## Квантовые осцилляции намагниченности в антиферромагнитных полуметаллах с треугольной решеткой

Д. М. Дзебисашвили<sup>+\*1)</sup>, А. А. Худайбердыев<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН", 660036 Красноярск, Россия

\* Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева, 660037 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 25 июня 2018 г.

Исследуются особенности намагниченности антиферромагнитных полуметаллов с низкой концентрацией носителей тока на треугольной решетке в сильных магнитных полях. Показано, что хорошо известное плато в полевой зависимости намагниченности подсистемы локализованных спинов с S = 1/2 в действительности не строго горизонтальное, а характеризуется слабым положительным наклоном. Установлено, что при значениях магнитного поля, отвечающих границам этого плато, вследствие сильной s-d(f)-обменной связи, должна наблюдаться резкая смена частоты квантовых осцилляций намагниченности коллективизированной подсистемы.

DOI: 10.1134/S0370274X18150080

1. Введение. Квантовый антиферромагнетик на треугольной решетке (АФМТ) является простейшей системой, которая наиболее часто используется для изучения геометрической фрустрации [1]. Как известно, основное состояние классического АФМТ в магнитном поле сильно вырождено [2]. При нулевой температуре учет квантовых флуктуаций приводит к снятию вырождения в пользу планарной структуры [3]. Именно благодаря квантовым флуктуациям в магнитополевой зависимости намагниченности M(H) возникает плато (горизонтальный участок) при значении М, равном одной трети намагниченности насыщения M<sub>sat</sub> [3, 4]. В интервале значений магнитного поля  $[H_1, H_2]$ , где реализуется плато намагниченности, система находится в так называемой uud-фазе. В этом случае вектора намагниченности двух из трех магнитных подрешеток ориентированы вдоль направления магнитного поля *H*, а намагниченность третьей подрешетки направлена против поля. При величине *H*, меньшей *H*<sub>1</sub>, система находится в *Y*-фазе, а при *H* > *H*<sub>2</sub> – в *V*-фазе. Плато в полевой зависимости намагниченности наблюдалось экспериментально в ряде квазидвумерных АФМТ, например в GdPd<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> [5], RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> [6, 7], Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub> [8],  $Rb_4Mn(MoO_4)_3$  [9].

Большой интерес в последнее время вызывают соединения, в которых особенности магнитной структуры AФMT проявляются в свойствах коллективизированной подсистемы электронов. Ярким примером Другим примером проводящих AФМТ являются: PdCrO<sub>2</sub>, AgNiO<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>CrO<sub>2</sub> (см. работу [15] и ссылки в ней). Эти системы также характеризуются сильной связью между электронами проводимости и локализованными спинами. В этой связи отметим, что наличие s-d(f)-обменного взаимодействия в AФM полуметаллах на кубической и квадратной решетке может приводить к резкой смене частоты квантовых осцилляций намагниченности коллективизированной подсистемы в окрестности поля спин-флип перехода [16, 17].

В данной работе будет изучена возможность наблюдения аномалий квантовых осцилляций в АФМполуметаллах на треугольной решетке в окрестности полей  $H_1$  и  $H_2$ , определяющих плато намагниченности локализованных спинов. С этой целью, прежде всего, будет развита теория квантовых АФМТ с S == 1/2, основанная на спиновой диаграммной технике для мацубаровских функций Грина (ФГ). Далее в рамках теории Лифщица–Косевича будут проанализированы особенности квантовых осцилляций намагниченности носителей тока в АФМТ-полуметаллах с сильной связью между зарядовыми и спиновыми степенями свободы. При этом существенным условием

<sup>1)</sup>e-mail: ddm@iph.krasn.ru

могут служить интеркалированные водой кобальтиты натрия  $Na_xCoO_2 \cdot H_2O$ , проводящие слои которых образуют треугольную решетку. Взаимосвязь локализованных и коллективизированных степеней свободы в фазе сосуществования сверхпроводимости и дальнего магнитного порядка в этой системе активно обсуждалась в работах [10–14].

будет низкая концентрация носителей тока, что позволит в главном приближении не учитывать влияние последних на свойства локализованной спиновой подсистемы.

2. Гамильтониан АФМТ. Уравнения на углы. Рассмотрим набор из треугольных решеток, в узлах которых находятся спины с S = 1/2. Сформируем из этих решеток простую гексагональную решетку. Обменное взаимодействие учтем только между ближайшими спинами: антиферромагнитное – между спинами из одной треугольной решетки, и слабое ферромагнитное – для спинов из разных решеток. Гамильтониан системы запишем в виде:

$$\mathcal{H}_m = \sum_{\langle ij \rangle} I_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + gH \sum_j S_j^z.$$
(1)

Здесь использованы следующие обозначения:  $\mathbf{S}_j$  – векторный оператор локализованного спина на узле j, H – напряженность внешнего магнитного поля, направленного по оси z и заданного в энергетических единицах, g – фактор Ланде,  $I_{ij}$  – энергия обменного взаимодействия спинов на узлах i и j:  $I_{ij} = I > 0$  для ближайших узлов из одной и той же треугольной решетки, и  $I_{ij} = I_{\perp} < 0$  – из разных. При этом  $I \gg |I_{\perp}|$ . Для всех других пар узлов  $I_{ij} = 0$ . Угловые скобки у индексов в первой сумме означают, что суммирование ведется только по ближайшим узлам.

Для описания скоса векторов намагниченности в магнитном поле разделим систему на три магнитные подрешетки и перейдем в каждой из них к новым локальным системам координат, повернутым относительной исходной на углы  $\theta_l$  (l = 1, 2, 3) соответственно (см. рис. 1). Указанному повороту отвечает унитарное преобразование всех операторов A:  $A \to A' = \hat{U}A\hat{U}^+$ , где  $\hat{U} = \prod_{l=1}^3 \prod_{f_l} \exp\{i\theta_l S_{f_l}^y\}$ , а индекс  $f_l$  пробегает все узлы l-ой подрешетки. Для спиновых операторов получаем:

$$\begin{aligned} S_{f_l}^x(\theta_l) &= S_{f_l}^x \cos \theta_l + S_{f_l}^z \sin \theta_l, \quad S_{f_l}^y(\theta_l) = S_{f_l}^y, \\ S_{f_l}^z(\theta_l) &= S_{f_l}^z \cos \theta_l - S_{f_l}^x \sin \theta_l \quad (l = 1, 2, 3). \end{aligned}$$

Гамильтониан (1) после перехода к локальным системам координат и выделения среднеполевых вкладов удобно представить в виде:

$$\mathcal{H}'_m = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int},} \tag{3}$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{l=1}^3 \sum_{f_l} H_l S_{f_l}^z + E_0, \tag{4}$$



Рис. 1. Ориентации локальных осей  $z_l$  (l = 1, 2, 3) и равновесных намагниченностей подрешеток  $\mathbf{R}_l$  после поворота локальных систем координат вокруг оси y на углы  $\theta_l$ 

$$H_{l} = 3I(R_{l+1}\cos\theta_{l,l+1} + R_{l+2}\cos\theta_{l+2,l}) - gH\cos\theta_{l} + 4I_{\perp}R_{l},$$

$$E_{0} = -N\sum_{l=1}^{3} \left(3IR_{l}R_{l+1}\cos\theta_{l,l+1} + 2I_{\perp}R_{l}^{2}\right),$$

$$\mathcal{H}_{int} = I\sum_{l=1}^{3}\sum_{f_{l}} \left[\Delta S_{f_{l}}^{z}\Delta S_{f_{l+1}}^{z}\cos\theta_{l,l+1} + \frac{1}{4}(\cos\theta_{l,l+1} - 1)\left(S_{f_{l}}^{+}S_{f_{l+1}}^{+} + S_{f_{l}}^{-}S_{f_{l+1}}^{-}\right) + \frac{1}{4}(\cos\theta_{l,l+1} + 1)\left(S_{f_{l}}^{+}S_{f_{l+1}}^{-} + S_{f_{l}}^{-}S_{f_{l+1}}^{+}\right) + \sin\theta_{l,l+1}\left(\Delta S_{f_{l}}^{z}S_{f_{l+1}}^{x} - S_{f_{l}}^{x}\Delta S_{f_{l+1}}^{z}\right)\right] + I_{\perp}\sum_{l=1}^{3}\sum_{\langle f_{l}f_{l}'\rangle} \left[S_{f_{l}}^{+}S_{f_{l}'}^{-} + \Delta S_{f_{l}}^{z}\Delta S_{f_{l}'}^{z}\right].$$
(5)

При записи этих выражений введены обозначения:  $R_l = \langle S_{f_l}^z \rangle, \ \Delta S_{f_l}^z = S_{f_l}^z - R_l, \ \theta_{l,l+1} = \theta_l - \theta_{l+1}.$  Угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  означают термодинамическое усреднение. Индекс подрешетки l определен по модулю 3 (например, индекс l = 4 относится к 1-й подрешетке, а l = 5 – второй). N – число узлов в подрешетке.

Углы  $\theta_l$  определяются из решения системы трех уравнений (l = 1, 2, 3):

$$3I(R_{l+1}\sin\theta_{l,l+1} - R_{l+2}\sin\theta_{l+2,l}) = gH\sin\theta_l, \quad (6)$$

которые получаются из условия равенства нулю коэффициентов при слагаемых, возникающих в гамильтониане  $\mathcal{H}_m$  после унитарного преобразования,

Письма в ЖЭТФ том 108 вып. 3-4 2018

и содержащих только один оператор  $S_{f_l}^x$ . Это гарантирует, что в приближении среднего поля (Mean Field Approximation – MFA) (т.е. при пренебрежении  $\mathcal{H}_{int}$ ) все средние  $\langle S_{f_l}^x \rangle = 0$ , и все вектора  $\mathbf{R}_l$  направлены вдоль новых осей  $z_l$ .

В действительности в системе уравнений (6) линейно независимыми являются только два уравнения. Имея ввиду только нетривиальные решения, запишем эти два уравнения в виде:

$$\sum_{l=1}^{3} R_l \sin \theta_l = 0, \quad \sum_{l=1}^{3} R_l \cos \theta_l = \frac{gH}{3I}.$$
 (7)

Из первого уравнения следует, что в MFA полный магнитный момент системы всегда ориентирован строго по направлению внешнего магнитного поля. Второе уравнение определяет величину полного магнитного момента в зависимости от поля.

Наличие только двух уравнений (7) для определения трех углов  $\theta_l$  означает сильное вырождение основного состояния в MFA. Как было показано в [3, 4], отмеченное вырождение снимается при учете квантовых флуктуаций. Следовательно, при низких температурах в качестве третьего уравнения на углы должно выступать уравнение, получаемое из минимизации термодинамического среднего от гамильтониана (3), учитывающего  $\mathcal{H}_{int}$ . Величина  $\langle \mathcal{H}_{int} \rangle$  определяется главным образом теми парными средними, которые не содержат оператор  $\Delta S_{f_l}^z$ . Для вычисления этих средних, а также величин  $R_l$ , введем мацубаровские  $\Phi\Gamma$ :

$$D_{\alpha\beta}^{(l,l')}(f_l - f_{l'}, \tau - \tau') = -\langle T_\tau \tilde{S}_{f_l}^\alpha(\tau) \tilde{S}_{f_{l'}}^{\bar{\beta}}(\tau') \rangle, \quad (8)$$

где  $T_{\tau}$  – оператор упорядочения по мнимому времени  $\tau$ , l и l' – номера магнитных подрешеток,  $\alpha$  и  $\beta$  принимают значения  $\pm$ , при этом  $\bar{\beta} = -\beta$ , а операторы  $\tilde{S}_{fl}^{\alpha}(\tau)$  заданы в гейзенберговском представлении  $\tilde{S}_{fl}^{\alpha}(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}'_m} S_{fl}^{\alpha} e^{-\tau \mathcal{H}'_m}$ .

Функции Грина (8) рассчитаем на основе диаграммной техники для спиновых операторов [18, 19], рассматривая в качестве гамильтониана возмущения оператор  $\mathcal{H}_{int}$ . В ноль-петлевом приближении графическая система уравнений для  $\Phi\Gamma$  имеет вид:

$$\frac{l}{\alpha} \frac{l'}{\alpha'} = \frac{l}{\alpha} + \frac{l}{\alpha} \frac{l}{\beta} \frac{l'}{\alpha'} + \frac{l}{\alpha} \frac{l'}{\beta} \frac{l'}{\alpha'} \qquad (9)$$

Здесь жирной линии с двойной стрелкой отвечает фурье-образ ФГ (8):  $D_{\alpha\beta}^{(l,l')}(k,i\omega_n)$ , где k – квазиимпульс, а  $\omega_n = 2n\pi T$  – четная мацубаровская частота  $(n \in Z)$ . Тонкой линией со стрелкой обозначен затравочный пропагатор:  $g_{\alpha}^{(l,l')}(i\omega_n) = \delta_{ll'}/(i\omega_n + \alpha H_l)$ , где

Письма в ЖЭТФ том 108 вып. 3-4 2018

 $\delta_{ll'}$  – символ Кронекера. Концевой множитель (темный полукруг в уравнении (9)) в рассматриваемом приближении равен  $2R_l$ . Волнистой линии сопоставляется взаимодействие между спинами из одной и той же треугольной решетки:

$$V_{\alpha\beta}^{(l,l')}(k) = \alpha I \gamma(\pm k) (\cos \theta_{ll'} + \alpha \cdot \beta \cdot 1)/4, \qquad (10)$$

где

$$\gamma(k) = 2\cos(k_x/2)\exp(ik_y/2\sqrt{3}) + \exp(-ik_y/\sqrt{3}),$$

а  $k_x$  и  $k_y$  заданы в единицах параметра решетки. В выражении (10) берется  $\gamma(+k)$ , если l' = l + 1 (mod 3), и  $\gamma(-k)$ , если  $l' = l + 2 \pmod{3}$ . Пилообразной линии в (9) отвечает взаимодействие между ближайшими спинами из разных треугольных решеток:  $V_{\alpha}^{\perp}(k) = \alpha 2I_{\perp} \cos k_z$ . По индексу  $\beta$  в (9) подразумевается суммирование.

Из условия совместности системы (9) находим три ветви спектра спин-волновых возбуждений, две из которых безщелевые. Первая безщелевая ветвь (голдстоуновская мода) линейна по квазиимпульсу k в окрестности центра зоны Бриллюэна. Вторая безщелевая ветвь квадратична по k и обуславливает отсутствие дальнего магнитного порядка при любой конечной температуре в чисто двумерных изотропных АФМТ. Учет слабой ферромагнитной связи между треугольными решетками позволяет стабилизировать дальний магнитный порядок при конечных T.

Выражая из системы (9)  $\Phi\Gamma$  (8) стандартным образом, получаем уравнения для нахождения средних значений  $R_l$  (l = 1, 2, 3), и выражения для парных корреляционных функций  $\langle S_{f_l}^{\alpha} S_{f_{l'}}^{\alpha'} \rangle$ . Последние используются для вычисления  $\langle \mathcal{H}'_m \rangle$ . Минимизация  $\langle \mathcal{H}'_m \rangle$  (при малых T) дает третье (в дополнение к (7)) уравнение для нахождения углов  $\theta_l$  (l = 1, 2, 3). Конкретный вид системы шести уравнений на величины  $R_l$  и  $\theta_l$  в силу их громоздкости не приводим.

Численные расчеты показывают, что для нетривиальных решений (когда все  $\theta_l$  не кратны  $\pi$ ) всегда выполняются условия:  $|\theta_3| = \theta_1$  и  $R_3 = R_1$  (см. рис. 1). При этом в Y-фазе  $\theta_3 = -\theta_1$  (и тогда  $\theta_2 = \pi$ ), а в V-фазе  $\theta_3 = \theta_1$ . Коллинеарное решение (uud-фаза) возникает только при одном значении магнитного поля  $H_{\text{sat}}/3$ .

3. Намагниченность АФМТ с учетом квантовых флуктуаций. Стабилизацию *uud*-фазы на конечном интервале магнитных полей можно получить, учтя квантово флуктуационные поправки для углов скоса намагниченности подрешеток. Углы скоса с учетом этих поправок обозначим посредством  $\tilde{\theta}_l$  (l = 1, 2, 3). Тип магнитной структуры (или фазы) теперь будет определяться углами  $\tilde{\theta}_l$ . Их значения можно найти из условия минимизации термодинамического потенциала  $\Omega(T) = -T \ln \text{Sp}\{e^{-\mathcal{H}'_m/T}\}$ :

$$\frac{gH}{3I}R_l\sin\tilde{\theta}_l = (R_lR_{l+1} + C_{l,l+1})\sin\tilde{\theta}_{l,l+1} + (R_lR_{l+2} + C_{l,l+2})\sin\tilde{\theta}_{l,l+2}, \qquad (11)$$

где, как и раныше,  $\tilde{\theta}_{l,l'} = \tilde{\theta}_l - \tilde{\theta}_{l'}$ , а индексы подрешеток l определены по модулю 3. Квантовые флуктуации в уравнении (11) проявляются посредством корреляционных функций  $C_{l,l'} = \langle S_{f_l}^x S_{f_{l'}}^x \rangle$ . При  $C_{l,l'} = 0$  уравнения (11) переходят в (6).

Складывая три уравнения (11), получаем соотношение:  $\sum_{l=1}^{3} R_l \sin \tilde{\theta}_l = 0$ , которое означает, что и с учетом квантовых флуктуаций поперечная намагниченность также равна нулю при всех значениях магнитного поля. Этот результат контрастирует с выводом работы [3], где отличная от нуля поперечная намагниченность была обнаружена в V-фазе.

Выражения, описывающие полевую зависимость продольной намагниченности  $M = \sum_{l=1}^{3} R_l \cos \tilde{\theta}_l$ , следуют из системы (11) и для каждой из трех фаз: Y, *uud* и V, могут быть представлены в виде:

$$M_Y = \frac{R_1 C_{12} - R_2 C_{13} + R_1^2 g H/3I}{R_1^2 + C_{13}},$$
  
$$M_{uud} = 2R_1 - R_2, \quad M_V = \frac{g H/3I}{1 + C_{12}/R_1 R_2}, \quad (12)$$

где учтено, что  $C_{12} = C_{23}$ .

İ

Анализ системы уравнений (11) и выражений (12) показывает, что при увеличении магнитного поля от нулевого значения Y-фаза переходит в коллинеарную uud-фазу при величине магнитного поля  $H_1$ меньшем  $H_{\text{sat}}/3$  (см. рис. 2). Аналогично, при уменьшении поля от значения  $H_{\text{sat}}$  неколлинеарная Vфаза переходит в uud-фазу при  $H_2 > H_{\text{sat}}/3$ . В интервале полей от  $H_1$  до  $H_2$  система (11) имеет только тривиальные решения, отвечающие uud-фазе. Как было показано в рамках спин-волновой теории при T = 0 [3, 4, 20], полевая зависимость намагниченности в этой фазе описывается строго горизонтальным участком с  $M = M_{\text{sat}}/3$ . В нашем подходе зависимость M(H) в области полей от  $H_1$  до  $H_2$  имеет слабый наклон, который хорошо виден на вставке рис. 2.

4. Гамильтониан АФМТ-полуметалла. Переходя к основной цели данной работы заметим, что резкая смена зависимости M(H) в точках  $H_1$  и  $H_2$  должна проявляться в свойствах коллективизированных электронов при условии, что они взаимодействуют с локализованными спинами достаточно



Рис. 2. (Цветной онлайн) Полевая зависимость намагниченности квазидвумерной модели Гейзенберга на треугольной решетке в приближении среднего поля (штриховая линия), и в ноль-петлевом приближении (сплошная линия). Параметры модели:  $I_z/I = 0.1$ ,  $T/I = 10^{-5}$ . На вставке в увеличенном масштабе показана область полей, где реализуется плато намагниченности

сильно. Для изучения указанных проявлений добавим в рассмотренную выше магнитную систему носители тока (электроны и дырки), движение которых ограничено пределами треугольных решеток и которые взаимодействуют с локализованными спинами посредством сильного s-d(f) – обменного взаимодействия. Будем также считать, что электронная и дырочная зоны незначительно перекрываются, образуя полуметалл с низкой концентрацией носителей тока. Гамильтониан такого АФМТ-полуметалла в магнитном поле имеет вид:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_J. \tag{13}$$

Оператор  $\mathcal{H}_m$  был определен выше уравнением (1).

Слагаемое  $\mathcal{H}_c$  в выражении (13) является оператором энергии носителей тока:

$$\mathcal{H}_{c} = \sum_{ij\lambda\sigma} ((\varepsilon_{\lambda} - \mu_{\lambda})\delta_{ij} + t_{ij}^{\lambda})c_{i\lambda\sigma}^{+}c_{j\lambda\sigma} + 2H\sum_{j}\sigma_{j\lambda}^{z}.$$
 (14)

В этом выражении  $c_{j\lambda\sigma}^+$  – оператор рождения электрона (если  $\lambda = e$ ) или дырки (если  $\lambda = h$ ) на узле j с проекцией спинового момента  $\sigma = \pm 1/2$ .  $c_{j\lambda\sigma}$  – соответствующий оператор уничтожения. Энергия связи и химпотенциал для частиц сорта  $\lambda$  обозначены посредством  $\varepsilon_{\lambda}$  и  $\mu_{\lambda}$  соответственно. При этом  $\mu_e = \mu$ , а  $\mu_h = -\mu$ . Интеграл туннелирования  $t_{ij}^{\lambda}$  отличен от нуля только для перескоков между ближайшими узлами из одной и той же треугольной решетки и равен

A

 $t^{\lambda}$ .  $\sigma_{j\lambda}^{z}$  – оператор *z*-проекции спина квазичастицы сорта  $\lambda$  на узле *j*.

Третье слагаемое в (13) учитывает s-d(f)обменное взаимодействие между локализованной и коллективизированной подсистемами с интенсивностью  $J^{\lambda}$ :

$$\mathcal{H}_J = \sum_{j\lambda} J^{\lambda} \mathbf{S}_j \boldsymbol{\sigma}_{j\lambda}, \qquad (15)$$

где  $\sigma_{j\lambda}$  – векторный оператор спина квазичастицы сорта  $\lambda$  на узле j.

В силу локальности s-d(f)-обменного взаимодействия оператор  $\mathcal{H}_J$  инвариантен относительно рассмотренного выше унитарного преобразования, отвечающего переходу к локальным системам координат.

Разобьем, как и раньше, систему на три подрешетки и, проводя унитарное преобразование оператора  $\mathcal{H}_c$ , перейдем к локальным системам координат. Закон трансформации для *с*-операторов в этом случае имеет вид:

$$c_{f_l\lambda\sigma}(\tilde{\theta}_l) = c_{f_l\lambda\sigma}\cos\tilde{\theta}_l/2 + 2\bar{\sigma}c_{f_l\lambda\bar{\sigma}}\sin\tilde{\theta}_l/2, \qquad (16)$$

где углы поворота  $\tilde{\theta}_l$  определяются исключительно динамикой локализованных спинов и вычисляются с учетом квантовых флуктуаций. Добавляя далее в преобразованный гамильтониан  $\mathcal{H}'_c$  среднеполевые вклады от оператора  $\mathcal{H}_J$  и осуществляя переход в *k*представление, получим гамильтониан коллективизированной подсистемы:

$$\mathcal{H}_{eh} = \sum_{kl\lambda\sigma} \left[ (\varepsilon_{\lambda} - \mu_{\lambda} - \sigma \bar{H}_l) c^+_{kl\lambda\sigma} c_{kl\lambda\sigma} + h_l c^+_{kl\lambda\sigma} c_{kl\lambda\bar{\sigma}} + \cos \frac{\tilde{\theta}_{l,l+1}}{2} \left( t^{\lambda}_k c^+_{kl\lambda\sigma} c_{k,l+1,\lambda\sigma} + H.C. \right) + 2\sigma \sin \frac{\tilde{\theta}_{l,l+1}}{2} \left( t^{\lambda}_k c^+_{kl\lambda\sigma} c_{k,l+1,\lambda\bar{\sigma}} + H.C. \right) \right].$$
(17)

При записи (17) были введены новые функции:  $\bar{H}_l = JR_l + 2H \cos \tilde{\theta}_l, h_l = H \sin \tilde{\theta}_l, t_k^{\lambda} = t^{\lambda} \gamma(k)$ . В обозначение *c*-оператора добавлен индекс решетки *l*, который, как и ранее, задан по модулю 3.

5. Энергетический спектр носителей тока. Дисперсионное уравнение, определяющее шесть ветвей фермиевского спектра носителей тока, следует из равенства нулю детерминанта системы уравнений движения для *c*-операторов  $i\dot{c}_{kl\lambda\sigma} = [c_{kl\lambda\sigma}, \mathcal{H}_{eh}]$ . Это уравнение имеет вид:

$$\begin{vmatrix}
A_{1}(\omega) & B_{12}(k) & B_{31}(k)^{*} \\
B_{12}(k)^{*} & A_{2}(\omega) & B_{23}(k) \\
B_{31}(k) & B_{23}(k)^{*} & A_{3}(\omega)
\end{vmatrix} = 0, \quad (18)$$

Письма в ЖЭТФ том 108 вып. 3-4 2018

где  $A_l$  и  $B_{ll'}$  (l, l' = 1, 2, 3) – матрицы  $2 \times 2$ :

$$A_{l}(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{\lambda} + \mu_{\lambda} & -\sigma \bar{H}_{l} - ih_{l} \\ -\sigma \bar{H}_{l} + ih_{l} & \omega - \varepsilon_{\lambda} + \mu_{\lambda} \end{pmatrix},$$
$$B_{ll'}(k) = -t_{k}^{\lambda} \begin{pmatrix} e^{i\sigma \tilde{\theta}_{ll'}} & 0 \\ 0 & e^{-i\sigma \tilde{\theta}_{ll'}} \end{pmatrix}.$$
(19)

Расчеты показывают, что две нижние ветви спектра являются вырожденными при H = 0, а при включении магнитного поля расщепляются. В режиме низкой концентрации носителей тока для этих ветвей можно использовать приближенное, квадратичное по k, выражение:  $E_{\lambda k} = \hbar^2 k^2 / 2m_{\lambda}^*$ . Эффективная масса  $m_{\lambda}^*$  может быть определена из анализа уравнения (18) при малых k. В силу громоздкости мы не будем приводить выражение для  $m_{\lambda}^*$ , но продемонстрируем на рис. 3 ту высокую точность, с которой приближение эффективной массы позволяет описывать фермиевский спектр в окрестности Гточки зоны Бриллюэна.



Рис. 3. (Цветной онлайн) Нижние ветви спектра электронных ( $\lambda = e$ ) состояний, рассчитанные из дисперсионного уравнения (18) (жирная штриховая линия) и в приближении эффективной массы (сплошная линия). Штрих-пунктирная линия отвечает спектру дырочных ( $\lambda = h$ ) состояний валентной зоны. Положение химпотенциала  $\mu$  обозначено тонкой штриховой линией. На вставке в увеличенном масштабе показана окрестность Г-точки зоны Бриллюэна на уровне  $\mu$ . Параметры модели (в Эв):  $t^e = t^h = -1$ ,  $J^e = J^h = 1$ , I = 0.004,  $H = 2.4 \cdot 10^{-3}$ . Г-точка зоны Бриллюэна имеет координаты (0,0), а *K*-точка – ( $\pi$ ,0)

Из рисунка 3 видно, что спектры, рассчитанные из уравнения (18), и в приближении эффективной массы совпадают практически на половине объема зоны Бриллюэна. При построении электронной и дырочной ветвей спектра значения параметров  $\varepsilon_{e(h)}$  и химпотенциала  $\mu$  были выбраны так, чтобы выполнялось условие электрон-дырочной компенсации, а концентрация носителей тока была низкой,  $\sim 10^{20} \, \text{см}^{-3}$ . Эффективная масса  $m_{\lambda}^*$  оказывается равной массе свободного электрона, если, при указанных на рис. 3 параметрах модели, параметр треугольной решетки  $a = 3.5 \cdot 10^{-8}$  см. При выбранном значении обменного взаимодействия (I = 0.004 эВ) величина магнитного поля  $H = 2.4 \cdot 10^{-3}$  эВ отвечает левой окрестности левой границы плато намагниченности локализованной подсистемы (см. рис. 2). При таком значении магнитного поля расщепление вырожденных при H = 0 нижних ветвей фермиевского спектра настолько велико, что заполненной оказывается только одна нижняя зона.

6. Квантовые осцилляции намагниченности в **АФМТ-полуметаллах.** Как было показано в работе [16], для АФМ-полуметаллов на квадратной решетке, обусловленное увеличением магнитного поля, изменение магнитного момента локализованных спинов, вследствие сильной s-d(f)-обменной связи, может приводить к движению дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. В условиях электрондырочной компенсации, при котором возникает пиннинг химпотенциала, это может служить дополнительным (наряду с обычным) механизмом движения уровней Ландау относительно  $\mu$ , и, как следствие, приводить к изменению частоты осцилляций де Гааза-ван Альфена (дГвА) в окрестности полей, где зависимость M(H) резко меняет свой характер. В работе [16] таким полем было поле спин-флипперехода. В рассматриваемом здесь случае АФМТполуметалла, помимо точки спин-флип перехода, резкое изменение M(H) наблюдается также в точках  $H_1$  и  $H_2$  (см. рис. 2). Следовательно при этих полях в АФМТ-полуметалле можно также ожидать аномального поведения эффекта дГвА.

Для проверки данного предположения, рассчитаем осцилляции намагниченности коллективизированной подсистемы, воспользовавшись формулой Лифшица–Косевича для двумерного электронного газа:

$$M_{\sim} = A \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n \cos\left(\frac{m_{\lambda}^*}{m} \pi n\right) \sin\left(\frac{2\pi\tilde{\mu}}{\hbar\omega_H} n\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_H} n\right)}, \quad (20)$$

где  $\tilde{\mu}$  – энергия Ферми,  $\omega_H = eH/m_{\lambda}^*c$  – циклотронная частота, m – масса свободного электрона. Амплитуда осцилляций, без учета процессов рассеяния, может быть записана в виде:  $A = -2T\tilde{\mu}m_{\lambda}^*\mu_B/\hbar^2Ha_z$ , где  $\mu_B$  – магнетон Бора, а расстояние между тре-

угольными плоскостями  $a_z = 6 \cdot 10^{-8}$  см. Для простоты параметры электронной и дырочной подзон были выбраны одинаковыми (см. подпись к рис. 3).

Результаты расчетов намагниченности  $M_{\sim}$  по формуле (20) представлены на рис. 4. Как и ожидалось в окрестности полей  $H_1$  и  $H_2$  действительно наблюдается резкая смена частоты осцилляций намагниченности коллективизированной подсистемы.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Квантовые осцилляции намагниченности АФМТ-полуметалла. Параметры модели такие же, как и на рис. 2, 3

7. Заключение. В заключение отметим важное значение квантовых флуктуаций и s-d(f)-обменной связи для наблюдения аномалий  $M_{\sim}$ , представленных на рис. 4. Квантовые флуктуации приводят к возникновению плато намагниченности локализованных спинов, а s-d(f)-обменная связь обеспечивает дополнительный механизм движения уровней Ландау при изменении магнитного поля.

Заметим также, что использованный в работе диаграммный метод разработан для описания свойств квантовых магнетиков при конечных температурах. Однако расчеты как M, так и  $M_{\sim}$  были выполнены при достаточно низкой температуре  $T/I = 10^{-5}$ . Поэтому для селекции случайно вырожденных состояний достаточно было минимизировать энергию (среднее от гамильтониана). При бо́льших температурах, очевидно, следует минимизировать свободную энергию. В этой связи отметим, что в недавней работе [21] была построена фазовая H-Tдиаграмма соединения CsCuCl<sub>3</sub>, модель которого отличалась от модели (1), во-первых, наличием анизотропии  $\Delta$  обменного взаимодействия между плоскостями, а во-вторых, отношением параметров обмена:  $|I_{\perp}| \gg I$  (в нашем случае  $|I_{\perp}| \ll I$ ). При  $\Delta = 0$  низкотемпературная область фазовой H-T-диаграммы, полученной в [21] в рамках спин-волнового приближения, хорошо согласуется с результатами наших расчетов, использующих диаграммный метод. Поскольку, однако, явная зависимость M(H) в работе [21] не приводится, то не представляется возможным проверить наш вывод о слабом наклоне функции M(H) в той области магнитных полей, где обычно ожидается строго горизонтальное плато намагниченности локализованных спинов с  $M = M_{\rm sat}/3$ (см. рис. 2). Полученный нами слабый положительный наклон функции M(H) обусловлен использованием в рамках диаграммного метода ноль-петлевого приближения, которое явным образом учитывает эффекты квантового сокращения спина.

Наконец отметим, что низкая концентрация носителей тока позволила не только обосновать применение приближения эффективной массы при расчете  $M_{\sim}$ , но и ограничиться учетом только квантовых флуктуаций при селекции вырожденных конфигураций в подсистеме локализованных спинов. При значительной степени легирования и наличии s-d(f)обменной связи влияние коллективизированной подсистемы само по себе (помимо квантовых флуктуаций) может служить фактором, снимающем вырождение в локализованной подсистеме.

Авторы выражают благодарность профессору В.В. Валькову за полезные обсуждения и ценные замечания. Исследование проведено при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований в рамках проектов #16-02-00073 и #18-02-00837.

- 1. Р.С. Гехт, УФН **159**, 261 (1989).
- H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Japan. 54, 4530 (1985).
- Д.И. Голосов, А.В. Чубуков, Письма в ЖЭТФ 50 416 (1989).

- A. V. Chubukov and D. I. Golosov, J. Phys.: Condens. Matter 3, 69 (1991).
- H. Kitazawa, H. Suzuki, H. Abe, J. Tang, and G. Kido, Physica B 259–261, 890 (1999).
- L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, A. Micheler, N. Büttgen, A. Ya. Shapiro, and L. N. Demianets, Phys. Rev. B 74, 024412 (2006).
- A.I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura, M. Hagiwara, Y. Narumi, K. Kindo, A. Kikkawa, K. Katsumata, A. Ya. Shapiro, and L. N. Demianets, Phys. Rev. B 75, 134412 (2007).
- Y. Shirata, H. Tanaka, A. Matsuo, and K. Kindo, Phys. Rev. Lett. **108**, 057205 (2012).
- R. Ishii, S. Tanaka, K. Onuma, Y. Nambu, M. Tokunaga, T. Sakakibara, N. Kawashima, Y. Maeno, C. Broholm, D. P. Gautreaux, J. Y. Chan, and S. Nakatsuji, EPL **94**, 17001 (2011).
- 10. M. Ogata, J. Phys. Soc. Japan 72, 1839 (2003).
- 11. G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. 91, 097003 (2003).
- Y. Kobayashi, M. Yokoi, and M. Sato, J. Phys. Soc. Japan 72, 2453 (2003).
- M. M. Korshunov and I. Eremin, Phys. Rev. B 77, 064510 (2008).
- В. В. Вальков, А.О. Злотников, Письма в ЖЭТФ 104, 512 (2016).
- J. M. Ok, Y. J. Jo, K. Kim, T. Shishidou, E. S. Choi, Han-Jin Noh, T. Oguchi, B. I. Min, and J. S. Kim, Phys. Rev. Lett. **111**, 176405 (2013).
- В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, ФТТ **39**, 204 (1997).
- Д. М. Дзебисашвили, А. А. Худайбердыев, ФТТ 58, 1041 (2016).
- 18. Р.О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, Квазичастицы в сильно коррелированных системах, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001), 277 с.
- T. Coletta, T. A. Toth, K. Penc, and F. Mila, Phys. Rev. B 94, 075136 (2016).
- M. Hosoi, H. Matsuura, and M. Ogata, J. Phys. Soc. Japan, 87, 075001 (2018).