Вплив сильних електромагнітних полів на гальваномагнітні характеристики халькогенідних шпінелей

В.В.Іванко, Т.Д.Дідора

Дослідження впливу сильних електромагнітних полів на кінетичні характеристики матеріалів з вузькими енергетичними зонами провідності (ВЕЗП) має значний як теоретичний, так і практичний інтерес.

На основі узагальненої моделі Хаббарда методом матриці густини проведемо розрахунок густини струму в системі з ВЕЗП. В якості дисипативного фактору в процесі електропереносу розглянемо сильну взаємодію електронів з оптичними коливаннями вузлів кристалічної гратки , які приводять до ефекту поляронів малого радіуса в ВЕЗП [1].

Вихідним є рівняння руху для матриці густини :

$$i\eta\frac{\partial\rho_T}{\partial t}=i\eta\frac{\partial\rho'}{\partial t}=\left[H_T,\rho_T\right]=\left[H_T,\rho'\right]+\left[V,\rho\right], \qquad (1)$$

де - гамільтоніан і матриця густини при E=0 (E$\neq$0), E – напруженість зовнішнього електричного поля. ρ в (1) характеризує взаємодію електронів з полем і явний вигляд якого :

З рівняння (1) отримаємо :

$$\rho'=-\frac{i}{\eta}\int\limits_0^t dt'\exp\left[-\frac{i}{\eta}H_T(t-t')\right]\cdot\left[V,\rho\right]\cdot\exp\left[\frac{i}{\eta}H_T(t-t')\right]. \qquad (2)$$

Електричний струм визначається так : де $\hat{j}-$оператор струму.

Гамільтоніан системи має вигляд :

,

$$H_{el}=\frac{U}{2}\sum_{i\alpha\sigma}n_{i\alpha\sigma}n_{i\beta-\sigma}-\frac{U-I_H}{2}\sum_{i,\alpha\neq\beta,\sigma}n_{i\alpha\sigma}n_{i\beta\sigma},$$

$$H_{ph}=\sum_{\vec q}\eta\Omega(\vec q)(b^+_{\vec q}b_{\vec q}+\frac{1}{2});H_{el-ph}=\sum_{k\vec q}\Lambda(\vec q)a^+_{\vec k+\vec q,\alpha\sigma}a_{\vec k\alpha}(b_{\vec q}+b_{-\vec q}),$$

де $t^{\alpha\beta}_{ij}-$інтеграл переносу електронів; $i,j-$номери вузлів, σ- спінове квантове число, $a^+_{i\alpha\omega},a_{i\alpha\sigma}-$оператори народження і знищення

електронів, U,I_H- енергія кулонівської і енергія обмінної взаємодії

електронів, які локалізовані на одному вузлі.

$\eta\Omega(\vec q)-$енергія оптичних фононів; $b^+_{\vec q},b_{\vec q}-$оператори народження і знищення фононів з квазіімпульсом $\vec q$. $\Lambda(\vec q)$ - функція електрон-фононного зв'язку. Σ' означає сумування по z найближчим сусідам.

Використаємо методику розрахунку, яка запропонована Барі для системи сильно корелюючих електронів і розвинена Фірсовим для поляронів малого радіуса [2]. В силу малості ширини d-зони електронів і її поляронного звуження розрахунок $j(t)$ проводимо в лінійному по t^2 наближенні. Обґрунтованість цього припущення зумовлюється співвідношенням $|U| >> |t_{ij}^{\alpha\beta}|$, $kT >> |t_{ij}|$, що має фізичне підґрунтя.

Розрахунок шпура можна зробити, якщо звести гамільтоніан до суми одновузельних гамільтоніанів, тобто подати його в діагональному вигляді. В H_{ph}, H_{el-ph} переходимо до вузельного представлення з допомогою співвідношень:

$$Q_i = N^{-\frac{1}{2}}\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}R_i}(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}), P_i = N^{-\frac{1}{2}}\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}R_i}(b_{\vec{q}} - b_{-\vec{q}}),$$

де $Q_i, P_i -$ оператори координати і імпульсу, які описують коливальний рух $i-$го вузла. Тоді гамільтоніан H_0 запишеться у вигляді:

$$H_0^` = \sum_i H_0^i; H_0^i = H_{el}^i + H_{el-ph}^i + H_{ph}^i; H_{el}^i = \frac{U}{2}\sum_{\alpha\beta\sigma} n_{i\alpha\sigma}n_{i\beta-\sigma} + \frac{U_1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta,\sigma} n_{i\alpha\sigma}n_{i\beta\sigma};$$
$$H_{ph} = \frac{\hbar\Omega}{2}(P_i^2 + Q_i^2); H_{tl-ph}^i = \Lambda\sum_{\alpha\sigma} Q_i n_{i\alpha\sigma}; U_1 = U - I_H. \quad (3)$$

При запису (3) було не враховано дисперсію фононів $\hbar\Omega(\vec{q}) \approx \hbar\Omega$ і дисперсією електрон-фононної взаємодії $\Lambda(\vec{q}) \approx \Lambda,$ що можна вважати достатньо хорошим наближенням у випадку оптичних фононів.

Розрахуємо прямим визначенням шпуру статистичну суму системи :

$$Z = Sp\left\{e^{iS}\exp\left[-\beta(H_o^` - \mu\hat{N}_{el})\right]e^{-iS}\right\}, \hat{N}_{el} = \sum_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma}.$$

Використаємо розклад експоненти у вигляді нескінченного ряду, проведемо розклад

$$\breve{H}_o^` = e^{iS}H_o^` e^{iS}, \breve{N}_{el}^` = e^{iS}\hat{N}e^{-iS}.$$

В результаті розрахунків отримаємо вираз для $\breve{H}_0$:

$$\breve{H}_0 = \frac{U-\Gamma}{2}\sum_{i\alpha\beta\sigma} n_{i\alpha\sigma}n_{i\beta-\sigma} + \frac{U_1-\Gamma}{2}\sum_{i,\alpha\neq\beta,\sigma} n_{i\alpha\sigma}n_{i\alpha\sigma} - \frac{\Gamma}{2}\sum_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} + \frac{\hbar\Omega}{2}\sum_i (P_i^2 + Q_i^2), \Gamma = \frac{\Lambda^2}{\hbar\Omega} -$$

поляронний зсув. Врахування електрон-фононної взаємодії звівся до перенормування між електронної взаємодії електронів на одному вузлі.

Так як в $\breve{H}_0$ адитивно входить електронний і фононний гамільтоніан, то статистична сума може бути записана у вигляді добутку статистичних сум електронної і фононної підсистеми $Z = Z_{el}Z_{ph}$, де Z_{ph} - визначає статистичну суму гармонічних осциляторів. $Z_{ph} = \exp(-\beta\frac{\hbar\Omega}{2}\sum_i (P_i^2 + Q_i^2)$. Статистична сума електронної підсистеми знаходилася шляхом перебору всіх 16-ти можливих електронних конфігурацій на вузлі.

$$Z_{el}{}' = 1 + 4e^{-\beta\mu'} + 4e^{\beta(2\mu'-U')} + 2e^{\beta(2\mu'-U_1)} + 4e^{\beta(2\mu'-2U'-U_1')} + e^{\beta(4\mu'-2U'-2U_1')}, U_1{}' = U_1 - \Gamma, U' = U - \Gamma,$$

$$\mu' = \mu + \frac{\Gamma}{2}, Z = (Z_{el}{}')^{N_0}, Z_{el}' -$$

статистична сума електронів одного вузла.

Співвідношення між повним числом електронів і незбуреним хімічним потенціалом визначається Оператор густини струму визначається

$$j = \frac{ie}{\eta}\left[H, \sum_{i\alpha\sigma} R_i n_{i\alpha\sigma}\right] = \frac{ie}{\eta}\sum_{ij\alpha\beta\sigma} t_{ij}(R_i - R_j) a^{+}_{i\alpha\sigma} a_{j\beta\sigma}.$$

Розклад матриці густини у випадку малості t_{ij}:

$$\rho = \rho_0 + \rho_1, \rho_0 = Z^{-1}e^{-\beta(H_0 - \mu\hat{N})}, \rho_1 = Z^{-1}e^{-\beta(H_0-\mu\hat{N})}\int_0^{\beta} dt_1 e^{t_1(H_0-\mu\hat{N})} H' e^{-t_1(H_0-\mu\hat{N})}.$$

Струм розраховувався у другому порядку по t_{ij}

$$j(t) = j_0 \frac{e^{\beta F} - 1}{Z_{el}^2}\begin{Bmatrix} \exp(A(F+\Gamma)^2 + \beta\mu) + \exp(A(F+U_1)^2 + 2\beta\mu) + \exp(A(F-U-2\Gamma)^2 - \beta(U_1 - 2\mu) + \\ + \exp(A(F+\Gamma)^2 - \beta(U_1 - 3\mu)) \end{Bmatrix}$$

$$j_0 = \frac{16\sqrt{\pi}a^2t^2e}{\eta^2\Lambda\sqrt{2ctg\frac{\beta\eta\Omega}{2}}}, A = (2V^2 ctg\frac{\beta\eta\Omega}{2})^{-1}, F = eEa, a = \left|\vec{R}_i - \vec{R}_j\right|.$$

Хімічний потенціал визначався шляхом розв'язку рівняння електронейтральності. Розв'язуючи систему рівнянь отримаємо температурні, польові і концентраційні залежності густини струму. Розглядаємо випадок слабкого електричного поля, Враховуючи тільки члени першого порядку малості по F і, розкладаючи $e^{\beta F}$ в ряд, отримаємо вираз для електропровідності

$$j(E) = \sigma(E)E, \sigma(E) = \sigma_0 Z_{el}^2(\exp(A(F+\Gamma)^2 + \beta\mu) + \exp(A(F+U_1)^2 + 2\beta\mu) + \exp(A(F-U-2\Gamma)^2 -$$

$$-\beta(U_1 - 2\mu)) + \exp(A(F+\Gamma)^2 - \beta(U_1 - 3\mu))), \sigma_0 = 16\sqrt{\pi}a^3t^2e^2\beta(\eta^2\Lambda\sqrt{2cth(\frac{\beta\eta\Omega}{2})}\ )^{-1}.$$

Отримані вирази дозволяють провести дослідження характеру переносу заряду по вузькій орбітально виродженій зоні провідності. Кореляція електронів на вузлі приводить до розчеплення затравочної енергетичної зони на ряд підзон. Актуальними є дві нижні зони: зона невзаємодіючих на одному вузлі електронів і зона електронів, що знаходяться на одному центрі на різних орбіта лях з одновою проекцією спінів і взаємодіючих з енергією U. Під впливом зовнішнього електричного поля електрони можуть збільшувати свою енергію на величину, що перевищує віддаль між підзонами. При цьому вони попадають в верхню підзону, де їх провідність суттєво нижча. Цим пояснюється те, що при певному значенні зовнішнього електричного поля диференціальна провідність стає відємною. При досягненні критичного значення напруженості електричного поля , коли кінетична енергія електронів внаслідок їх розігрівання досягає максимального значення, відбувається ефект переключення. Електрони закидаються в верхню підзону, де рухливість є меншою і на графіку залежності від Е на графіку спостерігається ділянка відємної диференціальної провідності.

Вплив магнітного поля дозволяє врахувати включення в гамільтоніан доданка $H_M = -\frac{J}{2}\sum_{ij} S_i^z S_j^z + \sum_{i\alpha\sigma} h(\sigma) n_{i\alpha\sigma}$, S_i^z-проекція магнітного моменту i - вузла на вісь $Oz.\ _{i\alpha-})$, $g-$фактор Ланде, μ_B- магнетон Бора, $H-$напруженість магнітного поля.

Актуальною проблемою є дослідження магнетоопору. Ефект найбільш сильно виявляється при низьких температурах і таких концентраціях електронів, при яких суттєва провідність по вузькій енергетичній зоні. Магнетоопір визначається співвідношенням $\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(H)} = \frac{\sigma(0)}{\sigma(H)} - 1$, де $\sigma(0)$- провідність системи з виродженими зонами провідності при відсутності зовнішнього магнітного поля, $\sigma(H)-$в магнітному полі.

При поміщенні парамагнітної системи в магнітному полі спіни електронів упорядковуються. Трансляція стає можлива по всім вузлам і рухливість носіїв струму зростає. Накладання зовнішнього магнітного поля на систему з орбітальним виродженням приводить до переорієнтації спінів, зумовлюючи зростання густини електричного струму при $n > 1$. В цьому випадку величина $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ від’ємна.

Вказані особливості впливу сильних електромагнітних полів на гальваномагнітні процеси в матеріалах з вузькими енергетичними зонами провідності проявляються в сполуках перехідних металів з зонною схемою, що зумовлює провідність по вузькій $d-$зоні. До таких сполук відносяться також і магнітні напівпровідникові халькогенідні шпінелі типу.

Таким чином, для систем з орбітально виродженими зонами провідності вплив сильного електричного поля приводить до відємної диференціальної провідності, ефектів переключення між станами з різною провідністю. Вплив магнітного поля зумовлює зростання густини струму . Магнетоопір даних речовин є від’ємним.

Література

1. Hattori K. Nonlinear electrical transport phenomena in regular and disordered Hubbard chains// Phys. Rev.B.-1961.-V.21, N 8.- P. 529-531.

2. Белов К.П., Третьяков Ю.Д. и др. Магнитные полупроводники - халькогенидные шпинели. М.:МГУ,1981.-279 с.