

Электронная структура и сильный магнетизм в узкозонных системах и полуметаллических магнетиках

Ирхин В.Ю., Зарубин А.В., Кацнельсон М.И., Лихтенштейн А.И.



Проведено теоретическое исследование электронной структуры и широкого круга физических свойств полуметаллических ферромагнетиков с учетом корреляционных эффектов. Исследовано формирование насыщенного и ненасыщенного ферромагнитного состояния в рамках модели Хаббарда.

История исследований полуметаллических ферромагнетиков (ПМФ) начинается с расчета зонной структуры NiMnSb (de Groot et al, 1983); позднее были обнаружены дальнейшие примеры ПМФ: CrO_2 , Fe_3O_4 , ряд гейслеровых сплавов из серий Co_2MnZ и RMnSb . Эти вещества имеют металлическую зонную структуру для одной из спиновых проекций, но для противоположного спина уровень Ферми лежит в энергетической щели. Будучи полупроводниками для одной проекции спина и металлами для другой, эти вещества являются перспективными материалами для применений в спинтронике. Вклады от электронов со спином вверх и вниз в кинетические свойства имеют разный порядок величины, что может приводить к гигантскому магнитосопротивлению в гетероструктурах, содержащих ПМФ. Наблюдение подобной зонной

структуры методом фотоэмиссии в материалах с колоссальным магнитосопротивлением типа $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ также значительно увеличило интерес к полуметаллическому ферромагнетизму [1].

Особая зонная структура ПМФ приводит к важной роли некогерентных (неквазичастичных, НКЧ) состояний, которые возникают вблизи уровня Ферми вследствие корреляционных эффектов. Происхождение таких состояний обусловлено процессами с переворотом спина: низкоэнергетические электронные возбуждения со спином вниз, которые запрещены в ПМФ в рамках одноэлектронной картины, оказываются возможными как суперпозиция электронов со спином вверх и виртуальных магнов. Плотность НКЧ состояний обращается в нуль на уровне Ферми, но быстро возрастает

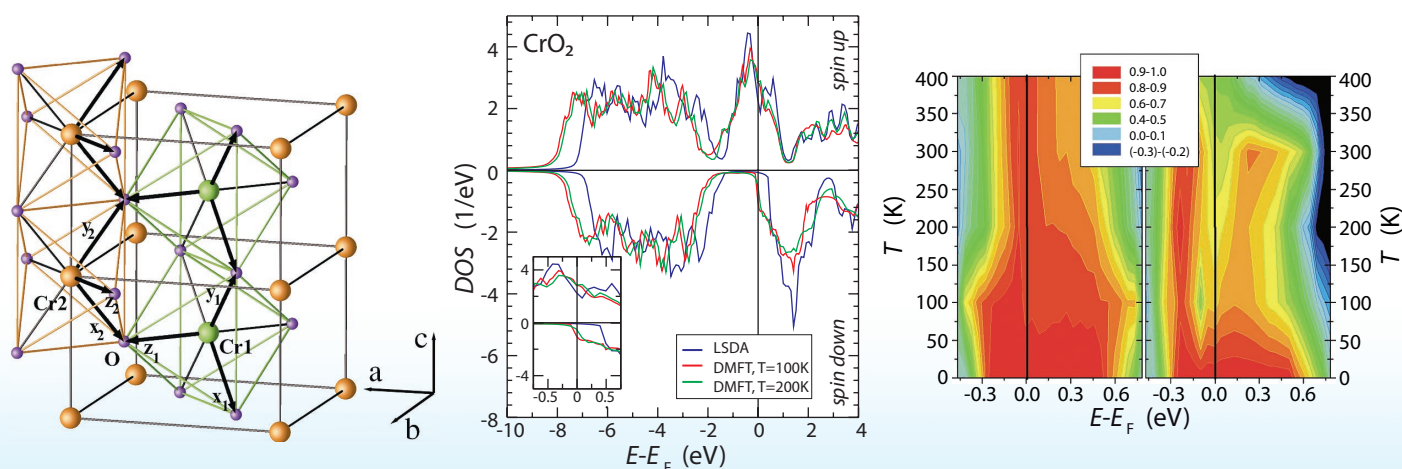


Рис. 1

(слева) - структура CrO_2 (рутила); (в центре) - плотности состояний, полученные из вычислений в рамках LSDA и LSDA+DMFT для разных температур (на вставке показана узкая окрестность вблизи уровня Ферми); (справа) - картины спиновой поляризации как функции энергии и температуры для разных значений локального кулоновского параметра U . Слева $U=2$ eV, справа $U=4$ eV. Результат LSDA приведен при $T=0$ K. Для $U=4$ eV отчетливо видна асимметрия неквазичастичных состояний

на интервале порядка характерной магнетонной частоты. Эти состояния играют определяющую роль в спин-поляризованной электронной спектроскопии, ЯМР, туннельном транспорте в контактах ферромагнетик-сверхпроводник. НКЧ состояния могут также наблюдаться на поверхностях ПМФ такими методами, как ARPES или спин-зависимая сканирующая туннельная микроскопия (STM) [2]. В последнее время плотность НКЧ состояний была рассчитана из первых принципов для основных ПМФ: NiMnSb, других гейслеровых сплавов, соединений со структурой цинковой обманки и CrO_2 (рис. 1). Было также проведено теоретическое исследование особенностей кинетических свойств двух- и трехмерных ПМФ, связанных с отсутствием одномагнетонных процессов рассеяния. Вычислены температурные и полевые зависимости сопротивления в различных режимах. Показано, что НКЧ состояния доминируют в температурной зависимости примесного сопротивления и проводимости туннельных контактов.

Проблема ферромагнитного упорядочения в узких энергетических зонах интенсивно исследуется до сих пор. Несмотря на большое число публикаций по этой теме, магнетизм сильнокоррелированных электронных систем, описываемых моделью Хаббарда, остается в центре внимания, поскольку они являются самым трудным случаем для стандартных подходов коллективизированного магнетизма (зонные расчеты, теории спиновых флуктуаций). Физическая картина магнетизма существенно отличается от стонеровской картины слабого зонного магнетизма, поскольку корреляции

приводят к радикальной перестройке электронного спектра – формированию хаббардовских подзон.

Исследована устойчивость насыщенного и ненасыщенного ферромагнетизма в модели Хаббарда в рамках метода функций Грина для многоэлектронных X -операторов Хаббарда. Проведен анализ существующих приближений и их недостатков. Продемонстрировано, что учет продольных флуктуаций оказывается существенным для описания ненасыщенного ферромагнитного состояния (рис. 2). Получены и проанализированы соответствующие картины плотности состояний (ПС), которые проявляют особенности типа Кондо, обусловленные процессами с переворотом спина [3].

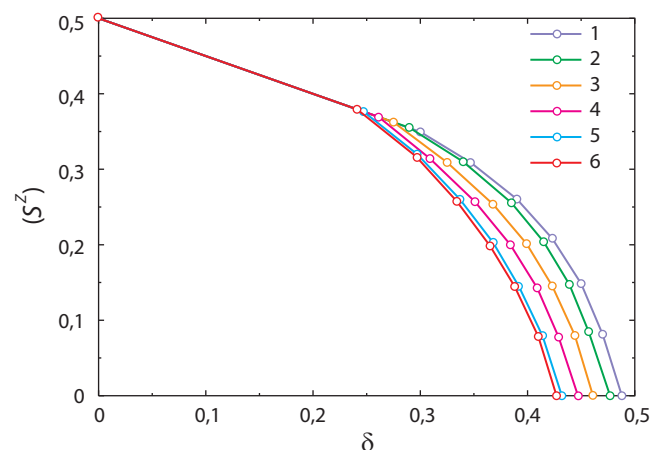


Рис. 2

Зависимость намагниченности $\langle S^z \rangle$ от концентрации носителей тока δ для ряда затравочных плотностей состояний (ПС)

линия 1 соответствует прямоугольной ПС
линия 2 – полуэллиптической функции ПС
линии 3, 4, 5, 6 – квадратной, простой кубической, ОЦК и ГЦК решеткам

¹ Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И. УФН, 164 (1994) 705.

² Irkhin, V. Y. and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B 73 (2006) 104429.

³ Irkhin, V. Y. and A. V. Zarubin, Phys. Rev. B 70 (2004) 035116.