

НЕКВАЗИЧАСТИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ХАРАКТЕР ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА В ЖЕЛЕЗЕ И НИКЕЛЕ

В.Ю.Ирхин, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов¹⁾

*Институт физики металлов УрО АН СССР
620219, Свердловск*

*¹⁾Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова
123182, Москва*

Поступила в редакцию 11 февраля 1991 г.

После переработки 25 февраля 1991 г.

Предложена новая модель сильного ферромагнетизма 3d-металлов, промежуточная между моделью Хаббарда и s-d обменной моделью. Обсуждается роль неквази-частичных (спин-поляронных) состояний, лежащих вблизи E_F (в частности, для интерпретации экспериментальных данных по спиновой поляризации электронов и температурной зависимости сопротивления).

Несмотря на большие усилия, затраченные на теоретическое исследование магнетизма переходных металлов, ряд вопросов, связанных с описанием локальных магнитных моментов (ЛММ), остается не решенным. Спин-флуктуационные теории ¹ относят проблему ЛММ к области высоких температур; при этом основное состояние описывается в стандартной теории Стонера. В то же время сам факт существования ЛММ плохо согласуется с квази-частичным описанием даже при $T = 0$ ²⁻⁴. "Безмодельный" вариант спин-флуктуационной теории, основанный на методе функционала плотности ⁵, не позволяет объяснить наличие ЛММ выше T_c в Ni и дает заниженное значение их величины в Fe. С другой стороны, применимость стандартной модели Хаббарда к расчетам 3d-металлов также сомнительна: последовательное вычисление хаббардовского параметра приводит для Fe к неразумно большому значению U 6 эВ ⁶. В настоящей работе предлагается новая картина ферромагнетизма металлов группы железа.

Результаты зонных расчетов ⁷ для Fe дают основание выделить группу "магнитных" состояний, образующих пик плотности электронных состояний $N(E)$ шириной Γ 0,1 0,2 эВ и емкостью порядка одного электрона на спин, представляющий собой двумерную особенность ван Хофа от линии P N (эти состояния имеют e_g симметрию и хорошо локализованы в прямом пространстве). При переходе к ферромагнитному состоянию пик расщепляется, сохраняя свою форму, причем спиновое расщепление Δ 2 эВ Γ ; ситуация в Ni аналогична. Поэтому в нулевом приближении "магнитные" электроны можно описать узкозонной моделью Хаббарда с шириной зоны порядка Γ Δ и концентрацией электронов $n > 1$. Их взаимодействие с остальными "s-электронами" можно затем рассматривать в рамках s-d обменной модели ⁸.

Гамильтониан модели запишем в виде

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} X_{-\vec{k}}^{2\sigma} X_{\vec{k}}^{\sigma 2} + H_s + H_{sd},$$

где $\epsilon_{\vec{k}}$ - спектр "магнитных" электронов, H_s - гамильтониан s-электронов, H_{sd} - обменное взаимодействие между обеими группами электронов, $X_{\vec{k}}^{\sigma 2}$ - фурье-образы обобщенных проекционных операторов Хаббарда, соответствующих переходу из дважды занятых состояний (двоек) в однократно

занятые состояния с проекцией спина σ . Для $n > 1$ пустые состояния исключаются при любом (не обязательно контактном) достаточно сильном межэлектронном взаимодействии.

Поскольку как в Fe, так и в Ni пик со спином вверх полностью заполнен, мы имеем дело с насыщенным, или "полуметаллическим" ферромагнетиком (s -электронами пока пренебрегаем). Узкозонная модель Хаббарда (первый член в гамильтониане H) для этого случая хорошо изучена; функции Грина $G_{\vec{k}}^{-\sigma}(E) = \langle X_{\vec{k}}^{\sigma 2} | X_{-\vec{k}}^{2\sigma} \rangle_E$, определяющие электронный спектр, при $T = 0$ имеют вид ^{3,4}

$$G_{\vec{k}}^{\downarrow}(E) = (E - \epsilon_{\vec{k}})^{-1}; \quad G_{\vec{k}}^{\uparrow}(E) = \left\{ E - \epsilon_{\vec{k}} - \left[\sum_{\vec{q}} \frac{f_{\vec{k}+\vec{q}}}{E - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega_{\vec{q}}} \right]^{-1} \right\}^{-1},$$

где $f_{\vec{k}} = f(\epsilon_{\vec{k}})$ - фермиевская функция распределения, $\omega_{\vec{q}}$ - магنونный спектр. Если концентрация двоек $n_2 = n - 1$ не слишком велика, $G_{\vec{k}}^{\uparrow}(E)$ не имеет полюсов ниже E_F , но существует "неквазичастичный" (спин-поляронный) вклад в плотность состояний $N_{\uparrow}(E) = (-1/\pi) \text{Im} \Sigma G_{\vec{k}}^{\uparrow}(E)$, обусловленный разрезом и резко (на интервале порядка характерной магنونной энергии $\bar{\omega}$) падающий до нуля при $E \rightarrow E_F - 0$, причем $N_{\uparrow}(E \rightarrow E_F) \sim [(E_F - E)/\bar{\omega}]^{3/2}$ (см. рисунок). В то же время, неквазичастичные (не связанные с полюсами $G_{\vec{k}}^{\sigma}(E)$) состояния не влияют на характеристики поверхности Ферми при $T \ll \bar{\omega}$. Эти состояния обеспечивают также значение $M_0 = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/2 = (1 - n_2)/2$ и убывание намагниченности с температурой по закону Блоха ⁴.

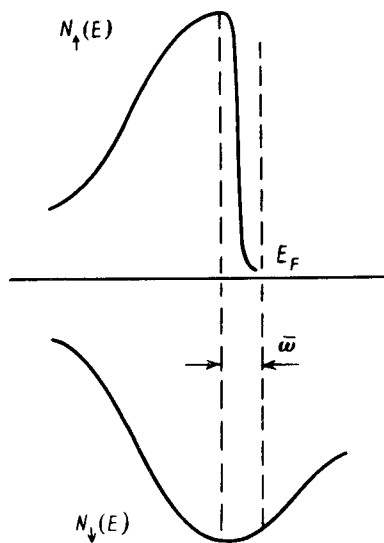


Рис. 1. Схематическая плотность состояний "двоек" в области уровня Ферми. Заполненный пик со спином вверх соответствует нижней хаббардовской подзоне, которая удалена влево и не показано на рисунке

Утверждение о применимости такой картины, известной для узкозонной модели Хаббарда, к Fe и Ni является нетривиальным и допускает экспериментальную проверку. Рассматриваемая модель не входит в противоречие с тем, что зонная теория способна правильно описать поверхность Ферми и значения M_0 для Fe и Ni. В то же время, спиновая поляризация

эмиттированных электронов $P(E)$ в двух картинах радикально отличается. Если в нашей модели P мала при усреднении по энергетическому интервалу $|\Delta E| \gg \bar{\omega}$ (поскольку $N_{\uparrow}(E < E_F) \approx N_{\downarrow}(E)$), то согласно зонной теории⁷ для никеля $N_{\downarrow}(E_F) \gg N_{\uparrow}(E_F)$ и P должна быть велика и отрицательна. Экспериментальные данные для Ni¹¹ определенно дают малые значения $P \approx -5 \div +10\%$. Разброс данных по Fe значительно больше из-за трудности приготовления поверхности¹¹; из обсуждаемой модели следует, что P должна быть мала при тщательном приготовлении образцов.

Старой и все еще не решенной проблемой является объяснение температурной зависимости электросопротивления ферромагнитных металлов при $T \ll T_c$. Согласно⁸, $\rho(T) = aT + bT^2$, либо $\rho(T) \sim T^{3/2}$, причем член порядка T^2 наблюдается при значительно более низких T , чем предсказывает стандартная теория, объясняющая его одномагнитными процессами, а коэффициент a на три порядка больше значения, обусловленного релятивистскими процессами. В нашей модели зависимость вида $T^{3/2}$ может быть объяснена рассеянием на примесях с учетом неквазичастичного вклада

$$\delta\rho(T) \sim \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \delta N_{\uparrow}(E) \sim T^{3/2}.$$

В высокочистых образцах этот вклад должен исчезать. Что касается вклада порядка T^2 , то он может возникать в силу рассеяния "s-электронов" на "магнитных", как в обычной $s-d$ -модели, причем одномагнитные процессы будут включаться при низких (в меру малости $s-d$ обменного параметра) температурах⁸.

Утверждение о применимости узкозонной модели Хаббарда к Fe и Ni позволяет естественно объяснить такие проявления ЛММ, как спонтанное "спиновое" расщепление выше температуры Кюри T_c (интерпретируемое как хаббардовское расщепление) и закон Кюри - Вейсса⁹. При этом T_c оценивается как $\Gamma\varphi(n)$, где $\varphi(n) \sim 1$ - функция концентрации электронов. Таким образом, малость $T_c \sim 10^3$ К по сравнению с величиной "стонеровского" расщепления Δ , до сих пор рассматриваемая как серьезная проблема для сильных магнетиков^{1,8}, может быть следствием узости зоны "магнитных" состояний, $\Gamma \ll \Delta$.

Согласно рассматриваемой модели, сильно коррелированными ("хаббардовскими") является в Fe лишь часть d -электронов (e_g состояния вблизи уровня Ферми). Это обстоятельство следует учитывать при расчете параметра U -типа⁶, принимая во внимание, в частности, его экранировку t_{2g} -электронами (а не только sp).

В заключение отметим, что важная роль "неквазичастичных" (в смысле обусловленности разрезом функций Грина) вкладов в обсуждаемой модели не означает, вообще говоря, неприменимости феноменологической теории фермижидкости, так как всегда можно ввести "статистические" квазичастицы, не связанные напрямую с полюсами функций Грина¹⁰. В частности, в узкозонной модели Хаббарда состояния с $\sigma = \uparrow$ дают, согласно⁴, линейный вклад в теплоемкость, формально аналогичный разности вкладов "статистических" и "динамических" квазичастиц.

Благодарим Вонсовского С.В. за интерес к работе и ценные обсуждения и Анисимова В.И. за обсуждение результатов работы⁶.

Литература

1. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М., Мир, 1988.

2. Katsnelson M.I., Vonsovsky S.V. *JMMM*, 1980, 15-18, 275; Vonsovsky S.V., Katsnelson M.I. *Physica B*, 1990, 159, 61.
 3. Edwards D.M., Hertz J.A. *J. Phys. F*, 1973, 3, 2191.
 4. Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И. *ФТТ*, 1983, 25, 3383; *J. Phys. C.*, 1985, 18, 4173; *J. Phys.: Cond. Mat.*, 1990, 2, 7151.
 5. Gyorgffy B.L. et al. *J. Phys. F*, 1985, 15, 1337.
 6. Anisimov V.I., Gunnarsson O. *Phys. Rev. B*, in press.
 7. Moruzzi V.L., Janak J.F., Williams A.R. *Calculated electronic properties of metals*. Pergamon press, 1978.
 8. Вонсовский С.В. *Магнетизм*. М.: Наука, 1971.
 9. Ауслендер М.И., Кацнельсон М.И., Ирхин В.Ю. *ФММ*, 1988, 65, 57; *J. Phys. C*, 1988, 21, 5521.
 10. Carneiro G.M., Pethick C.J. *Phys. Rev. B*, 1975, 11, 1106.
 11. Chrobok G. et al. *Phys. Rev. B*, 1977, 15, 429.
-