*Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 12*

*03,05,11*

# Аномальное влияние внешнего магнитного поля на спиновые флуктуации в магнитных полупроводниках с сильной *pd*-гибридизацией и эффект колоссального магнитосопротивления

© *А.Г. Волков, А.А. Повзнер*

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия
E-mail: agvolkov@yandex.ru

*(Поступила в Редакцию 30 января 2012 г.
В окончательной редакции 26 апреля 2012 г.)*

Эффект колоссального магнитосопротивления в магнитных полупроводниках на основе манганитов лантана исследуется в рамках модели, учитывающей эффекты *pd*-гибридизации и межэлектронных кулоновских корреляций. Рассматривается влияние внешнего магнитного поля на спиновые флуктуации в условиях, когда химический потенциал находится в узкой зоне тяжелых фермионов, которая формируется в гибридизационной щели. Показано, что вблизи точки Кюри вследствие значительного спинового ангармонизма имеет место аномально резкое подавление спиновых флуктуаций магнитным полем, что обусловливает значительный вклад в формирование колоссального отрицательного магнитосопротивления.

Исследованиям фазовых магнитных переходов и спинтронных эффектов в магнитных полупроводниках посвящено большое число теоретических и экспериментальных работ (см., например, [1–7]). Важной нерешенной фундаментальной задачей является исследование причин аномальной взаимосвязи магнитной и электронной подсистем, в частности, для широко используемых в спинтронике манганитов редкоземельных металлов, легированных элементами второй группы. Ярким проявлением этой взаимосвязи является эффект колоссального магнитосопротивления (КМС), наблюдаемый в окрестности магнитного перехода [2–5,7].

Существующие теории КМС магнитных полупроводников основаны на предположении об аномальном изменении вклада в электросопротивление от рассеяния электронов на спиновых неоднородностях [2,3,7]. Считается, что в ферромагнитной области температур в окрестности точки Кюри рассеяние на магнитных неоднородностях, обусловленных примесями (т. е. неоднородностью межузельного обменного взаимодействия), ведет к андерсоновской локализации электронов проводимости, которую характеризует порог протекания [2,7]

$$E_C = \Delta_0 - \Delta_1 (M(T)/M_S)^2, \tag{1}$$

где $M(T)$ и $M_S$ — намагниченность и намагниченность насыщения, $\Delta_0$ и $\Delta_1$ — некоторые константы [2,7]. Однако до сих пор не выяснено, с какими особенностями электронной структуры связано возникновение КМС и формирование столь специфического магнитного беспорядка (см., например, [3,6]).

Применительно к объяснению КМС манганитов редкоземельных металлов вблизи и ниже точки Кюри в работах [4,5] развивалась модель двойного обмена (или *pd*-обмена), приводящего к гибридизации электронных спиновых состояний. Особенности электронной структуры манганитов лантана были изучены в *ab initio* LSDA + U-расчетах [8], в результате которых было показано наличие внутри гибридизационной щели узкой зоны сильно коррелированных электронных состояний. Попытка анализа спиновых флуктуаций в узкой зоне тяжелых фермионов, возникающей вследствие гибридизационных эффектов, была предпринята в [9] при расчетах температурной зависимости электросопротивления в рамках модели с гамильтонианом, учитывающим гибридизацию „почти свободных“ *p*-электронов и *d*-электронов, описываемых гамильтонианом Хаббарда. Однако развитый подход был основан на предположении, что среднеквадратичный магнитный момент, приходящийся на узел, насыщен и не зависит от внешнего магнитного поля. Поэтому роль спиновых флуктуаций в формировании эффекта КМС в гибридизационной модели до сих пор не изучалась. Также остается невыясненным вопрос о причинах аномально сильного влияния внешнего магнитного поля на проводимость при $T > T_C$ [10].

В настоящей работе исследуется влияние внешнего магнитного поля на эффекты гибридизации „почти свободных“ *p*-электронов и сильно коррелированных *d*-электронов, описываемых обобщенной моделью Хаббарда. Исходный гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = H_{0p} + H_{0d} + H_{pd} + H_U + H_h. \tag{2}$$

Здесь $H_{0p} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(p)} p_{\mathbf{k},\sigma}^{+} p_{\mathbf{k},\sigma}$ и $H_{0s} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(d)} d_{\mathbf{k},\sigma}^{+} d_{\mathbf{k},\sigma}$ — гамильтонианы невзаимодействующих *p*- и *d*-электронов; $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(l)} = \varepsilon^{(0,l)} + t_{\mathbf{k}}^{(l)}$ — одноэлектронные энергии *p*- и *d*-состояний ($l = p,\ d$), выражающиеся через Фурье-образ матрицы перескока $t_{\nu\mu}^{(l)}$ и значение энергии одноэлектронного атомного уровня $\varepsilon^{(0,l)}$, отсчитываемого от положения химического потенциала; $p_{\mathbf{k},\sigma}^{+}(p_{\mathbf{k},\sigma})$ и $d_{\mathbf{k},\sigma}^{+}(d_{\mathbf{k},\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) *p*- и

$d$-электрона с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и спином $\sigma$ соответственно; $H_U = U\sum_{\boldsymbol{\nu}} N^{(d)}_{\boldsymbol{\nu}\uparrow} N^{(d)}_{\boldsymbol{\nu}\downarrow}$ — гамильтониан Хаббарда; $N^{(d)}_{\boldsymbol{\nu}}$ — оператор числа $d$-электронов со спином $\sigma = \pm 1$ на узле $\boldsymbol{\nu}$; $H_h = -\sum_{\boldsymbol{\nu}, l=p,d} \mathbf{S}^{(l)}_{\boldsymbol{\nu}}\mathbf{h}$ — гамильтониан зеемановского расщепления; $\mathbf{S}^{(l)}_{\boldsymbol{\nu}}$ — оператор вектора спина на узле $\boldsymbol{\nu}$; $\mathbf{h}$ — напряженность однородного магнитного поля в единицах $2\mu_{\mathrm{B}}$; $\mu_{\mathrm{B}}$ — магнетон Бора;

$$H_{pd} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{k}}(d^+_{\mathbf{k},\sigma} p_{\mathbf{k},\sigma} + p^+_{\mathbf{k},\sigma} d_{\mathbf{k},\sigma}) \tag{3}$$

— гамильтониан, описывающий гибридизационные переходы между $p$- и $d$-состояниями.

Ограничиваясь далее анализом окрестности магнитного фазового перехода, соответствующей режиму крупномасштабных флуктуаций спиновой плотности ($r_t \ll R_C$, где $R_C$ — радиус корреляций спиновой плотности, а $r_t$ — максимальное значение радиуса перескока), найдем статистическую сумму $Z$ и электронные функции Грина.

Прежде чем перейти к мацубаровскому представлению взаимодействия, определим статистическую сумму рассматриваемой модели

$$Z = \mathrm{Sp} T_\tau \sigma(1/T),$$

где $\sigma(1/T) = \mathrm{Sp} T_\tau \exp\big(-\int_0^{1/T} H(\tau)d\tau\big)$ — матрица рассеяния, $T_\tau$ — оператор упорядочения по мацубаровскому времени, $H(\tau)$ — гамильтониан (2) в мацубаровском представлении взаимодействия.

Далее целесообразно слагаемое кулоновского внутриатомного взаимодействия исходного гамильтониана (2) привести к виду, содержащему квадратичные формы по операторам спиновой и зарядовой плотности. Это позволяет при расчете статистической суммы использовать преобразование Лапласа и свести задачу учета межэлектронных внутриатомных корреляций к изучению движения $d$-электронов в стохастических обменных ($\xi$) и зарядовых ($\eta$) полях (см., например, [11,12]). Имеем

$$\exp\left(-\int_0^\beta H_U(\tau)d\tau\right) = \int \exp\left[-\sum_q \left(|\xi_q|^2 + |\eta_q|^2\right)\right.$$
$$\left. + \beta c \sum_q \left(\mathbf{S}^{(d)}_q \boldsymbol{\xi}_q + \frac{i}{2} N^{(d)}_q \eta_q\right)\right](d\boldsymbol{\xi} d\eta),$$

где $\beta = 1/T$; $T$ — температура в энергетических единицах; $c = (UT)^{1/2}$; $\mathbf{S}^{(d)}_q$ и $N^{(d)}_q$ — Фурье-образы операторов (в представлении взаимодействия) вектора спина и числа частиц $d$-электронов; $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$; $\mathbf{q}$ — флуктуационный квазиимпульс; $\omega_{2n} = 2n\pi T$ — мацубаровская Бозе-частота; $\boldsymbol{\xi}_q = \boldsymbol{\xi}^*_{-q} = \boldsymbol{\xi}^{(1)}_q + i\boldsymbol{\xi}^{(2)}_q$, $\boldsymbol{\xi}^{(j)}_q = \xi^{(j)}_q \mathbf{e}^{(j)}_q$; $\mathbf{e}^{(j)}_q$ — случайный единичный вектор, направленный вдоль оси квантования Фурье-образа оператора спина $d$-электронов; индексом $j = 1, 2$ обозначены действительная и мнимая части;

$$\eta_q = \eta^*_{-q} = \eta^{(1)}_q + i\eta^{(2)}_q;$$

$$d\boldsymbol{\xi} d\eta = (d\boldsymbol{\xi}_0 d\eta_0/\pi^2) \prod_{q>0} \prod_{j=1,2} (d\xi^{(j)}_q d\eta^{(j)}_q d\Omega^{(j)}_q/\pi^2),$$

$d\Omega^{(j)}_q$ — элемент телесного угла направлений вектора $\mathbf{e}^{(j)}_q$.

При этом действие стохастических полей „конкурирует" с влиянием внешнего магнитного поля на электронные состояния. В свою очередь гибридизационные эффекты обусловливают воздействие внутренних стохастических полей (описывающих сильные кулоновские корреляции) на $p$-электроны.

Для последовательного учета гибридизационных эффектов при расчете статистической суммы целесообразно сделать два дополнительных линейных преобразования. Первое соответствует повороту локальной системы координат для операторов спиновой плотности и сводится к введению симметризованных ($\alpha = +1$) и антисимметризованных ($\alpha = -1$) по спину электронных состояний

$$a_{\nu,\alpha} = \sqrt{1/2}\big[d_{\nu,\uparrow}(\cos\varphi_V + \alpha e^{-i\varphi_\nu}\sin\varphi_\nu)$$
$$+ d_{\nu,\downarrow}(\alpha e^{-i\varphi}\cos\varphi_\nu - \sin\varphi_\nu)\big],$$
$$b_{\nu,\alpha} = \sqrt{1/2}\big[p_{\nu,\uparrow}(\cos\varphi_V + \alpha e^{-i\varphi_\nu}\sin\varphi_\nu)$$
$$+ p_{\nu,\downarrow}(\alpha e^{-i\varphi}\cos\varphi_\nu - \sin\varphi_\nu)\big],$$

где $\mathrm{tg}\,2\varphi_\nu = \xi^{(z)}_\nu/\xi^{(x)}_\nu$ и $\mathrm{tg}\,\varphi_\nu = \xi^{(y)}_\nu/\sqrt{\xi^{(x)2}_\nu + \xi^{(z)2}_\nu}$.

Второе преобразование диагонализирует гибридизационные слагаемые, возникающие из-за вклада (3) в исходном гамильтониане (2),

$$A^{(-)}_{k,\alpha} = \cos(\vartheta_{k\alpha})b_{k,\alpha} - \sin(\vartheta_{k\alpha})a_{k,\alpha},$$

$$A^{(+)}_{k,\alpha} = \sin(\vartheta_{k\alpha})b_{k,\alpha} + \cos(\vartheta_{k\alpha})a_{k,\alpha}.$$

В результате для матрицы рассеяния получаем:

$$\sigma(1/T) = \int \exp\left(-\beta H(\boldsymbol{\xi}, \eta, \mathbf{h})\right) \exp\left[-\sum_q \left(|\boldsymbol{\xi}_q|^2 + |\eta_q|^2\right)\right.$$
$$\left. - 2\boldsymbol{\xi}_0\mathbf{h}/c - (\mathbf{h}/c)^2\right](d\boldsymbol{\xi} d\eta). \tag{4}$$

Здесь

$$H(\boldsymbol{\xi}, \eta, \mathbf{h}) = \sum_{k,\alpha,\delta} \varepsilon^{(\theta,\alpha)} A^{(\theta)+}_{k,\alpha} A^{(\theta)}_{k,\alpha} + \sum_{k,\alpha,\theta\neq\theta'} \alpha \Xi_{k,\alpha} A^{(\theta)+}_{k,\alpha} A^{(\theta')}_{k,\alpha}$$
$$+ \sum_{\nu,\alpha,\theta} W_{\nu,\alpha} A^{(\theta)+}_{\nu,\alpha} A^{(\theta)}_{\nu,\alpha} \tag{5}$$

— эффективный гамильтониан рассматриваемой системы электронов, движущихся во внешнем магнитном поле и стохастических обменном и зарядовом полях,

$$2\varepsilon_{0,\mathbf{k}}^{(\theta,\alpha)} = \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(d)}(\xi,\eta) + \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p)}(\xi,h) + \theta\left[\left(\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(d)}(\xi,\eta) - \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p)}(\xi,h^2)\right)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2\right]^{1/2},$$

$$\Xi_{k,\alpha} = \sin(2\vartheta_{k,\alpha})\mathbf{h}\boldsymbol{\xi}_0/|\boldsymbol{\xi}|,$$

$W_{\nu,\alpha} = \alpha\delta|\boldsymbol{\xi}_\nu| + i\delta\eta_\nu/2$ — флуктуация в пространстве и времени энергии электрона на узле; $\delta|\boldsymbol{\xi}| = |\boldsymbol{\xi}_\nu| - |\boldsymbol{\xi}| \approx \left(|\boldsymbol{\xi}_\nu|^2 - |\boldsymbol{\xi}|^2\right)/2|\boldsymbol{\xi}|^2$ и $\delta\eta_\nu = \eta_\nu - \eta$ — флуктуации модуля обменного поля и величины зарядового поля, обусловленные пространственно-временны́ми флуктуациями чисел заполнения и модуля вектора спиновой плотности, $k = (\mathbf{k}, \omega_{2n+1})$, $\omega_{2n+1} = (2n+1)\pi T$, $\theta$ — индекс гибридизационной зоны, принимающий значения $+1$ и $-1$ для состояний $A$- и $B$-типа соответственно, $\nu = (\boldsymbol{\nu}, \tau)$, $|\boldsymbol{\xi}|^2 = (1/N_0)\sum\limits_\nu \xi_\upsilon^2$, $\eta = (1/N_0)\sum\limits_\nu \eta_\nu$, $\boldsymbol{\xi}_\nu = c\sum\limits_q \boldsymbol{\xi}_q \exp(iq\nu)$, $\eta_\nu = c\sum\limits_q \eta_q \exp(iq\nu)$, $N_0$ — число узлов кристаллической решетки,

$$\sum_\nu(\ldots) = \sum_\nu T\int_0^\beta(\ldots)d\tau,$$

$$\mathrm{tg}(2\vartheta_{k,\alpha}) = V_k\Big/\left(\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{p}(\xi,h)\right) - \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(d)}(\xi,\eta),$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p)}(\xi,h) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(p)} - \alpha\mathbf{h}\xi_0/|\boldsymbol{\xi}|,$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{d}(\xi,\eta) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(d)} + ic\eta/2 + \alpha c|\boldsymbol{\xi}|.$$

Эффективный гамильтониан (5) содержит существенный нелинейный вклад, обусловленный зеемановским взаимодействием. При этом эффект магнитного поля не сводится к простому расщеплению энергий, а ведет к электронным переходам между $A$- и $B$-состояниями, что можно интерпретировать как подавление магнитным полем гибридизации электронных состояний с разным спином. Выполняя далее в (5) квантово-статистическое усреднение и вычисляя функциональные интегралы методом перевала (см., например, [11]), сведем интегрирование по стохастическим полям к вычислению гауссовых интегралов по флуктуациям этих полей вблизи их наиболее вероятной конфигурации.

Выбирая в качестве перевальных переменных $\xi_q$, $\xi_0$ и $\eta_q$, найдем наиболее вероятную конфигурацию стохастических полей, определяемую наиболее вероятными значениями однородных компонент зарядового ($\eta = \eta_0$) и обменного ($\boldsymbol{\xi}_0$) полей, а также среднего модуля обменного поля на узле ($|\boldsymbol{\xi}| = (1/N_0\sum\limits_\nu)\boldsymbol{\xi}_\nu^2$). Согласно условиям перевала, эти значения оказываются равными

$$|\boldsymbol{\xi}| = (1/N_0)\sum_\nu \boldsymbol{\xi}_\nu^2 = (UM_L)^2, \quad c\eta_0 = -iUn_d,$$

$$c\boldsymbol{\xi}_0 = U\mathbf{M}(T,\mathbf{h}), \tag{6}$$

где $2n_d$ — число $d$-электронов, приходящихся на узел, $\mathbf{M}(T,\mathbf{h})$ — вектор однородной намагниченности, $M_L = [(\mathbf{M}(T,\mathbf{h}) + \mathbf{h}/U)^2 + \langle m^2\rangle]^{1/2}$ — среднеквадратичный магнитный момент на узле, а $(U/T)\langle m^2\rangle$ — средняя полуширина функции распределения флуктуаций модуля стохастических полей в окрестности наиболее вероятной их конфигурации. В соответствии с условиями перевала (которые приводятся к флуктуационно-диссипативной теореме) величина $\langle m^2\rangle$ является амплитудой спиновых флуктуаций, а ее зависимость от температуры и внешнего магнитного поля определяется выражением

$$\langle m^2\rangle = UbT^2M(T,h)/\left(h + U\kappa M(T,h)^3\right), \tag{7}$$

где $b$ — коэффициент разложения мнимой части функции Линдхарда по частоте, а $\kappa$ — коэффициент спиновой жесткости [12,13].

Далее вычислим электронные функции Грина, отвечающие $A$- и $B$-состояниям, разделенным гибридизационной щелью, с учетом их расщепления флуктуирующими в пространстве и времени стохастическими обменными и зарядовыми полями.

Воспользовавшись определением функции Грина

$$G_k^{(\theta,\alpha)} = \mathrm{Sp}T_\tau\left\{A_{k,\alpha}^{(\theta)+}A_{k,\alpha}^{(\theta)}\sigma(1/T)\right\}/\mathrm{Sp}T_\tau\{\sigma(1/T)\},$$

построим ряд теории возмущений по параметрам $\Xi_{k,\alpha}$ и $W_{\nu,\alpha}$. Пренебрегая многократными процессами рассеяния на продольных и зарядовых флуктуациях стохастических полей (которые маловероятны, поскольку описывают флуктуации чисел заполнения на узле, а следовательно, связаны с большими флуктуациями электронных энергий), с учетом приближенного определения конфигурации стохастических полей в методе перевала после аналитического продолжения на действительную ось имеем

$$G^{(\theta,\alpha)}(\omega) = \frac{1}{2}\sum_{\theta'=\pm1}\left(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\theta',\alpha)}(\mathbf{h}) + \alpha i\Gamma_{\theta',\alpha}(\mathbf{k})\right)^{-1} \times\left(1 + \theta\theta'\frac{\sum\limits_{\gamma=\pm}\gamma\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\gamma,\alpha)}(0)}{\sum\limits_{\gamma=\pm1}\gamma\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\gamma,\alpha)}(\mathbf{h})}\right), \tag{8}$$

где

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\theta,\alpha)}(\mathbf{h}) = \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p,d)}(M_L,\mathbf{h}) + \theta\left[\left(\Delta\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p,d)}(M_L,\mathbf{h})\right)^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2\left(1 + \left(\frac{\mathbf{hM}/M_L}{\sqrt{\left(\Delta\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p,d)}(M_L,\mathbf{h})\right)^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2}}\right)^2\right)\right] \tag{9}$$

— энергии электронных состояний $A_{(\alpha)}(\theta = -1)$ и $B_{(\alpha)}(\theta = +1)$ подзон во внешнем магнитном поле,

$$\Gamma_{\theta,\alpha}(\mathbf{k}) = UT\mathrm{Im}\sum_q r_q^2\left(G_{0,k}^{(\theta,\alpha)} - G_{0,k+q}^{(\theta,\alpha)}\right) \times\left(1 - \alpha\frac{\mathbf{h}(\mathbf{M}/M_L)}{\sqrt{\left(\Delta\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^{(p,d)}(M_L,\mathbf{h})\right)^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2}}\right)\begin{Bmatrix}\sin^4(\vartheta_{\mathbf{k},\alpha})\\ \sin^2(2\vartheta_{\mathbf{k},\alpha})/4\end{Bmatrix} \tag{10}$$

— затухание этих состояний, обусловленное рассеянием электронов на флуктуациях случайных полей (верхняя строка в фигураных скобках соответствует $\theta = -1$, а нижняя — $\theta = +1$),

$$\Delta\varepsilon^{(p,d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h}) = \frac{1}{2}\left(\varepsilon^{(d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L) - \varepsilon^{(p)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h})\right),$$

$$\varepsilon^{(p,d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h}) = \frac{1}{2}\left(\varepsilon^{(d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L) + \varepsilon^{(p)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h})\right),$$

$$\varepsilon^{(p)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h}) = \varepsilon^{(p)}_{\mathbf{k}} - \alpha\mathbf{hM}/M_L,$$

$$\varepsilon^{(d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L) = \varepsilon^{(d)}_{\mathbf{k}} + Un_d/2 + \alpha UM_L,$$

угол $\vartheta_{\mathbf{k},\alpha}$ определяется уравнением

$$\operatorname{tg}(2\vartheta_{\mathbf{k},\alpha}) = |V^2_{\mathbf{k}}| \Big/ \left(\varepsilon^{(p)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L, \mathbf{h}) - \varepsilon^{(d)}_{\mathbf{k},\alpha}(M_L)\right).$$

Отметим, что, согласно (9), (10), так же как в модели двойного обмена, магнитное поле ведет к подавлению затухания симметризованных по спину электронных состояний с одновременным возрастанием емкости этих зон (за счет уменьшения числа антисимметризованных электронных состояний) и наоборот. Однако данный эффект оказывается незначительным на фоне подавления магнитным полем (вследствие роста намагниченности) амплитуды флуктуаций обменных полей и вызванных ими флуктуаций зарядовых полей.

Анализируя выражения (9) и (10), из условия $\Gamma_{\theta,\alpha}(\mathbf{k}) > \varepsilon^{(\theta,\alpha)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{h})$ получаем, что энергетические интервалы сильно затухающих состояний лежат вблизи краев подзон $A_{(\alpha)}$ (т.е. $\theta = -1$, $\alpha = \pm 1$) и $B_{(\alpha)}$ (т.е. $\theta = +1$, $\alpha = \pm 1$) и приближенно имеют ширину $E^{(\theta,\alpha)}_C = U^2\langle m^2\rangle/\Delta^{(\theta,\alpha)}$ ($\Delta^{(\theta,\alpha)}$ — ширина $\theta$, $\alpha$-подзоны, см. (9)). При этом данный интервал заметно увеличивается вблизи $T_C$ за счет резкого возрастания полуширины функции распределения стохастических обменных полей.

Численный анализ полученных соотношений был выполнен в модели параболических зон применительно к $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$. При этом ширины исходных зон $p$- и $d$-электронов $\Delta_p$ и $\Delta_d$, константа хаббардовского отталкивания для $d$-электронов марганца $U$, отношение $V_{\mathbf{k}}/U$ были приняты равными $\Delta_p = 10\Delta_d = 10U$, $U = 1\,\text{eV}$, $\mathbf{V}_k/U = 0.1$. Данные значения соответствуют исходному ($T = 0$, $V = 0$, $h = 0$) положению химического потенциала, отвечающему заполнению $p$-зоны, равному 0.67, и значению намагниченности насыщения в основном состоянии $3.67\mu_B$ на ячейку, что соответствует $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$ [14]. В этом случае спектр гибридизированных электронов образует четыре неперекрывающиеся подзоны: $A_{(-)}$, $B_{(-)}$, $A_{(+)}$ и $B_{(+)}$ (рис. 1). Химический потенциал располагается в $B_{(+)}$-подзоне, эффективная масса электронов в которой при $T = T_C$ достигает значения, примерно равного 100 массам свободных (т.е. негибридизированных) электронов, в силу чего они могут быть отнесены к тяжелым фермионам. Подзона $B_{(-)}$-состояний полностью заполнена, а подзоны $A_{(-)}$- и $A_{(+)}$-состояний пусты. Величина пороговой энергии $E^{(\theta,\alpha)}_C$ для

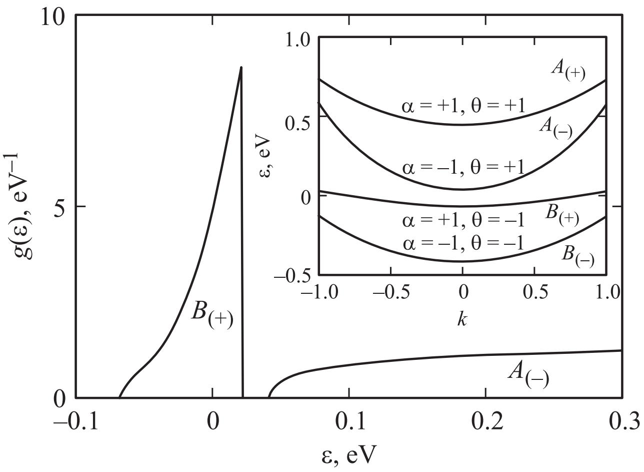


**Рис. 1.** Плотности электронных состояний в подзонах $B_{(+)}$ и $A_{(-)}$ для $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$ вблизи точки Кюри в отсутствие магнитного поля. Начало отсчета энергии совпадает с положением химического потенциала. На вставке — модель электронного спектра $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$ вблизи точки Кюри; $k$ — модуль электронного квазиимпульса в единицах вектора Бриллюэна.

$A_{(\pm)}$- и $B_{(-)}$-подзон оказывается несущественной из-за больших значений ширин этих подзон. Поэтому, а также ввиду энергетической узости $B_{(+)}$-подзоны в численных расчетах рассматривалась область сильно затухающих состояний только $B_{(+)}$-подзоны. Вследствие взаимного расположения подзон наиболее вероятными процессами термической активации являются температурные переходы из $B_{(+)}$- в $A_{(-)}$-состояния (рис. 1).

Особо отметим, что в рассматриваемой модели флуктуации спиновой плотности формируются в зоне тяжелых фермионов. При этом в соответствии с формулой (7) включение внешнего магнитного поля приводит к резкому их подавлению. Выполненный численный анализ показывает, что этот эффект обусловлен аномальным влиянием спинового ангармонизма, который в знаменателе формулы (7) представлен слагаемым, содержащим коэффициент спиновой жесткости. На рис. 2 показана температурная зависимость величины коэффициента $\kappa$, которая аномально резко изменяется вблизи точки Кюри.

Переходя к анализу аномальной температурно-полевой зависимости проводимости (в частности, эффекта КМС), воспользуемся простейшим выражением для электропроводности. При этом ограничимся анализом немагнитного рассеяния, считая, что время свободного пробега электронов одинаково для всех гибридизационных состояний,

$$\sigma = \frac{e^2}{2m^*_1(h)}\, n_1(T, h)\tau + \frac{e^2}{2m^*_2(h)}\, n_2(T, h)\tau.$$

Здесь $m^*_1(h)$ и $m^*_2(h)(\approx \text{const})$ — эффективные массы тяжелых и термически активированных электронов, рассчитываемые путем дифференцирования спектров (9),

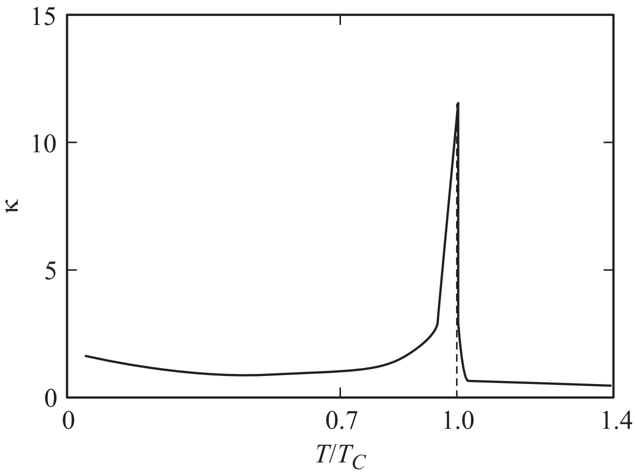


**Рис. 2.** Температурная зависимость коэффициента спиновой жесткости $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$.

$n_1(T,h)$ и $n_2(T,h)$ — концентрации делокализованных тяжелых и термически активированных в ближайшую верхнюю зону (преимущественно $p$-подобных) $A_{(-)}$-состояний электронов.

Температурно-полевые зависимости $n_1(T,h)$ и $n_2(T,h)$ определялись на основе полученных выражений для электронных спектров (см. (9, 10)) и плотности состояний, найденной через эти спектры. При этом в силу того, что рассчитывалась только полевая зависимость электросопротивления (при фиксированной температуре), вклады, обусловленные перескоками по локализованным состояниям, оказались пренебрежимо малыми.

Вблизи точки Кюри рассчитанное магнитосопротивление отрицательно и в поле с индукцией 1 T составляет по абсолютной величине 78% (в эксперименте 84% [14]). Отметим также, что составы $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ с $x < 0.35$ близки к условию, когда магнитный момент, приходящийся на узел, перестает изменяться с температурой и магнитным полем [11] еще в ферромагнитной области: $M_L(T,h) \approx M_S$. В этих условиях температурно-полевая зависимость пороговой энергии, отделяющей зонные состояния от сильно затухающих, имеет вид

$$E_C^{(\theta,\alpha)} = (U^2/\Delta^{(\theta,\alpha)})M_S^2\left[1-(M(T,h)/M_S)^2\right].$$

В парамагнитном состоянии $(T > T_C)$ и $h = 0$ величины $E_C^{(\theta,\alpha)} = U^2M_S^2/\Delta^{(\theta,\alpha)}$ остаются неизменными, и новых сильно затухающих состояний не возникает. В свою очередь возрастание намагниченности с увеличением магнитного поля подавляет флуктуации обменных полей, что выражается в уменьшении полуширины функции распределения и ведет к уменьшению $E_C^{(\delta,\alpha)}$, являясь причиной индуцированного магнитным полем фазового перехода.

Таким образом, в условиях, когда химический потенциал находится вблизи гибридизационной щели, „бывшие“ $p$, $d$-электроны, заполняющие состояния $A$-, $B$-подзон, оказываются ответственными за магнетизм и перенос электрического тока, что и является причиной аномальной взаимосвязи магнитной и электронной подсистем. Поэтому в сильно коррелированных магнитных полупроводниках на основе манганитов редкоземельных металлов допирование двухвалентными примесями приводит к аномальному увеличению величины $\langle m^2\rangle$, а значит, и магнитосопротивления вблизи $T_C$.

## Список литературы


[1] R. Allub, B. Alascio. Solid State Commun. **99**, 613 (1996).
[2] N.G. Bebenin, V.V. Ustinov. J. Phys.: Cond. Matter. **10**, 6301 (1998).
[3] Э.Л. Нагаев. УФН **168**, 917 (1998).
[4] Л.П. Горьков. УФН **168**, 665 (1998).
[5] Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев. УФН **178**, 25 (2008).
[6] Ю.П. Сухоруков, А.В. Телегин, А.Б. Грановский, Е.А. Ганьшина, С.В. Наумов, Н.В. Костромитина, Л.В. Елохина, Х. Гонзалес. ЖЭТФ **138**, 402 (2010).
[7] Н.Г. Бебенин, Р.И. Зайнуллина, В.В. Машкауцан, В.С. Гавико, В.В. Устинов, Я.М. Муковский, Д.А. Шулятев. ЖЭТФ **117**, 1181 (2000).
[8] I. Solovyev. J. Phys. Soc. Jpn. **78**, *5*, 054 710 (2009).
[9] А.Г. Волков, А.А. Повзнер, О.В. Подшивалова, К.А. Шумихина, О.В. Аношина. Изв. вузов. Физика. **49**, *11*, 3 (2006).
[10] J.C. Knott, D.C. Pond, R.A. Lewis. Physics B 1:2, doi:10.1186/1754-0429-1-2 (2008).
[11] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянкин. ФТТ **40**, *8*, 1437 (1998).
[12] Т. Мория. УФН **135**, 119 (1981).
[13] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, А.Н. Филанович. ФТТ **53**, 1672 (2011).
[14] B.I. Belevtsev, D.G. Naugle, K.D.D. Rathnayaka, A. Parasiris, J. Fink-Finowicki. Physica B **355**, 341 (2005).