во}}(\epsilon) \quad (5)$$

может оказаться сравнимой с шириной хаббардовских подзон W , выражаемой через Фурье-образы интегралов переноса t_k .

Записывая теперь выражение для намагнитченности m_0 рассматриваемого ферромагнетика и производя в нем разложение по степеням малых эффективных полей Jm_0 , получаем уравнение

$$\begin{aligned} \bar{S}^{-1} = 1 - J\bar{g}(\epsilon_F) - J [(\bar{g}^{(1)}(\epsilon_F)/\bar{g}(\epsilon_F))^2 - (g^{(2)}(\epsilon_F)/3)] \times \\ \times (\pi k_B T)^2/6 + (Jm_0)^2 [\bar{g}^{(1)}(\epsilon_F) + (Jg^{(2)}(\epsilon_F)/3)] = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

содержащее перенормированную кулоновскими корреляциями плотность электронных состояний

$$\bar{g}(\epsilon) = (g(\epsilon)/2(1 - n)), \quad (7)$$

а также ее производные по энергии $g^{(n)}(\epsilon)$. В парамагнитной области температур аналогичные перенормировки получаем и для восприимчивости

$$\chi = \bar{g}(\epsilon_F) \bar{S}.$$

Анализируя полученные соотношения видим, что влияние на температурные зависимости m_0 и χ стонеровских возбуждений начинает доминировать при

$$(k_B T/W) > [k_B (T_1 - T_2)/J]^{1/3},$$

когда магнитные свойства можно описать моделью Стонера с перенормированной плотностью электронных состояний $g(\epsilon)$ (7). Поэтому причины возникновения стонеровского ферромагнетизма в условиях сильных кулоновских корреляций в переходных металлах и их соединениях можно связать с конкуренцией внутриатомного и межузельного обменного взаимодействия. При этом в области низких температур должно происходить превращение насыщенного по спину ферромагнетика в слабый, сопровождаемое не только заметным уменьшением энергетической раздвижки σ -подзон, но и затухания электронных состояний. Подобное превращение возможно в слабоферромагнитных $ZrZn_2$, Ni_3Al и Sc_3In , влияние на основное состояние которых кулоновских корреляций до сих пор не было изучено экспериментально.

Список литературы

- [1] Морийя Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М.: Мир, 1988. 287 с.
- [2] Ведяев А. В., Котельникова О. А., Николаев М. Ю., Стефанович А. В. Фазовые переходы и электронная структура сплавов. М.: МГУ, 1986. 166 с.

- [3] Изюмов Ю. А., Летфулов Б. М., Шипицын Е. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 5. С. 1561—1563.
 [4] Vedyayev A. V., Kondorskii E. A., Mizia E. // Phys. Stat. Sol. (b). 1975. V. 72. N 1. P. 205—209.
 [5] Повзнер А. А., Абельский Ш. Ш. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 12. С. 3697—3698.
 [6] Повзнер А. А., Волков А. Г. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 3. С. 657—661.

Уральский политехнический институт
 им. С. М. Кирова
 Екатеринбург

Поступило в Редакцию
 19 февраля 1992 г.

УДК 621.315.592

© Физика твердого тела, том 34, № 7, 1992
 Solid State Physics, vol. 34, N 7, 1992

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В СИСТЕМЕ CdTe—MnTe—MgTe

Г. К. Аверкиева, М. Е. Бойко, Н. Н. Константинова,
 Т. Б. Нопова, В. Д. Прочухан, Ю. В. Рудь

Разбавленные магнитные полупроводники, образующиеся по разрезам A^2V^6 — MnV^6 (где $A = Cd, Zn$; $V = S, Se, Te$), представляют практический интерес и в настоящее время интенсивно изучаются [1]. В частности, изучается разрез CdTe—MnTe, по которому образуются твердые растворы $Cd_{1-x}Mn_xTe$ со структурой цинковой обманки [2, 3]. В таких твердых растворах с небольшими концентрациями анионов было установлено существование при низких температурах связанных магнитных поляронов. Однако при увеличении концентрации Mn увеличивается вероятность ближайшего соседства ионов Mn^{2+} , приводящего к их антиферромагнитному взаимодействию и подавлению поляронного эффекта [2, 3]. Расчеты авторов [2] показали, что устранение антиферромагнитного взаимодействия ионов Mn^{2+} при образовании слоистой структуры с упорядоченным расположением упомянутых ионов могло бы привести к сохранению поляронов вплоть до 200 К, что весьма важно для практических применений. Цитированные авторы высказали также предположение о перспективности синтеза сплавов со структурой станнита, где расстояние между ионами Mn^{2+} могло бы быть в $\sqrt{2}$ раз больше, чем в неупорядоченных твердых растворах $Cd_{1-x}Mn_xTe$ со структурой цинковой обманки.

Исходя из того что структура станнита формируется из четырех компонентов разной химической природы, мы исследовали разбавленные магнитные полупроводники, образующиеся в системе CdTe—MnTe—MgTe по разрезам $Cd_{0.75-x}Mn_{0.25}Mg_xTe$, $Cd_{0.75-x}Mn_xMg_{0.25}Te$ и $Cd_{1-2x}Mn_xMg_xTe$ (см. рисунок).

Перед синтезом твердых растворов нами проводилась дополнительная очистка марганца по предложенной автором [4] методике кристаллизации MnTe из избытка Te в графитовой контейнере.

Используя очищенный MnTe, мы синтезировали ряд твердых растворов системы CdTe—MnTe—MgTe по указанным выше разрезам. Синтез проводился в тиглях из стеклоглерода, находящихся в эвакуированных кварцевых ампулах.

Для выращивания монокристаллов твердых растворов, плавящихся ниже 1100 °С, мы использовали метод Бриджмена при скорости протягивания 1.75 мм/ч, а для более тугоплавких — метод зонной плавки в градиенте температуры с использованием теллура в качестве растворителя.

Из средней части полученных слитков выкалывались подлежащие исследованию монокристаллические блоки, химический состав которых контролировался