

Температурные квантовые осцилляции намагниченности в антиферромагнитных полуметаллах

© В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисавили

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

(Поступила в Редакцию 17 февраля 1998 г.)

Показано, что в полуметаллических низкотемпературных антиферромагнетиках, находящихся в квантующем магнитном поле, осциллирующая по H часть зонной намагниченности M_z может немонотонным образом зависеть от температуры. Такое нефермижидкостное поведение будет экспериментально проявляться в виде температурных квантовых осцилляций (ТКО) намагниченности, когда при возрастании температуры вместо обычного монотонного спада возникает осцилляционный спад. Показано, что намагниченность от отдельной спиновой электронной (или дырочной) подзоны как функция T^2 имеет вид слабозатухающих периодических осцилляций. Этот результат позволяет развить эффективную методику исследования электронной структуры антиферромагнитных полуметаллов на основе изучения ТКО. Проведенные расчеты показывают, что ТКО могут наблюдаться, например, в цериевых монониктидах CeP, CeAs, являющихся сильнокоррелированными антиферромагнитными компенсированными полуметаллами с низкими температурами Нееля.

Изучение электронного строения сильнокоррелированных систем (СКС) активизировало постановку экспериментальных исследований эффекта де Гааза-ван Альфена (дГВА) в соединениях со смешанной валентностью, в тяжелых фермионах [1–3], высокотемпературных сверхпроводниках [4,5]. К классу СКС относят соединения с низкой концентрацией носителей тока. Яркими представителями веществ такого типа являются цериевые монониктиды CeX, X = Sb, Bi, As, P [6–8]. Наличие дальнего антиферромагнитного порядка в этих соединениях привело к созданию концепции магнитополяронных жидкости и кристалла [9] для описания основного состояния электронной системы. Это позволило объяснить особенности эффекта дГВА в CeAs [10].

Наряду с обычным эффектом дГВА, заключающемся, как известно, в осциллирующей зависимости намагниченности зонных носителей тока от магнитного поля, недавно [11] были экспериментально исследованы осцилляции намагниченности нового типа. Они заключались в немонотонной зависимости намагниченности при изменении температуры. Поэтому их назвали температурными квантовыми осцилляциями (ТКО). В качестве объекта исследования был выбран вырожденный магнитный полупроводник HgCr₂X₄ n -типа. Теоретическое рассмотрение ТКО, проведенное в [12], показало, что существенными факторами, определяющими возможность наблюдения ТКО, являются наличие сильных одноузельных корреляций, магнитного упорядочения и существование s – d -обменной связи между локализованными и коллективизированными электронами. Главными источниками движения уровней Ландау при изменении температуры являлись s – d -обменное взаимодействие, а также изменение средней намагниченности. Поскольку же температура Кюри достаточно велика ($T_c = 130$ К), много всплесков намагниченности (прежде чем осцилляции успевают затухнуть) наблюдать не удалось.

Очевидно, что для лучшего наблюдения ТКО следует использовать вещества с низкими температурами магнитного упорядочения ($T_c \sim 1$ – 10 К). В этом случае на небольшом температурном интервале уменьшение спонтанной намагниченности будет достаточно сильным, а число всплесков ТКО большим. В этом отношении весьма перспективными представляются монониктиды церия. Для них $T_N \simeq 7$ К, и эффект дГВА наблюдается достаточно хорошо. Поскольку же данные соединения обладают антиферромагнитным упорядочением, а в сильном магнитном поле возникает скос антиферромагнитных подрешеток, актуальным представляется рассмотрение ТКО в антиферромагнитных полуметаллах при учете этого скоса.

В настоящей работе теоретически рассмотрены температурные квантовые осцилляции намагниченности в антиферромагнетиках в условиях, когда квантующее магнитное поле вызывает перестройку основного состояния. При учете сильного скоса антиферромагнитных подрешеток в спин-волновом приближении исследована низкотемпературная термодинамика локализованной подсистемы и определены зависимости магнитных параметров порядка от магнитного поля и температуры. Показано, что даже в области низких температур, где спин-волновое приближение является оправданным, изменение температуры приводит к большому числу всплесков в осцилляционной зависимости намагниченности зонных электронов. Проанализированы вклады от отдельных электронных и дырочных спиновых подзон в ТКО и установлено, что эти вклады являются слабозатухающими периодическими по T^2 функциями. Отмечено, что данное обстоятельство позволяет применить Фурье-анализ при исследовании ТКО и развить эффективную методику тестирования электронной структуры антиферромагнитных полуметаллов.

1. Гамильтониан модели и спектр фермиевских квазичастиц

Перед рассмотрением ТКО в антиферромагнитных полуметаллах типа CeP, CeAs и CeSb напомним общие закономерности их электронного строения. Монониктиды церия обладают кубической структурой типа NaCl. В *X*-точках зоны Бриллюэна находятся низкоэнергетичные состояния зоны проводимости. Потолок валентной зоны расположен в Γ -точке. Незначительное перекрытие этих зон обуславливает полуметаллические свойства обсуждаемых соединений. При низких температурах ($T_N = 7$ и 10.5 K для CeAs и CeP соответственно) в подсистеме локализованных электронных состояний устанавливается дальний антиферромагнитный порядок. В присутствии магнитного поля H происходит скос антиферромагнитных подрешеток, влияющий на энергетический спектр носителей тока посредством взаимодействия между электронами локализованных и коллективизированных состояний. Главные особенности рассмотренных взаимодействий моделируются следующим гамильтонианом антиферромагнитного полуметалла:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_{\lambda f f' \sigma} \left\{ t_{ff'}^\lambda - \delta_{ff'} (2\sigma \mu_B H + \mu_\lambda) \right\} c_{\lambda f \sigma}^+ c_{\lambda f' \sigma} \\
 & + \sum_{\lambda g g' \sigma} \left\{ t_{gg'}^\lambda - \delta_{gg'} (2\sigma \mu_B H + \mu_\lambda) \right\} c_{\lambda g \sigma}^+ c_{\lambda g' \sigma} \\
 & + \sum_{\lambda f g \sigma} t_{fg}^\lambda \left(c_{\lambda f \sigma}^+ d_{\lambda g \sigma} + d_{\lambda g \sigma}^+ c_{\lambda f \sigma} \right) + \sum_{fg} K_{fg} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\mathbf{S}_g \mathbf{S}_{g'}) \\
 & - \sum_f g \mu_B H S_f^z - \sum_g g \mu_B H S_g^z \\
 & - \sum_{f\lambda} J_\lambda (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{f\lambda}) - \sum_{g\lambda} J_\lambda (\mathbf{S}_g \boldsymbol{\sigma}_{g\lambda}). \tag{1}
 \end{aligned}$$

Здесь первые три слагаемых описывают свободную электрон-дырочную подсистему в представлении Ванье. Для описания эффектов, связанных с антиферромагнитным порядком в локализованной подсистеме, проведено обычное разбиение на две подрешетки: *F* и *G*. Фермиевский оператор $c_{\lambda f \sigma}$ реализует процесс уничтожения электрона при $\lambda = e$ или дырки при $\lambda = h$ на узле f с проекцией спинового момента σ ($\sigma = \pm 1/2$). Оператор $d_{\lambda g \sigma}$ соответствует такому же процессу, но для узла g из подрешетки *G*. Для электронов $\mu_e = \mu$, а для дырок $\mu_h = -\mu$. Следующая группа операторов в (1) описывает гейзенберговское взаимодействие между спиновыми моментами локализованных электронных состояний, приводящее к антиферромагнитному упорядочению, а также взаимодействие спиновых моментов с магнитным полем H . При этом учитываются как взаимодействия

внутри подрешеток, так и взаимодействие между спиновыми моментами из *F*- и *G*-подрешеток. Наконец, последние два слагаемых учитывают *s*-*f*-обменную связь между спиновыми моментами локализованных и коллективизированных состояний.

Энергетический спектр электронов и дырок в скошенной антиферромагнитной фазе удобно находить, предварительно перейдя к локальным системам координат для *F*- и *G*-подрешеток. Процедура перехода к локальным координатам и получения спектра электронов и дырок в неколлинеарной геометрии задачи подробно описана в [13]. Поэтому здесь мы приведем лишь окончательное выражение для нижних ветвей спектра для электронов ($\lambda = e$) и дырок ($\lambda = h$)

$$\begin{aligned}
 E_{\mp}^\lambda(\mathbf{k}) = & \varepsilon^\lambda + t_{\mathbf{k}} - \left\{ \left[\Gamma_{\mathbf{k}}^\lambda \mp \left(\mu_B H + \cos \theta \frac{J_\lambda R}{2} \right) \right]^2 \right. \\
 & \left. + \sin^2 \theta \left(\frac{J_\lambda R}{2} \right)^2 \right\}^{1/2}, \tag{2}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^\lambda + t_{\mathbf{k}}^\lambda = & \sum_{f'} t_{ff'}^\lambda \exp\{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})\}, \\
 \Gamma_{\mathbf{k}}^\lambda = & \sum_g t_{fg}^\lambda \exp\{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g)\}.
 \end{aligned}$$

Угол θ определяет ориентацию равновесной намагниченности подрешетки R по отношению к оси Oz , вдоль которой направлено внешнее магнитное поле H . При $H = 0$ $\theta = \pi/2$, а в точке спин-флип-перехода $\theta = 0$. Нас интересуют достаточно сильные магнитные поля, когда скос антиферромагнитных подрешеток большой ($\theta \geq \pi/4$). В этом случае нижние энергетические состояния обладают энергиями, определяемыми более простыми выражениями

$$\begin{aligned}
 E_{\mp}^e(\mathbf{k}) = & \mp \left(\mu_B H + \cos \theta \frac{J_e R}{2} \right) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e}, \\
 E_{\mp}^h(\mathbf{k}) = & -\Delta \mp \left(\mu_B H + \cos \theta \frac{J_h R}{2} \right) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h}, \tag{3}
 \end{aligned}$$

в которых эффективные массы связаны с параметрами перескока следующими соотношениями:

$$\frac{\hbar^2}{2m_\lambda} = -\frac{1}{6} \left\{ \sum_g t_{fg}^\lambda (\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g)^2 + \sum_{f'} t_{ff'}^\lambda (\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})^2 \right\}. \tag{4}$$

Здесь принята во внимание кубическая структура решетки. При записи (3) выбор отсчета энергии сделан так, чтобы в парамагнитной фазе при $H = 0$ дно зоны проводимости соответствовало нулевому значению энергии. Тогда степень перекрытия валентной зоны с зоной проводимости определяется параметром $\Delta > 0$. Для определения зависимости рассмотренного энергетического спектра от температуры необходимо исследовать низкотемпературную термодинамику системы и вычислить температурную зависимость $R \cos \theta$ при неколлинеарной геометрии задачи.

2. Температурная эволюция намагниченности подрешетки

Параметры, определяющие магнитную структуру локализованной подсистемы (R и $\cos \theta$), могут быть вычислены в нашем случае на основе обменного гамильтониана. В локальных координатах этот гамильтониан получается путем поворота в спиновом пространстве на угол θ для F -подрешетки и на угол $-\theta$ для G -подрешетки. Тогда (подробности см. в [13])

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

Для рассмотрения низкотемпературной термодинамики в локализованной подсистеме воспользуемся представлением Дайсона–Малеева

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S} (a_f - a_f^+ a_f), & S_f^- &= \sqrt{2S} a_f^+, \\ S_f^z &= S - a_f^+ a_f, & S_g^+ &= \sqrt{2S} (b_g - b_g^+ b_g), \\ S_g^- &= \sqrt{2S} b_g^+, & S_g^z &= S - b_g^+ b_g, \end{aligned} \quad (6)$$

где a_f (a_f^+) — операторы уничтожения (рождения) возбуждения на узле f для подрешетки F . Для G -подрешетки соответствующие операторы обозначены посредством b_g (b_g^+).

Подставляя выражения (6) в гамильтониан (5), проводя преобразование Фурье и поступая обычным образом [14], получим гамильтониан в представлении вторичного квантования. Квадратичная форма определяется выражением

$$\begin{aligned} H_{mz}^{(2)} = & \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}) + \nu_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}}) \right. \\ & \left. + \xi_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}}^+ b_{-\mathbf{q}}^+ + b_{-\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}) \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{q}} &= g\mu_B H \cos \theta - SK_0 \cos 2\theta + S(I_0 - I_{\mathbf{q}}), \\ \nu_{\mathbf{q}} &= SK_{\mathbf{q}} \cos^2 \theta, & \xi_{\mathbf{q}} &= -SK_{\mathbf{q}} \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь Фурье-образы обменных интегралов определены в виде

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{q}} &= \sum_g K_{fg} \exp \left\{ -i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) \right\}, \\ I_{\mathbf{q}} &= \sum_{f'} I_{ff'} \exp \left\{ -i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'}) \right\}. \end{aligned}$$

При записи гамильтониана в представлении операторов $a_{\mathbf{q}}$, $a_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ и $b_{\mathbf{q}}^+$ слагаемые, имеющие первую степень по этим операторам, приравняем к нулю и получим условие для равновесного угла θ

$$\cos \theta = q\mu_B H / 2SK_0. \quad (9)$$

Для нахождения равновесной намагниченности

$$R = \frac{1}{N} \sum_g \langle S_g^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \rangle \quad (10)$$

воспользуемся идеологией двухвременных температурных функций Грина [14,15]. С этой целью введем в рассмотрение четыре функции

$$\begin{aligned} \langle\langle b_{\mathbf{q}}(t) | b_{\mathbf{q}}^+(t') \rangle\rangle, & \quad \langle\langle a_{\mathbf{q}}(t) | b_{\mathbf{q}}^+(t') \rangle\rangle, \\ \langle\langle b_{-\mathbf{q}}^+(t) | b_{\mathbf{q}}^+(t') \rangle\rangle, & \quad \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^+(t) | b_{\mathbf{q}}^+(t') \rangle\rangle. \end{aligned}$$

Замкнутая система уравнений для Фурье-образов этих функций записывается в виде

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{\mathbf{q}}) \langle\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} &= 1 + \nu_{\mathbf{q}} \langle\langle a_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} + \xi_{\mathbf{q}} \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega}, \\ (\omega - \varepsilon_{\mathbf{q}}) \langle\langle a_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} &= \nu_{\mathbf{q}} \langle\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} + \xi_{\mathbf{q}} \langle\langle b_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega}, \\ (\omega + \varepsilon_{\mathbf{q}}) \langle\langle b_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} &= -\nu_{\mathbf{q}} \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} - \xi_{\mathbf{q}} \langle\langle a_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega}, \\ (\omega + \varepsilon_{\mathbf{q}}) \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} &= -\nu_{\mathbf{q}} \langle\langle b_{-\mathbf{q}}^+ | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} - \xi_{\mathbf{q}} \langle\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (11)$$

Из этой системы получаем дисперсионное уравнение, определяющее энергетический спектр элементарных возбуждений,

$$\begin{vmatrix} \omega - \varepsilon_{\mathbf{q}} & -\nu_{\mathbf{q}} & -\xi_{\mathbf{q}} & 0 \\ -\nu_{\mathbf{q}} & \omega - \varepsilon_{\mathbf{q}} & 0 & -\xi_{\mathbf{q}} \\ \xi_{\mathbf{q}} & 0 & \omega + \varepsilon_{\mathbf{q}} & \nu_{\mathbf{q}} \\ 0 & \xi_{\mathbf{q}} & \nu_{\mathbf{q}} & \omega + \varepsilon_{\mathbf{q}} \end{vmatrix} = 0. \quad (12)$$

Решая уравнение (12), находим две ветви энергетического спектра

$$\begin{aligned} \omega_1(\mathbf{q}) &= \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \nu_{\mathbf{q}})^2 - \xi_{\mathbf{q}}^2}, \\ \omega_2(\mathbf{q}) &= \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{q}} + \nu_{\mathbf{q}})^2 - \xi_{\mathbf{q}}^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Принимая во внимание соотношения (8) и (9), выражения для спектра в неколлинеарной фазе, когда $\theta > 0$, можно записать в виде

$$\begin{aligned} \omega_1(\mathbf{q}) &= S \{ (I_0 - I_{\mathbf{q}} + K_0 - K_{\mathbf{q}}) (I_0 - I_{\mathbf{q}} + K_0 - K_{\mathbf{q}} \cos 2\theta) \}^{1/2}, \\ \omega_2(\mathbf{q}) &= S \{ (I_0 - I_{\mathbf{q}} + K_0 + K_{\mathbf{q}}) (I_0 - I_{\mathbf{q}} + K_0 + K_{\mathbf{q}} \cos 2\theta) \}^{1/2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Видно, что нижняя ветвь является бесщелевой в соответствии с теорией Голдстоуна. Обменный гамильтониан инвариантен относительно вращений на любой угол вокруг оси Oz , тогда как основное состояние системы в скошенной фазе такой инвариантностью не обладает.

Этим объясняется присутствие в системе голдстоуновского бозона.

Вторая ветвь спектра является активационной. Энергетическая щель этой ветви определяется выражением

$$\Delta = \omega_1(0) = 2SK_0 \cos \theta = g\mu_B H. \quad (15)$$

В правой окрестности спин-флип-перехода, когда $\theta = 0$ и подсистема локализованных спинов переходит в коллинеарную фазу, две ветви спектра описываются выражениями

$$\omega_{1,2}(\mathbf{q}) = g\mu_B H + S(I_0 - I_{\mathbf{q}}) - S(K_0 \pm K_{\mathbf{q}}). \quad (16)$$

Решая систему уравнений (11), находим функцию Грина

$$\langle\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{[(\omega + \varepsilon_{\mathbf{q}})^2 - v_{\mathbf{q}}^2](\omega - \varepsilon_{\mathbf{q}}) + \xi_{\mathbf{q}}^2(\omega + \varepsilon_{\mathbf{q}})}{[\omega^2 - \omega_1^2(\mathbf{q})][\omega^2 - \omega_2^2(\mathbf{q})]}, \quad (17)$$

которая позволяет получить искомое выражение для равновесной намагниченности

$$R = S - \delta S(0) - \delta S(T), \quad (18)$$

где $S(0)$ — слагаемое, обуславливающее уменьшение намагниченности за счет нулевых квантовых колебаний,

$$\delta S(0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}}}{\omega_1(\mathbf{q})} + \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}}{\omega_2(\mathbf{q})} \right\}. \quad (19)$$

Температурное уменьшение намагниченности описывается выражением

$$\delta S(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}}}{\omega_1(\mathbf{q})} n_{1\mathbf{q}} + \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}}}{\omega_2(\mathbf{q})} n_{2\mathbf{q}} \right\}, \quad (20)$$

где

$$n_{i\mathbf{q}} = \{\exp\{\omega_i(\mathbf{q})/T\} - 1\}^{-1}, \quad i = 1, 2.$$

Эти формулы будут использованы при изучении температурной зависимости зонной намагниченности в квантовом магнитном поле.

3. Температурные квантовые осцилляции

В сильном магнитном поле, как известно [16], происходит квантование Ландау. Для нахождения термодинамического потенциала электронов и дырок, спектр которых определяется выражением (3), достаточно перейти в представление Ландау и просуммировать по квантовым числам этого представления [17,18]. Тогда осциллирующая часть намагниченности от коллективизированных электронов определяется выражением

$$M_{\sim}^e = - \frac{T \sqrt{\hbar \omega_c^e} (m_e)^{3/2}}{2\pi \hbar^3 H} \sum_{\sigma} \tilde{\mu}_{e\sigma} \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\sqrt{n}} \frac{\sin \{2\pi n \tilde{\mu}_{e\sigma} / \hbar \omega_c^e + \phi_{e\sigma}\}}{\sin h \{2\pi^2 n T / \hbar \omega_c^e\}}, \quad (21)$$

где

$$\phi_{e\sigma} = 2\pi \sigma m_e / m_0 - \pi/4,$$

m_0 — масса свободного электрона, $\omega_c^e = eH/m_e c$ — циклотронная частота для электронов проводимости. Существенная особенность приведенного выражения для M_{\sim}^e заключается в том, что вместо слабо зависящего от температуры и магнитного поля химического потенциала в обычном Ферми-жидкостном случае в (21) входит перенормированный химический потенциал

$$\tilde{\mu}_{e\sigma} = \mu + \sigma(2\mu_B H + J_e R \cos \theta), \quad (22)$$

который вследствие слагаемого $\sim R \cos \theta$ может меняться достаточно сильно при изменении температуры и магнитного поля, если параметр s - f -обменного взаимодействия немал. Сильная T -зависимость $\tilde{\mu}_{e\sigma}$ как раз и лежит в основе проявления ТКО в рассматриваемых антиферромагнитных полуметаллах. Прежде чем перейти к непосредственному анализу ТКО, отметим, что вклад в осциллирующую часть намагниченности от дырок определяется выражением, аналогичным (21), если в нем сделать замену индекса электронов e на индекс h . При этом

$$\tilde{\mu}_{h\sigma} = -\mu + \Delta + \sigma(2\mu_B H + J_h R \cos \theta). \quad (23)$$

При низких концентрациях носителей тока и относительно больших значениях расщепленности электронных и дырочных спиновых подзон фермиевские квазичастицы располагаются в пределах спиновых подзон с какой-либо одной спиновой поляризацией. Такая ситуация реализуется при выполнении неравенств

$$n < \frac{4}{3} \frac{(m_e \Delta_e)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad n < \frac{4}{3} \frac{(m_h \Delta_h)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (24)$$

где n — концентрация электронов (и дырок) в расчете на единицу объема, а

$$\Delta_e = \left| \mu_B H + \frac{1}{2} J_e R \cos \theta \right|, \quad \Delta_h = \left| \mu_B H + \frac{1}{2} J_h R \cos \theta \right|. \quad (25)$$

Тогда из условия электронейтральности в главном приближении находим

$$\tilde{\mu}_e = \frac{m_h}{m_e + m_h} \Delta_{eh}, \quad \tilde{\mu}_h = \frac{m_e}{m_e + m_h} \Delta_{eh},$$

$$\Delta_{eh} = \Delta + \frac{R \cos \theta}{2} (|J_e| + |J_h|) + \mu_B H (\text{sign}(J_e) + \text{sign}(J_h)). \quad (26)$$

Приведенные выражения для энергий Ферми электронов и дырок определяют их сильные температурные и полевые зависимости. При этом абсолютные изменения этих величин зависят, в частности, от отношения эффективных масс. Так, например, в случае тяжелых дырок, когда $m_h \gg m_e$, существенно меняться может только электронная энергия Ферми. В этом случае

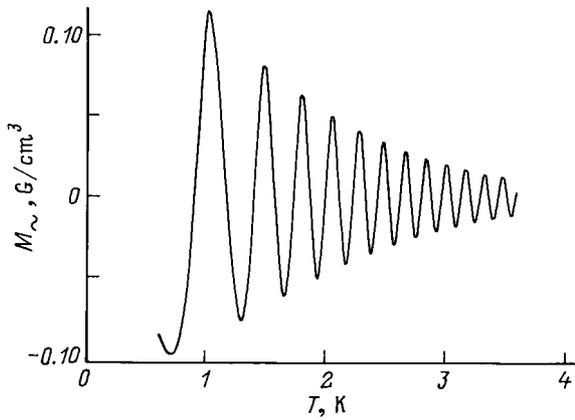


Рис. 1. ТКО антиферромагнитного полуметалла. Заполнены одна электронная и одна дырочная подзоны.

ТКО будут определяться только подсистемой электронов проводимости.

Для проведения конкретных расчетов воспользуемся формулами (9), (17)–(20), (23). На рис. 1 представлен численный расчет ТКО, проведенный для антиферромагнитного полуметалла при эквивалентных электронной и дырочной зонах. При этом выбирались следующие значения параметров системы: $J_e = J_h = 0.2$ eV, $m_e = m_h = m_0$, $T_N = 10$ К. Концентрация зонных носителей соответствовала полуметаллическому случаю и равнялась 0.035 в расчете на один узел. Вычисления $M_{\sim}(T)$ были проведены в интервале температур $T = 0.5 - 3.5$ К, где, как уже отмечалось, спин-волновое приближение оправдано. Из рис. 1 хорошо видно, что при указанных параметрах системы имеется значительное число температурных осцилляций.

Проанализируем представленные на рис. 1 результаты по ТКО. В спин-волновом приближении температурное уменьшение намагниченности описывается формулой

$$\delta S(T) = \left(\frac{b^3}{48\alpha} \right) \left(\frac{1}{\sin \theta} \right) \left(\frac{1}{2K_0\alpha} \right)^{1/2} \left(\frac{T}{S} \right)^2, \quad (27)$$

где b — параметр магнитной ячейки в антиферромагнитной фазе, а спин-волновая жесткость

$$\alpha = \frac{1}{6} \left\{ \sum_f I_{0f} \mathbf{R}_f^2 + \sum_g K_{0g} \mathbf{R}_g^2 \right\}. \quad (28)$$

В приближении ближайших соседей, когда $\alpha = K_0 b^2 / 8$,

$$\delta S(T) = \left(\frac{1}{3 \sin \theta} \right) \left(\frac{T}{K_0 S} \right)^2.$$

Эти соотношения показывают, что при изменении температуры набег фазы в аргументе синуса в (21)

определяется выражением

$$\frac{\delta \tilde{\mu}_e(T)}{\hbar \omega_e^e} = - \left(\frac{g}{2} \right) \left(\frac{m_{eh}}{m_0} \right) \left(\frac{|J_e| + |J_h|}{4SK_0} \right) \times \left(\frac{1}{3 \sin \theta} \right) \left(\frac{T}{K_0 S} \right)^2 = \frac{\delta \tilde{\mu}_h(T)}{\hbar \omega_e^h}, \quad (29)$$

где m_{eh} — приведенная электрон-дырочная масса, $m_{eh} = m_e m_h / (m_e + m_h)$. Из выражения (29) следует важный для практического использования ТКО вывод. Если построить осциллирующую при изменении температуры часть намагниченности как функцию T^2 , то получится график "затухающих", но уже периодических колебаний. На рис. 2 представлены результаты такого построения при использовании тех же самых данных, что и для рис. 1. Видно, что в новых координатах зависимость (без учета спада амплитуды колебаний) действительно является периодической по T^2 -функцией. Небольшие отклонения от отмеченной периодичности связаны как с вкладом второй ветви спин-волновых возбуждений, так и с наличием эффектов зоны Бриллюэна, которые при получении выражения (27) не учитывались.

Из формулы для набег фазы следует, что период осцилляций по T^2 определяется выражением

$$P = \left(\frac{2 \sin \theta}{g} \right) \left(\frac{m_0}{m_{eh}} \right) \left(\frac{12SK_0}{|J_e| + |J_h|} \right) \left(\frac{K_0 S}{k_B} \right)^2, \quad (30)$$

где k_B — постоянная Больцмана. Приведенная формула позволяет по результатам экспериментальных исследований ТКО (после построения графика осциллирующей части намагниченности в переменных (M_{\sim}, T^2) и измерения периода осцилляций P) получить важное соотношение между параметрами электронной структуры рассматриваемого антиферромагнитного полуметалла.

Отметим также две особенности, которые непосредственно видны из (30). Во-первых, период осцилляций при прочих равных условиях уменьшается как K_0^3 при уменьшении обменного интеграла. Учитывая, что

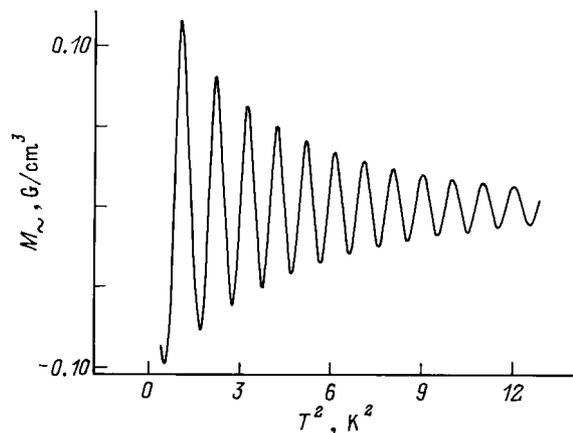


Рис. 2. T^2 -зависимость ТКО антиферромагнитного полуметалла.

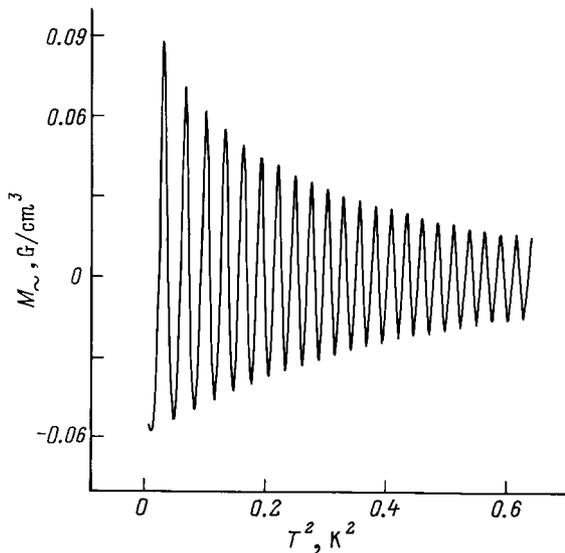


Рис. 3. T^2 -зависимость ТКО низкотемпературного антиферромагнитного полуметалла.

температурная область применимости спин-волнового приближения уменьшается линейно (как и сама температура Нееля) при уменьшении K_0 , приходим к выводу о быстром нарастании числа всплесков температурных квантовых осцилляций при рассмотрении антиферромагнитных полуметаллов с меньшими температурами Нееля. Эта особенность продемонстрирована на рис. 3. При расчетах графика ТКО, представленного на этом рисунке, температура Нееля выбиралась равной 3 К (вместо 10 К, как в предыдущих случаях), а все остальные характерные параметры оставались неизменными.

Вторая особенность связана с зависимостью периода ТКО от скоса антиферромагнитных подрешеток. При приближении к точке спин-флип-перехода период осцилляций уменьшается по закону $\sim \sin \theta$. Тогда, измеряя периоды P_1 и P_2 осцилляций при двух значениях внешнего магнитного поля $H_1 < H_2 < H_c$, можно получить значение для поля спин-флип-перехода по простой формуле

$$H_c^2 = \frac{(P_1 H_2)^2 - (P_2 H_1)^2}{(P_1 - P_2)(P_1 + P_2)}. \quad (31)$$

Более сложная ситуация возникает в случае, когда фермиевские квазичастицы заполняют подзоны, обладающие противоположной поляризацией по спиновому моменту. Пусть, например, электроны заполняют обе спиновые подзоны, тогда как дырки по-прежнему размещены только в нижней спиновой подзоне. Это имеет место при выполнении следующих условий:

$$\frac{4}{3} \frac{(m_e \Delta_e)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} < n < \frac{4}{3} \frac{(m_h \Delta_h)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (32)$$

тогда из решения уравнения электронейтральности нетрудно найти выражения, определяющие температурные зависимости энергий Ферми для двух электронных и

одной дырочной зон. Вычисляя обычным образом температурные набег фаз, получаем три периода осцилляций по T^2

$$P_+^e = \left(\frac{2 \sin \theta}{g} \right) \left(\frac{m_0}{m_e} \right) \left(\frac{12SK_0 (g_+^e + g_-^e + g_h)}{2g_-^e |J_e| + g^h (|J_e| + |J_h|)} \right) \left(\frac{K_0 S}{k_B} \right)^2,$$

$$P_-^e = \left(\frac{2 \sin \theta}{g} \right) \left(\frac{m_0}{m_e} \right) \left(\frac{12SK_0 (g_+^e + g_-^e + g_h)}{2g_+^e |J_e| - g^h (|J_h| - |J_e|)} \right) \left(\frac{K_0 S}{k_B} \right)^2,$$

$$P^h = \left(\frac{2 \sin \theta}{g} \right) \left(\frac{m_0}{m_h} \right) \times \left(\frac{12SK_0 (g_+^e + g_-^e + g_h)}{g_+^e (|J_e| + |J_h|) + g_-^e (|J_h| - |J_e|)} \right) \left(\frac{K_0 S}{k_B} \right)^2, \quad (33)$$

где g_+^e, g_-^e — плотности электронных состояний на поверхности Ферми для двух спиновых подзон, g^h — плотность дырочных состояний на поверхности Ферми при $T = 0$. При относительно небольшой разнице эффективных масс у электронов и дырок амплитуды осцилляций будут совпадать по порядку величины. В этом случае результирующая намагниченность $M_~$ получается в результате сложения трех периодических функций и поэтому является, вообще говоря, непериодической по T^2 -функцией. Такая ситуация продемонстрирована на рис. 4. При расчетах эффективные массы электронов и дырок выбирались разными, причем $m_e = m_0/2, m_h = m_0$. Концентрация электронов (и дырок) в расчете на один узел выбиралась равной 0.06. Остальные параметры были такими же, как и при расчете ТКО, представленных на рис. 3. Графики $a-c$ показывают

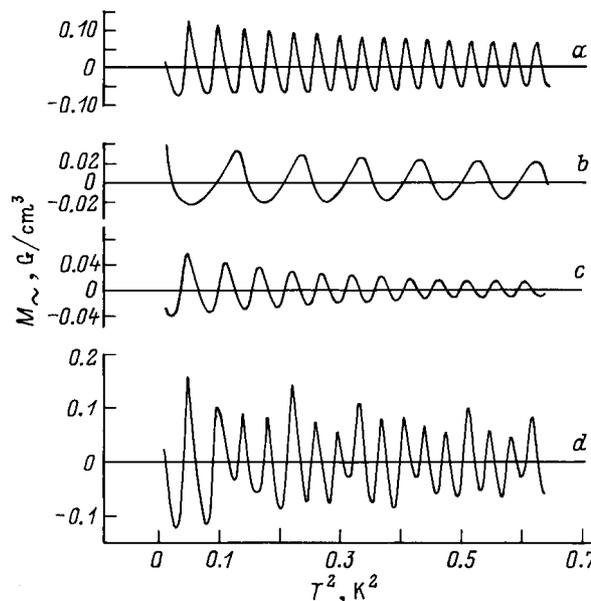


Рис. 4. ТКО антиферромагнитного полуметалла. Заполнены две электронные и одна дырочная подзоны. $a-c$ — вклады электронных и дырочных подзон, d — суммарная осциллирующая часть намагниченности.

периодические по T^2 ТКО, происходящие от двух электронных и одной дырочной спиновых подзон. Суммарная же осциллирующая часть намагниченности представлена нижним графиком этого рисунка. Именно такой вид ТКО будет наблюдаться экспериментально. Поэтому особое значение приобретает основанная на полученных результатах предлагаемая методика обработки результатов экспериментальных исследований. Действительно, построение зависимости M_{\sim} как функции T^2 с последующим Фурье-анализом позволяет выделить периодические вклады от квазичастиц, находящихся в различных спиновых подзонах. После определения периода осцилляций для различных составляющих и сравнения со значениями величин, определяемых формулой (33), получаем численные соотношения для параметров электронной структуры.

Аналогичные результаты могут быть легко получены по аналогии и в том случае, когда и электроны, и дырки заполняют обе спиновые подзоны. При этом осциллирующая намагниченность складывается, вообще говоря, из четырех периодических по T^2 функций. Предлагаемая методика обработки экспериментальных данных оказывается эффективной и в этом случае. Конкретные выражения для четырех периодов осцилляций из-за экономии места мы здесь не проводим.

В заключение остановимся на основных итогах проведенного исследования. Главный вывод работы заключается в доказательстве тезиса о возможности существования осцилляций нового типа — температурных квантовых осцилляций — в антиферромагнитных полуметаллах. Условиями отчетливого экспериментального наблюдения ТКО являются: а) относительно низкие температуры Нееля ($T_N \leq 1-10$ К); б) существование обменной связи между спиновыми моментами носителей тока и локализованных электронов; в) достаточно хорошее качество образцов. В настоящее время подбор твердотельных соединений, удовлетворяющих перечисленным требованиям, затруднений не вызывает. В качестве примера укажем на уже упоминавшиеся монопниктиды церия. Эти компенсированные полуметаллы обладают антиферромагнитным порядком с температурой Нееля $T_N \sim 5-7$ К. Высокое качество монокристаллов подтверждается, в частности, интенсивными сигналами эффекта дГВА [19] в CeAs. Учитывая, что порядок величины амплитуды ТКО тот же самый, что и в эффекте дГВА, можно надеяться на хорошее наблюдение ТКО в отмеченных антиферромагнетиках.

Следует подчеркнуть, что исследование ТКО представляет интерес не только с точки зрения обнаружения самого эффекта, но и в плане получения дополнительной информации об электронной структуре. Предсказанные периодические по T^2 вклады в ТКО от отдельных спиновых подзон наделяют исследования по ТКО большой информационной емкостью, в значительной мере аналогичной по возможностям обычному эффекту дГВА. Существенно, что период ТКО в отличие от периода осцилляций дГВА легко изменяется внешним магнитным

полем. Это обеспечивает дополнительные экспериментальные средства для тестирования электронной структуры с помощью ТКО.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 96-02-16075), а также Красноярского краевого фонда науки (грант № 6F0150).

Список литературы

- [1] P.H.P. Reinders, M. Springford, P.T. Coleridge et al. Phys. Rev. Lett. **57**, 1631 (1986).
- [2] L. Taillefer, G.G. Lonzarich. Phys. Rev. Lett. **60**, 1570 (1988).
- [3] M. Hunt, P. Meeson, P.A. Probst et al. J. Phys.: Condens. Matter **2**, 6859 (1990).
- [4] C.M. Fowler, B.L. Freeman, W.L. Hults, J.C. King, F.M. Mueller, J.L. Smith. Phys. Rev. Lett. **68**, 534 (1992).
- [5] А.И. Быков, А.И. Головашкин, М.И. Долотенко и др. Письма в ЖЭТФ **61**, 101 (1995).
- [6] H. Takahashi, T. Kasuya. J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **18**, 2697 (1985).
- [7] N. Mori, Y. Okayama, H. Takahashi, Y. Haga, T. Suzuki. Jpn. J. Appl. Phys. Ser. **8**, 182 (1993).
- [8] M. Date, A. Yamagishi, H. Hori, K. Sugiyama. Jpn. J. Appl. Phys. Ser. **8**, 195 (1993).
- [9] T. Kasuya, T. Suzuki, Y. Haga. J. Phys. Soc. Jap. **62**, 2549 (1993).
- [10] T. Kasuya. J. Phys. Soc. Jap. **64**, 1453 (1995).
- [11] С.Г. Овчинников, В.К. Чернов, А.Д. Балаев и др. Письма в ЖЭТФ **64**, 620 (1995).
- [12] В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили. ЖЭТФ **111**, 654 (1997).
- [13] В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, ФТТ **39**, 2, 204 (1997).
- [14] А.И. Ахиезер, В.Г. Барьяхтар, С.П. Пелетминский. Спиновые волны. Наука, М. (1967). 368 с.
- [15] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 528 с.
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989). 768 с.
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). 584 с.
- [18] И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов. Электронная теория металлов. Наука, М. (1971). 416 с.
- [19] N. Takeda, Y.S. Kwon, Y. Haga et al. Physica **B 186-188**, 153 (1993).