

**ОБ АНОМАЛЬНОЙ H -ЗАВИСИМОСТИ АМПЛИТУДЫ
ОСЦИЛЛЯЦИЙ ДЕ ГААЗА – ВАН АЛЬФЕНА В $CeCu_2Si_2$**

В.В.Вальков¹⁾, Д.М.Дзедзисашвили
Институт физики Сибирское отделение РАН
660036 Красноярск, Россия

Красноярский государственный университет
660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 15 января 1998 г.

Рассмотрен эффект де Гааза – ван Альфена в тяжелофермионных антиферромагнетиках в окрестности спин-флип-перехода. Показано, что учет сильных одноузельных корреляций и магнитного упорядочения в подсистеме локализованных электронных состояний позволяет объяснить экспериментально наблюдаемое в $CeCu_2Si_2$ сильное возрастание амплитуды осцилляций в окрестности спин-флип-точки при увеличении магнитного поля.

PACS: 71.25.Nc, 71.28.+d

Электронная структура тяжелофермионных соединений остается одним из наиболее интригующих объектов физики сильнокоррелированных систем. Появление новых сценариев низкотемпературного поведения веществ этого класса активизировало постановку экспериментальных исследований, направленных на выяснение строения их основного состояния. В этом отношении особая роль отводится исследованию эффекта де Гааза – ван Альфена (дГВА), позволяющему непосредственно определять характеристики фермиевских квазичастиц.

Экспериментальное обнаружение [1–3] отчетливых осцилляций намагниченности (в дальнейшем дГВА-осцилляций) в сильном магнитном поле в тяжелых фермионах подтвердило факт существования в них ферми-поверхности и наличие квази-фермиевских возбуждений в низкотемпературной области. Однако проявление ряда особенностей в осциллирующей зависимости намагниченности затрудняет обработку экспериментальных данных непосредственно по классической теории Лифшица – Косевича [4]. Так, например, изучение эффекта дГВА в тяжелофермионном сверхпроводнике $CeCu_2Si_2$ выявило два нетривиальных момента [3]. Во-первых, было обнаружено, что при возрастании магнитного поля, когда происходит переход через спин-флип-точку, имеет место резкая смена периода дГВА-осцилляций. Вторая особенность заключается в аномально сильной зависимости амплитуды дГВА-осцилляций от магнитного поля (H -зависимость) в окрестности спин-флип-перехода. Если в обычном эффекте дГВА увеличение амплитуды становится заметным лишь через большое число дГВА-осцилляций, то в $CeCu_2Si_2$ существенное возрастание амплитуды наблюдалось уже для соседних всплесков намагниченности. Такое поведение имело место как слева, так и справа от точки фазового спин-флип-перехода.

$CeCu_2Si_2$ является тяжелофермионным антиферромагнитным сверхпроводником. В области низких температур ($T < T_N \cong 0.5$ K) устанавливается дальний антиферромагнитный порядок. Наблюдение эффекта дГВА осуществлялось при магнитных полях, больших второго критического поля H_{c2} , когда $CeCu_2Si_2$ находился в нормальном состоянии. Низкая температура Нееля означает, что интегралы обменных

¹⁾ e-mail: vvv@iph.krasnoyarsk.su

взаимодействий относительно малы. Поэтому квантующее магнитное поле вызывает сильный скос антиферромагнитных подрешеток, а в магнитных полях $H \sim 7$ Тл имеет место фазовый переход из скошенной антиферромагнитной фазы в коллинеарную ферромагнитную фазу. Таким образом, эффект дГВА в CeCu_2Si_2 наблюдался в условиях сосуществования с фазовым спин-флип-переходом. Использование этого факта позволило объяснить резкую смену периода дГВА-осцилляций при переходе через спин-флип-точку в проводящих антиферромагнетиках [5, 6]. Ключевым моментом в интерпретации смены периода явилось учтывание сильной полевой зависимости антиферромагнитного параметра порядка в окрестности спин-флип-точки, а также влияния этого параметра на электронную структуру.

В настоящей работе представлены результаты теоретического рассмотрения эффекта дГВА в антиферромагнитном тяжелофермионном соединении в окрестности спин-флип-перехода. Главным результатом является объяснение экспериментально наблюдаемого в CeCu_2Si_2 аномально сильного нарастания дГВА-амплитуды при увеличении внешнего магнитного поля. Показано, что физический механизм, ответственный за такую аномалию, формируется в результате совместного действия сильных одноузельных корреляций и дальнего магнитного порядка.

Для описания аномального возрастания амплитуды осцилляций в CeCu_2Si_2 рассмотрим периодическую модель Андерсона, включающую, кроме обычных для этой модели слагаемых гамильтониана, взаимодействия, приводящие к формированию дальнего антиферромагнитного порядка. В этом случае гамильтониан системы может быть записан в виде

$$H = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_{0\sigma} - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \\ + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{fk\sigma} (V_k \exp(-ikR_f) c_{k\sigma}^+ X_f^{0\sigma} + \text{н.с.}) - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}) - J \sum_f (\mathbf{S}_f \vec{\sigma}_f), \quad (1)$$

где первое слагаемое описывает систему зонных электронов с энергией $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - 2\sigma\mu_B H$, $\sigma = \pm 1/2$ во внешнем магнитном поле H и химпотенциалом μ . Второй член гамильтониана описывает подсистему локализованных электронных состояний в атомном представлении: $X_f^{\sigma\sigma}$, $X_f^{0\sigma}$ – операторы Хаббарда, $E_{0\sigma} = E_0 - \sigma g\mu_B H$, E_0 – энергия локализованного уровня в парамагнитной фазе. Здесь для простоты изложения мы ограничились рассмотрением простейшего случая, когда в базис локализованных состояний включены состояния без электронов и состояния с одним электроном и проекцией спинового момента на ось z , равной σ . Третье слагаемое в (1) учитывает гибридизационные процессы между коллективизированной и локализованной подсистемами. Взаимодействие, формирующее антиферромагнитный порядок в подсистеме локализованных электронов, представлено четвертым слагаемым гамильтониана. \mathbf{S}_f – векторные операторы спинового момента, относящиеся к узлу f кристаллической решетки. Наконец, последний член в (1) учитывает $s - f$ -обменную связь между двумя группами электронов.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением области магнитных полей, расположенной справа от точки спин-флип-перехода. В этом случае в подсистеме локализованных электронных состояний устанавливается ферромагнитное упорядочение спиновых моментов. Для вывода уравнений самосогласования, описывающих низкотемпературную термодинамику системы, использовались мацубаровские функции

Грина, построенные как на обычных фермиевских операторах вторичного квантования, так и на операторах Хаббарда. При этом, кроме обычной фермиевской диаграммной техники, использовалась также диаграммная техника для операторов Хаббарда. Не останавливаясь на деталях вычислений, приведем систему уравнений для термодинамических средних, приводящих к перенормировкам параметров электронной структуры в ферромагнитной фазе:

$$\langle X^{\sigma\sigma} \rangle = \exp(-(\tilde{E}_\sigma - \mu)/T) / Z + \frac{1}{N} \sum_k (\psi_{k\sigma} - 2\sigma\phi_k), \quad (2)$$

где

$$Z = 1 + \exp\left(-\left(\tilde{E}_\uparrow - \mu\right)/T\right) + \exp\left(-\left(\tilde{E}_\downarrow - \mu\right)/T\right),$$

$$\psi_{k\sigma} = \frac{E_{k\sigma}^+ - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}}{2\nu_{k\sigma}} f\left(\frac{E_{k\sigma}^+ - \mu}{T}\right) + \frac{\tilde{\epsilon}_{k\sigma} - E_{k\sigma}^-}{2\nu_{k\sigma}} f\left(\frac{E_{k\sigma}^- - \mu}{T}\right) - f\left(\frac{\tilde{E}_\sigma - \mu}{T}\right),$$

$$\phi_k = n_k - \left(\exp\left(\frac{\bar{H}}{T}\right) - 1\right)^{-1}, \quad n_k = (\exp(\omega_k/T) - 1)^{-1}, \quad f(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}.$$

Входящие в эти выражения перенормированные энергетические параметры имеют вид $\tilde{E}_\sigma = E_0 - \sigma\bar{H}$, $\tilde{\epsilon}_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma} - \sigma JR$, $\bar{H} = g\mu_B H + I_0 R + J\langle\sigma^z\rangle$. Связанный с гибридизационным взаимодействием миксонный спектр описывается следующими формулами:

$$E_{k\sigma}^\pm = \left(\tilde{E}_\sigma + \tilde{\epsilon}_{k\sigma}\right) / 2 \pm \nu_{k\sigma}, \quad \nu_{k\sigma} = \left(\left(\tilde{E}_\sigma - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}\right)^2 / 4 + K_\sigma V_k^2\right)^{1/2}.$$

Для дальнейшего существенно, что учет сильных одноузельных корреляций приводит к перенормировке эффективной константы гибридизационного взаимодействия. Формально это проявляется в появлении в подкоренном выражении для $\nu_{k\sigma}$ множителя $K_\sigma = \langle X^{\sigma\sigma} \rangle + \langle X^{00} \rangle$. Наиболее сильно эта перенормировка сказывается в насыщенном ферромагнитном состоянии, когда $K_\uparrow = 1$, а $K_\downarrow = 0$. В этом случае для электронов со спиновым моментом, ориентированным по полю, гибридизационный канал остается полностью открытым, тогда как для электронов с противоположной спиновой поляризацией гибридизационные процессы полностью подавлены. Поскольку же гибридизационное смешивание сильно влияет на эффективную массу фермиевской квазичастицы, то отмеченная ренормировка гибридизационной константы существенно влияет на амплитуду эффекта дГВА. В частности, изменение степени упорядоченности в подсистеме локализованных электронных состояний будет сказываться на величине дГВА-амплитуды.

Для расчета эффекта дГВА в правой окрестности спин-флип-перехода в условиях гибридизационного смешивания зонных и локализованных электронных состояний применим технику суммирования по мацубаровским частотам с представлением электронных пропагаторов в виде контурных интегралов в комплексной области [7]. Эта техника для магнитоупорядоченных полупроводниковых систем была применена в работе [8]. В нашем случае осциллирующая часть намагниченности зонных электронов может быть записана в виде

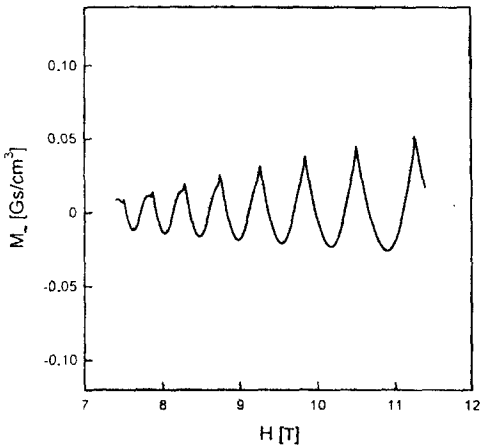
$$M_\sim = - \sum_\sigma \sum_{k=1}^\infty \sum_{\omega_n > 0} \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} A_{k\sigma}(\omega_n) \sin\left(2\pi k \frac{\tilde{\mu}_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} + \varphi_\sigma\right), \quad (3)$$

где "парциальные" амплитуды определяются выражениями

$$A_{k\sigma}(\omega_n) = \left(\frac{TVe\tilde{\mu}_{n\sigma}}{\pi\hbar^2c} \right) \left(\frac{m_{||}}{\hbar\omega_c} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{2\pi k\omega_n\alpha_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} \right), \quad \alpha_{n\sigma} = 1 + \Gamma_{n\sigma},$$

$$\Gamma_{n\sigma} = K_{\sigma} |v|^2 \{ \omega_n^2 + (\tilde{E}_{\sigma} - \mu)^2 \}^{-1}, \quad \tilde{\mu}_{n\sigma} = \mu + \sigma JR + (\tilde{E}_{\sigma} - \mu)\Gamma_{n\sigma}. \quad (4)$$

Использование результатов численного решения уравнений самосогласования для средних $\langle X^{\sigma\sigma} \rangle$, химпотенциала μ и $\langle \sigma^z \rangle$, позволило по формулам (3),(4) проанализировать эффект дГВА в правой окрестности спин-флип-перехода. На рисунке показана рассчитанная таким образом осциллирующая часть намагниченности зонных электронов. При проведении вычислений использовались следующие значения параметров модели: $J = 0.5$ эВ, $V = 0.05$ эВ, $T = 0.1$ К, $m = 0.1m_0$, $I_0 = -8.1 \cdot 10^{-4}$ эВ, $E_0 = 0.3$ эВ. Выбор значений части параметров диктовался, в частности, экспериментальными данными по CeCu_2Si_2 . Так, например, $H_c \cong 7$ Тл, а период осцилляций подбирался путем варьирования параметров, таким, как в эксперименте [3]. Положение локализованного уровня задавалось, исходя из требования получения большого значения электронной теплоемкости. Представленные на рисунке осцилляции происходят только от одной спиновой подзоны, соответствующей антипараллельному с магнитным полем направлению собственного магнитного момента электрона. Амплитуда осцилляций намагниченности от другой спиновой подзоны очень мала, и соответствующий вклад в эффект дГВА отсутствует. Видно, что при увеличении магнитного поля имеет место сильное нарастание амплитуды дГВА-осцилляций, такое, что соседние всплески намагниченности отличаются по амплитуде на значительную величину.



Осциллирующая часть намагниченности в правой окрестности спин-флип-перехода тяжелофермионного антиферромагнетика

Физический механизм аномального нарастания амплитуды заключается в следующем. В точке спин-флип-перехода щель в спектре спин-волновых возбуждений равна нулю. Поэтому относительно легко осуществляется термическое возбуждение спиновых волн. Это приводит к заметному уменьшению намагниченности. По мере возрастания магнитного поля растет щель в спектре спин-волновых возбуждений. Такое увеличение активационной энергии существенно уменьшает концентрацию термически возбужденных магнонов. Поэтому намагниченность стремится к своему максимальному значению.

Магнитное упорядочение в подсистеме локализованных электронных состояний обуславливает снятие вырождения этих состояний по направлению спинового момента. Поскольку энергетическая разность $\tilde{E}_\downarrow - \tilde{E}_\uparrow$ много больше температуры, то заселенными оказываются лишь уровни, соответствующие коллинеарному с магнитным полем направлению локализованного магнитного момента. Это обстоятельство, наряду с наличием сильных электронных одноузельных корреляций, определяет разные интенсивности процессов гибридизации зонных и локализованных электронов. Так, гибридизационный канал рассеяния для электронов, обладающих спиновой поляризацией, ориентированной по полю, остается открытым. Поэтому электронные состояния соответствующих спиновых подзон являются сильно гибридизованными и обладают большой эффективной массой (химпотенциал находится вблизи значения \tilde{E}_\uparrow). Это приводит к большому значению электронной теплоемкости при низких температурах.

Иная ситуация реализуется для электронных состояний с противоположной ориентацией спиновых моментов. Для них перенормировка константы гибридизации за счет хаббардовских корреляций становится настолько существенной, что имеет место значительное (в предельном случае полное) подавление гибридизационного канала рассеяния. Электронные состояния с такой (в дальнейшем отрицательной) поляризацией спинового момента остаются слабо гибридизованными. Для них амплитуда эффекта дГВА остается достаточно большой для экспериментального фиксирования отчетливых осцилляций намагниченности при возрастании магнитного поля. Термическое возбуждение магнонов обуславливает возрастание среднего $\langle X^{\uparrow\downarrow} \rangle$, что вызывает рост эффективной константы гибридизации для электронов со спином "вниз". Поэтому при увеличении температуры происходит быстрое уменьшение амплитуды дГВА-осцилляций, наблюдаемое экспериментально во всех тяжелофермионных соединениях. Противоположная картина будет иметь место, если по каким-либо причинам уменьшить $\langle X^{\uparrow\downarrow} \rangle$. Этого можно достичь, например, путем увеличения внешнего магнитного поля. В окрестности спин-флип-перехода такое воздействие магнитным полем оказывается особенно эффективным. Действительно, при относительно небольшом изменении поля H от $H = H_c$ до H такого, что $H - H_c \gg T$, происходит настолько значительное возрастание активационной энергии магнонов, что спин-волновые возбуждения в системе отсутствуют и $\langle S^z \rangle$ стремится к своему максимальному значению, а эффективная константа гибридизации для электронов с отрицательной спиновой поляризацией стремится к нулю. Это и приводит к аномально быстрому увеличению амплитуды дГВА-осцилляций.

При увеличении температуры обсуждаемая аномалия H -зависимости дГВА-амплитуды будет проявляться более сильно. Это связано с возросшим числом термически возбужденных магнонов. Поэтому при увеличении H от $H = H_c$ до $H - H_c \gg T$ изменение намагниченности будет происходить на большую величину. В результате относительное изменение амплитуды осцилляций будет становиться также больше.

В заключение отметим, что рассмотренный механизм аномальной H -зависимости амплитуды осцилляций будет проявляться во всех антиферромагнитных тяжелофермионных соединениях с низкими температурами Нееля. Важно лишь, чтобы значение поля H_c , при котором происходит спин-флип-переход, находилось в пределах области полей, где наблюдается эффект дГВА. Существенно, что исследу-

дование рассмотренной аномалии несет, кроме обычной информации о свойствах ферми-системы, дополнительные сведения о магнитоупорядоченной подсистеме локализованных состояний.

Работа выполнена при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки (грант 6F0150).

-
1. P.H.P.Reinders, M.Springford, P.T.Coleridge, et al., Phys. Rev. Lett. **57**, 1631 (1986).
 2. L.Taillefer and 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. И.М.Лифшиц, М.Я.Азбель, М.И.Каганов, *Электронная теория металлов*, М.: Наука, 1971.
 5. В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили, ФТТ **39**, 204 (1997).
 6. В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили, ФММ **84**, 30 (1997).
 7. A.Wasserman, M.Springford, and A.C.Hewson, J.Phys.: Condens. Matter **1**, 2669 (1989).
 8. В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили, ЖЭТФ **111**, 654 (1997).