Физика низких температур, 2001, т. 27, № 5, с. 508–518

Тензор динамической диэлектрической восприимчивости хаотизированного *f*–*d*-магнетика

А. Б. Безносов, Е. С. Орел

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: beznosov@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2000 г., после переработки 16 января 2001 г.

Методом двухвременных запаздывающих функций Грина рассчитан магнитный вклад в тензор динамической диэлектрической восприимчивости $\chi^{\alpha\beta}(\omega) = \chi_1^{\alpha\beta}(\omega) + i\chi_2^{\alpha\beta}(\omega)$ системы хаотизированных квазилокальных оптических диполей магнитного проводника. Полученный спектр $\chi^{\alpha\beta}(\omega)$ состоит из *когерентной* $\chi_{\rm coh}^{\alpha\beta}$ и *некогерентной* $\chi_{\rm incoh}^{\alpha\beta}$ компонент, формируемых электронными возбуждениями с нулевым и произвольным квазиимпульсом соответственно. Вдали от резонансных частот (где χ представлена только дисперсной частью) недиагональные компоненты $\chi_2^{\alpha\neq\beta}(\omega)$ линейны в главном порядке по эффективному полю $\Delta_M = \zeta/2 - \mu_B H_0$ (ζ — константа спин-орбитального взаимодействия, μ_B — магнетон Бора, H_0 — магнитное поле), тогда как магнитный вклад в диагональные компоненты $\chi_1^{\alpha\alpha}(\omega)$ квадратичен по Δ_M.

Методом двочасових загаяних функцій Гріна розраховано магнітний внесок в тензор динамічної діелектричної сприйнятливості $\chi^{\alpha\beta}(\omega) = \chi_1^{\alpha\beta}(\omega) + i\chi_2^{\alpha\beta}(\omega)$ системи хаотизованих квазілокальних оптичних диполів магнітного провідника. Отриманий спектр $\chi^{\alpha\beta}(\omega)$ складається з *когерентної* $\chi_{\rm coh}^{\alpha\beta}$ та *некогерентної* $\chi_{\rm incoh}^{\alpha\beta}$ компонент, що формуються електронними збудженнями з нульовим і довільним квазіімпульсом відповідно. Віддалік від резонансних частот (де χ представлено тільки дисперсною частиною) недіагональні компоненти $\chi_2^{\alpha\neq\beta}(\omega)$ є лінійними в головному порядку по ефективному полю $\Delta_M = \zeta/2 - \mu_B H_0$ (ζ — константа спін-орбітальної взаємодії, μ_B — магнетон Бора, H_0 — магнітне поле), тимчасом як магнітний внесок до діагональних компонентів $\chi_1^{\alpha\alpha}(\omega)$ є квадратичним по Δ_M.

PACS: 78.20.Ls, 75.10.Lp, 71.23.An

Введение

Повышенный интерес к оптическим свойствам магнитоконцентрированных соединений носит в последние 20 лет устойчивый характер и в значительной степени вызван потребностями производства устройств записи, считывания и хранения информации в современной компьютерной индустрии. В то же время оптические методы являются одним из основных средств прямого исследования энергетического спектра и характера электронных состояний конденсированного вещества, определяющих, в частности, трансформацию его свойств при температурных изменениях. Последнее определяет интерес к оптике систем, претерпевающих магнитные фазовые превращения, в физике конденсированного состояния.

Характерным признаком атомного строения магнитоупорядочивающейся системы в большинстве случаев является присутствие в ее химической формуле *d*- или *f*-элементов. Электроны магнитоактивных *d*- и *f*-оболочек благодаря наличию так называемого центробежного барьера [1] оказываются квазилокальными, т.е. их движение по кристаллу имеет характер туннелирования (межузельных перескоков) и соответствующие энергетические зоны оказываются довольно узкими. Поэтому в тех случаях, когда характерное время внешнего воздействия на систему (например, период взаимодействующей с ней электромагнитной волны) оказывается меньше времени межузельных перескоков, такие электроны, с одной стороны, ведут себя как локальные, а с другой, благодаря когерентности межузельных перескоков, зависящей от степени трансляционного порядка в системе, оказываются чувствительными к дальнему порядку, в том числе магнитному [2].

Сильное спин-орбитальное взаимодействие приводит к коррелированному поведению спиновых и орбитальных моментов f- и d-электронов при движении последних по кристаллу (соответствующая концепция «j-полярона» сформулирована в [2]), что существенно отражается на зависимости оптических свойств вещества от степени магнитного порядка. Такая картина содержит предпосылки для понимания механизмов взаимодействия света с хаотизированными системами квазилокальных оптических диполей, в которых хаотизация имеет как температурную [2,3], так и структурную [4] природу. Структурный (в том числе магнитоструктурный) хаос реализуется в неупорядоченных сплавах, металлических и спиновых стеклах и т. п., о температурной же хаотизации уместно говорить в тех случаях, когда характерный период температурных флуктуаций квазилокальных оптических диполей (в [2,3] рассматривались флуктуации направлений их осей, определяемых ориентацией полных угловых моментов редкоземельных ионов) больше периода электромагнитной волны. Оба аспекта хаотизации актуальны для систем, упомянутых в предыдущем параграфе, в оптическом диапазоне от инфракрасной области до вакуумного ультрафиолета.

Движущийся в магнитной среде электрон испытывает действие силы Лоренца [5], что приводит к эффекту Холла на низких частотах и к магнитооптическим эффектам Керра и Фарадея на оптических частотах [5–7]. Теория магнитооптических эффектов в упорядоченных металлах имеет уже длинную историю (кроме [5–7], отметим [8–11] как некоторые из публикаций, характеризующих развитие магнитооптики систем, родственных рассматриваемым в настоящей работе), чего нельзя сказать о магнитооптике хаотизированных систем. В то же время последний аспект является актуальным, поскольку значительное число современных материалов для микроэлектроники представляют собой хаотизированные системы [12–14].

Целью настоящей работы является построение теории магнитооптических эффектов в системе хаотизированных квазилокальных оптических диполей. В отличие от [5–11], где использованы модели либо свободных, либо локализованных электронов, в данном случае рассмотрена модель квазилокальных электронов. За основу берется (как и в [2–4,15,16]) картина узкозонных магнитных проводников, представленная Нагаевым [6]. В данном случае макроскопический магнитооптический эффект возникает как результат усреднения в системе квазилокальных внутриатомных аналогов эффекта Холла* для электронов, движущихся под действием электрического поля световой волны в эффективном магнитном поле, порождаемом спин-орбитальным взаимодействием, с добавкой поля магнитной индукции вещества.

Модель d–f-металла

Рассматриваемая модель магнитного проводника в общих чертах соответствует схематическому изображению электронного энергетического спектра (ЭЭС) металлического гадолиния (см. [2,3]). Она содержит узкие частично заполненные электронные зоны (i), генетически связанные с атомными d-орбиталями, и отделенные от них широкими энергетическими щелями свободные зоны (f)**, связанные с иными атомными состояниями (рис. 1). Спин-орбитальное взаимодействие снимает вырождение по магнитному квантовому числу μ в зонах i и f, а сильное внутриатомное обменное взаимодействие с локализованными спинами (в редкоземельных металлах — со спинами $4f$-оболочек) расщепляет спиновые подзоны так, что одна из них, принадлежащая зоне i ($|i, \mathbf{k}, -\mu, -1/2\rangle$), лежит целиком выше уровня Ферми (для данного подхода это условие не принципиально, но упрощает расчет). Вырождение по магнитному и спиновому квантовым числам снимается также действием внешнего магнитного поля.

Для простоты будем рассматривать в нижней зоне i только одну из таких (т.е. расщепленных и по спину, и по μ) подзон (с индексами μ_i , $1/2$ на рис. 1), а в верхней зоне f — только три (с индексами $\mu_f = \mu_i - 1$, $\mu_f = \mu_i$ и $\mu_f = \mu_i + 1$ на рис. 1) с направлением спина по намагниченности (вдоль координатной оси z — символ $\uparrow$).

Квазилокальные оптические диполи

Взаимодействие света с квазилокальным оптическим диполем на узле λ кристаллической решетки в представлении чисел заполнения описывается гамильтонианом

* Наиболее прозрачна аналогия между эффектами Холла и Фарадея [6], связанными с поляризационной (или «дисперсной», в отличие от «поглощательной») составляющей «магнитного» вклада в недиагональную диэлектрическую восприимчивость.

** Символы i и $4f$, используемые в статье соответственно для обозначения мнимой единицы и магнитоактивной оболочки редкоземельных ионов, легко различимы по контексту с индексами электронных состояний i (initial) и f (final).

$$\mathcal{H}_{\lambda\mathrm{int}} = \int d\Xi\ \Psi^{+}_{\lambda}(\mathbf{x}, \xi)\ \mathcal{H}_{\mathrm{int}}\ \Psi_{\lambda}(\mathbf{x}, \xi)\ , \qquad (1)$$

где

$$\Psi_{\lambda}(\mathbf{x}, \xi) = \sum_{\tau, \mu, \sigma} \varphi_{\lambda, \tau, \mu}(\mathbf{x})\ \chi_{\lambda, \tau, \mu, \sigma}(\xi)\ c_{\lambda, \tau, \mu, \sigma}$$

— электронный полевой оператор; $\varphi_{\lambda, \tau, \mu}(\mathbf{x})$ — атомная электронная волновая функция, определенная в локальной системе координат на узле с *вектором* трансляции λ (см., например, [2–4]); $\chi_{\lambda, \tau, \mu, \sigma}(\xi)$ — спиновая функция; $c^{+}_{\lambda, \tau, \mu, \sigma}$ ($c_{\lambda, \tau, \mu, \sigma}$) — фермиевские операторы рождения (уничтожения) состояния $|\lambda, \tau, \mu, \sigma\rangle$; $\tau = i, f$ — индекс орбитального состояния (для определенности будем полагать $i = l$, $f = l + 1$, где l — орбитальное квантовое число); μ и σ — магнитное и спиновое квантовые числа соответственно; интегрирование по $d\Xi$ распространяется на пространственные переменные $\mathbf{x}$, а также включает в себя суммирование по спиновой переменной ξ;

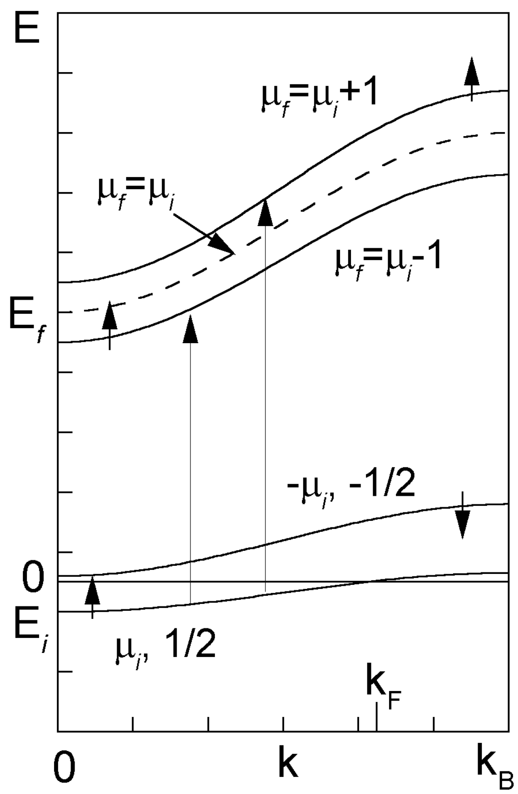

Рис. 1. Схематический вид электронного энергетического спектра $E_{f(i)}(\mathbf{k})$ начальных i и конечных f состояний рассматриваемого магнитооптического электронного перехода $i \to f$: $E_f(0) - E_i(0) = E_{fi} >> W_{f(i)}$, W — ширина электронной зоны; k_F и k_B — фермиевский и бриллюэновский волновые векторы соответственно; μ — магнитное квантовое число; стрелки означают проекцию электронного спина на магнитный момент системы; нулевая энергия соответствует уровню Ферми. Изображены только те зоны f, переходы в которые из зоны i дают вклад в недиагональную восприимчивость $\chi^{xy}(\varepsilon)$.

$$\mathcal{H}_{\mathrm{int}} = -\frac{e}{m_e c}\ \mathbf{Ap}\ ; \quad \mathbf{A} = A_0\ \mathrm{e}^{i(\mathbf{Qr} - \omega t)}$$

— векторный потенциал поля электромагнитной волны (ω — частота волны, $\tilde{\omega} = \omega + i\gamma$, $\gamma \to 0$ обеспечивает адиабатичность включения взаимодействия), c и $\mathbf{Q}$ — скорость и волновой вектор световой волны соответственно, $\mathbf{p}$, e и m_e — оператор импульса, заряд и масса электрона*.

Матричные элементы в (1) удобно выразить через локальные дипольные моменты электронного перехода $i \to f$ на узле λ:

$$\langle\lambda, f, \mu', \sigma|\ \mathcal{H}_{\mathrm{int}}\ |\lambda, i, \mu, \sigma\rangle =$$

$$= \langle\lambda, f, \mu', \sigma\,|\, -\frac{e}{m_e c}\ \mathbf{Ap}\,|\,\lambda, i, \mu, \sigma\rangle =$$

$$= -\frac{\omega_{fi}}{\omega}\ \mathbf{E}_0\ \mathbf{D}^{\mu'\mu}_{\lambda fi}\ \mathrm{e}^{i(\mathbf{Q}\lambda - \tilde{\omega} t)}\ ,$$

где $\mathbf{E}_0$ — амплитуда напряженности электрического поля световой волны; $D^{\alpha\mu'\mu}_{\lambda fi} = \langle\lambda, f, \mu', \sigma\,|\,er^{\alpha}\,|\,\lambda, i, \mu, \sigma\rangle$ — α-компонента матричного элемента вектора электродипольного момента электронного перехода $i \to f$ (r^{α} — α-компонента оператора координаты электрона); ω_{fi} — частота перехода $i \to f$.

Фактически природа магнитооптических явлений заключается в различии спектров *правой* и *левой* циркулярных компонент индуцируемой в веществе электрической поляризации. Поэтому имеет смысл рассматривать далее именно *циркулярные* компоненты оператора электродипольного момента $i \to f$ перехода:

$$\hat{D}^{\pm}_{\lambda\mu} = \sum_{\sigma} (D^{\pm}_{\lambda fi\mu}\ c^{+}_{\lambda, f, \mu\pm1, \sigma}\ c_{\lambda, i, \mu,\sigma} +$$

$$+ D^{\pm}_{\lambda if\mu}\ c^{+}_{\lambda, i, \mu, \sigma}\ c_{\lambda, f, \mu\mp1, \sigma})\ . \qquad (2)$$

Здесь

$$D^{\pm}_{\lambda\, fi\, \mu} = \langle\lambda, f, \mu\pm1, \sigma\,|\,er^{\pm}\,|\,\lambda, i, \mu, \sigma\rangle\ ,$$

* В рассматриваемой модели m_e — это масса свободного электрона, поскольку речь идет, по сути, о внутриатомных переходах $i \to f$.

$$D^{\pm}_{\lambda\, if\, \mu} = \langle \lambda,\, i,\, \mu,\, \sigma \,|\, er^{\pm} \,|\, \lambda,\, f,\, \mu{\mp}1,\, \sigma \rangle \ ,$$

$$r^{\pm} = \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}} \ ,$$

индексы i и f в обозначениях оператора $\hat{D}^{\pm}_{\lambda\mu}$ опущены.

В настоящей модели магнитооптические эффекты определяются только этими матричными элементами.

Для атомных электронных волновых функций, которые, как отмечалось выше, для определенности и простоты будем рассматривать в качестве базисных узельных состояний в кристалле, имеют место следующие соотношения [17]:

$$\langle l + 1, \mu \pm 1 | r^{\pm}/r | l,\, \mu \rangle = \pm \left[\frac{(l{+}2{\pm}\mu)(l{+}1{\pm}\mu)}{(2l + 3)(2l + 1)} \right]^{1/2} ,$$

$$\langle l - 1,\, \mu \pm 1 \,|\, r^{\pm}/r \,|\, l,\, \mu \rangle = \mp \left[\frac{(l{\mp}\mu)(l - 1{\mp}\mu)}{(2l + 1)(2l - 1)} \right]^{1/2} , \qquad (3)$$

$$\langle l,\, \mu \,|\, r^{-}/r \,|\, l + 1,\, \mu + 1 \rangle \langle l + 1,\, \mu + 1 \,|\, r^{+}/r \,|\, l,\, \mu \rangle = \frac{(l + 2 + \mu)(l + 1 + \mu)}{(2l + 3)(2l + 1)} \ ,$$

$$\langle l,\, \mu \,|\, r^{+}/r \,|\, l + 1,\, \mu - 1 \rangle \langle l + 1,\, \mu - 1 \,|\, r^{-}/r \,|\, l,\, \mu \rangle = \frac{(l + 2 - \mu)(l + 1 - \mu)}{(2l + 3)(2l + 1)} \ .$$

Из (3) для матричных элементов в (2) непосредственно следуют связь $D^{\mp}_{if} D^{\pm}_{fi} = (D^{\pm}_{fi})^{*} D^{\pm}_{fi} = |\, D^{\pm}_{fi} \,|^2$ (знак «*» означает комплексное сопряжение) и соотношения

$$|\, D^{+}_{fi\mu} \,|^2 > |\, D^{-}_{fi\mu} \,|^2 \ , \quad \mu > 0 \ ,$$

$$|\, D^{+}_{fi\mu} \,|^2 < |\, D^{-}_{fi\mu} \,|^2 \ , \quad \mu < 0 \ ,$$

$$|\, D^{+}_{fi\mu} \,|^2 = |\, D^{-}_{fi\mu} \,|^2 \ , \quad \mu = 0 \ .$$

В хаотизированных системах представляют интерес средние по кристаллу величины

$$\langle D^{\pm}_{fi\mu} \rangle = N^{-1} \sum_{\lambda} \langle \lambda,\, f,\, \mu \pm 1,\, \sigma \,|\, er^{\pm} \,|\, \lambda,\, i,\, \mu,\, \sigma \rangle$$

и среднеквадратичные флуктуации

$$d^{\pm}_{fi\mu} = \left[N^{-1} \sum_{\lambda} (D^{\pm}_{\lambda fi\mu} - \langle D^{\pm}_{fi\mu} \rangle)^2 \right]^{1/2} .$$

Для простоты далее будем пренебрегать различием между $\langle D^{+}_{fi\mu} \rangle$ и $\langle D^{-}_{fi\mu} \rangle$ и, соответственно, между $d^{+}_{fi\mu}$ и $d^{-}_{fi\mu}$ (это строго соответствует случаю $\mu = 0$ и не отразится на основных результатах работы в случае произвольных μ). Кроме того, учитывая отмеченный выше избранный фиксированный характер μ и σ, будем опускать их в индексах конечных выражений для диэлектрической восприимчивости. В таком случае обозначения для средних по кристаллу электродипольных моментов и среднеквадратичных флуктуаций упростятся до D и d соответственно.

Роль хаотизации системы

Хаотическая система индуцированных электрическим полем световой волны квазилокальных электрических диполей может иметь как структурное (в том числе — магнитоструктурное) происхождение (неупорядоченные сплавы, спиновые стекла и т.п.), так и быть следствием тепловых флуктуаций локальных характеристик системы (как отмечалось выше, это могут быть тепловые флуктуации локальных осей квантования, определяемых направлениями магнитных моментов $4f$-оболочек ионов редкоземельных металлов [2,3]).

Рассмотрим для определенности спиновое стекло в металле с локализованными магнитными моментами $4f$-оболочек. Ниже температуры стеклования тепловое среднее z-проекции спина отлично от нуля для каждого узла системы, содержащего $4f$-спин, и в локальных системах координат все эти средние совпадают. Среднее по кристаллу значение локального магнитного момента равно нулю, в то время как его средний квадрат отличен от нуля [18]. Очевидно, что в каждом «магнитном» узле магнитооптический эффект возникает, но для кристалла в целом те эффекты, которые определяются его намагниченностью, будут отсутствовать.

Таким образом, пространственная хаотизация дипольного момента (2) существенно отражается на оптических свойствах системы. В то же время в электронном гамильтониане кристалла, записанном в приближении сильной связи, хаотизация локальных осей квантования «магнитных» узлов приведет лишь к некоторой хаотизации интеграла межузельных электронных перескоков, существенно не меняя его величины и, соответственно, свойств металла. Поэтому, если система хаотизирована, но ее металлический характер сохраняется, хаотическая компонента $\delta\mathcal{H}$ полного гамильтониана $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}$ может рассматриваться как малая добавка к гамильтониану $\mathcal{H}_0$ трансляционно инвариантной системы. Применительно к задаче настоящей работы такое влияние хаотизации на ЭЭС может быть сведено к замене вещественной энергии кристалла на комплексную [19,20], что, как можно ожидать, качественно не повлияет на спектр достаточно высокоэнергетичных межзонных электронных переходов.

Электрический дипольный момент, индуцируемый в кристалле полем электромагнитной волны, может быть вычислен путем усреднения соответствующих собственных значений с помощью статистического оператора, определяемого суммарным гамильтонианом $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H} + \mathcal{H}'_{\text{int}}$. Очевидно, что линейный отклик [21–23] системы, вычисленный для *регулярной части* гамильтониана взаимодействия $\mathcal{H}'_{\text{int}} = \sum_\lambda \mathcal{H}_{\lambda\,\text{int}}$, будет определяться, главным образом, гамильтонианом $\mathcal{H}_0$.

Для рассмотрения отклика системы на *хаотическую часть* возмущения $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ проведем следующее рассуждение. Как было отмечено выше, нарушение трансляционной симметрии системы может быть учтено заменой вещественных энергий $\varepsilon(\mathbf{k})$ блоховских $\mathbf{k}$-состояний комплексными величинами $\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar/\tau(\mathbf{k})$. Это означает, что $\mathbf{k}$-состояния затухают с характерным временем $\tau(\mathbf{k}) \to \infty$ при $\delta\mathcal{H} \to 0$. Иными словами, $\mathbf{k}$-представление работает хорошо (т.е. неопределенность квазиимпульса мала и невертикальные электронные переходы под действием внешнего поля с волновым вектором $\mathbf{Q} = 0$ несущественны), если узельные хаотические добавки в энергию не слишком велики: при достаточно высокой частоте ω_{fi} электронного перехода, такой что $\pi/\omega_{fi} << \tau(\mathbf{k})$, отклик системы на внешнее воздействие сформируется быстрее, чем заметно изменятся амплитуды блоховских состояний. В то же время, если хаотические узельные добавки d_λ к дипольному моменту в гамильтониане взаимодействия $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ статистически независимы (что является во многих случаях хорошим приближением), так что все $\mathbf{k}$-гармоники в фурье-разложении $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ равновероятны, сразу получаем электронные возбуждения с любым квазиимпульсом, независимо от величины дисперсии d^2 дипольного момента.

Таким образом, влияние хаотизации $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ и $\mathcal{H}$ на спектры оптических возбуждений различно как в количественном, так и в качественном отношении. Основное влияние на спектры возбуждений вещества оказывает только хаотизация гамильтониана взаимодействия $\mathcal{H}'_{\text{int}}$, что и будем рассматривать ниже, а в качестве собственных значений гамильтониана системы $\mathcal{H}$ будем использовать энергии совершенного кристалла. При этом, поскольку оператор $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ (как и $\mathcal{H}$) должен быть построен на регулярных электронных состояниях, все эффекты хаотизации отразим в значениях c-чисел, т.е. соответствующими коэффициентами при матричных элементах в выражении (2).

Гамильтониан

Учитывая сказанное выше, рассмотрим следующий гамильтониан $\mathcal{H}$ исследуемой системы в представлении чисел заполнения:

$$\mathcal{H} = \sum_{\substack{\lambda \\ \tau,\mu,\sigma}} U_{\tau,\mu,\sigma}\, c^+_{\lambda,\tau,\mu,\sigma}\, c_{\lambda,\tau,\mu,\sigma} + \sum_{\substack{\lambda,\eta \\ \tau,\mu,\sigma}} T_{\tau,\sigma}\, c^+_{\lambda+\eta,\tau,\mu,\sigma}\, c_{\lambda,\tau,\mu,\sigma}\,, \qquad (4)$$

$$U_{\tau,\mu,\sigma} = E_{\tau,\sigma} - \mu_B H_0(\mu + 2\sigma)_\tau + \zeta_\tau \mu\sigma\,,$$

$$\tau = i, f\,, \quad \zeta_f = \zeta > 0\,.$$

Здесь $T_{\tau,\sigma}$ — интеграл перескока между узлами-ближайшими соседями $(\lambda, \lambda + \eta)$; E_i и E_f — энергии заполненного i и свободного f затравочных локальных состояний (нулевое приближение по интегралу перескока); ζ_τ — константа спин-орбитального взаимодействия; H_0 — внешнее постоянное магнитное поле; μ_B — магнетон Бора.

Предполагается, что параметры гамильтониана удовлетворяют неравенствам $T << E_{fi}$ и $\zeta << E_{fi}$, $\mu_B H_0 << E_{fi}$; $E_{fi} = E_f - E_i$ — энергия электронного перехода $i \to f$ между центрами зон заполненных i и свободных f состояний (рис. 1).

Основные характеристики ЭЭС проводящих магнетиков определяются потенциалами взаимодействия электронов проводимости с ионами, межузельными интегралами электронных перескоков и собственными взаимодействиями в системе электронов проводимости. Из последних в гамильтониан (4) включена в явном виде только диагональная часть спин-орбитального взаимодействия как имеющая принципиальное значение для магнитооптических явлений. Следует отметить, что одноузельное обменное взаимодействие электронов проводимости с локальными магнитными моментами, как и внутренние обменные взаимодействия в их среде, приводят к появлению в системе *низкочастотных коллективных* возбуждений [16,24], что должно, вообще говоря, отразиться на магнитооптических спектрах. Эти тонкие эффекты, однако, не влияют на основные выводы настоящей работы, поскольку мы рассматриваем только *высокочастотные одноэлектронные* возбуждения, что позволяет не включать явно обменные слагаемые в гамильтониан системы (диагональная часть одноузельного обменного взаимодействия между локальными и квазилокальными электронами включена в $E_{\tau,\sigma}$).

Преобразование Фурье

$$c^{+}_{\lambda,\tau,\mu,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c^{+}_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\lambda} ,$$

$$c_{\lambda,\tau,\mu,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma}\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\lambda}$$

диагонализует квадратичную форму (4), приводя ее к виду

$$\mathcal{H} = \sum_{\substack{\mathbf{k}\\ \tau,\mu,\sigma}} E_{\tau,\mu,\sigma}(\mathbf{k})\, n_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma} ,$$

где

$$n_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma} = c^{+}_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma}\, c_{\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma}$$

— оператор чисел заполнения состояний $|\mathbf{k},\tau,\mu,\sigma\rangle$;

$$E_{f,\mu\pm1,\sigma}(\mathbf{k}) = E_{f,\sigma} + T_{f,\sigma}(\mathbf{k}) + \zeta\mu\sigma -$$

$$- \mu_B H_0(\mu + 2\sigma) \pm \Delta_M$$

и

$$E_{i,\mu,\sigma}(\mathbf{k}) = E_{i,\sigma} + T_{i,\sigma}(\mathbf{k}) + \zeta_i\, \mu\sigma - \mu_B\, H_0(\mu + 2\sigma)$$

— энергии в верхней и нижней зонах соответственно;

$$T_{\tau,\sigma}(\mathbf{k}) = T_{\tau,\sigma} \sum_{\mathbf{h}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{h}}$$

— кинетическая энергия квазилокальных электронов;

$$\Delta_M = \zeta\sigma - \mu_B\, H_0$$

— «эффективное» магнитное поле в энергетических единицах.

Динамическая диэлектрическая восприимчивость

Электрическая поляризация неоднородной стационарной среды (для простоты рассматриваем кристаллическую решетку, содержащую N узлов, в каждом из которых может быть индуцирован электрический диполь случайной или определенным образом зависящей от λ величины) в поле электромагнитной волны с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{Q}$ определяется нелокальной динамической диэлектрической восприимчивостью [18]

$$\chi^{\alpha\beta}(\mathbf{Q},\, \mathbf{Q}',\, \tilde{\varepsilon}) = \frac{1}{N} \sum_{\lambda,\lambda'} \langle \chi^{\alpha\beta}_{\lambda,\lambda'}\, (\tilde{\varepsilon}) \rangle_c\, \mathrm{e}^{i(\mathbf{Q}\lambda - \mathbf{Q}'\lambda')} ,$$

где $\mathbf{Q}'$ — волновой вектор поляризации среды; ε — энергия фотона ($\tilde{\varepsilon} = \hbar\tilde{\omega}$, $\hbar$ — постоянная Планка); символ $\langle \ldots \rangle_c$ означает усреднение по всем возможным конфигурациям распределения случайных значений величин квазилокальных оптических диполей в кристалле;

$$\chi^{\alpha\beta}_{\lambda,\lambda'}\, (\tilde{\varepsilon}) = -\frac{1}{v_a} \langle\langle \hat{D}^{\alpha}_{\lambda} \mid \hat{D}^{\beta}_{\lambda'} \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}}$$

— вклад в нелокальную динамическую диэлектрическую восприимчивость от электронных переходов $i \to f$, записанный в узельном представлении в рамках формализма Кубо теории линейного отклика [6,21–23]; $\langle\langle \ldots \mid \ldots \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}}$ — двухвременная запаздывающая функция Грина в энергетическом представлении [20–22]; $\hat{D}^{\alpha}_{\lambda}$ — оператор дипольного момента перехода $i \to f$; v_a — объем кристалла, приходящийся на один узел.

В рассматриваемой геометрии (магнитное поле $\mathbf{H}_0$, средний спин $\langle \mathbf{s} \rangle$ квазилокальных электронов и волновой вектор $\mathbf{Q}$ световой волны параллельны оси z кристалла) в изотропной среде отличными от нуля будут следующие компоненты тензора динамической диэлектрической восприимчивости: $\chi^{xx} = \chi^{yy} = \chi^0 + \chi^{\parallel}$, $\chi^{zz} = \chi^0$ и $\chi^{xy} = -\chi^{yx} = i\chi^{\perp} = -ig$. Здесь χ^0 — восприимчивость в отсутствие намагниченности; $\chi^{\parallel}$ — вклад в диагональную восприимчивость, обусловленный намагниченностью электронной системы; $i\chi^{\perp}$ — соответствующий «магнитный» вклад в недиагональную восприимчивость, отличающийся множителем i от χ^{xy}; g — z-компонента вектора гирации, часто используемого при феноменологическом подходе к магнитооптике [5–7]. Величина $\chi^{\perp}$ также часто используется вместо $\chi^{xy} = -\chi^{yx}$ [25–27], поскольку имеет более привычный физический смысл вещественной и мнимой частей, описывающих поляризацию вещества и поглощение электромагнитных волн соответственно. Связь с динамической диэлектрической проницаемостью $\varepsilon^{\alpha\beta}(\omega)$ имеет вид $\varepsilon^{\alpha\beta}(\omega) = \delta^{\alpha\beta} + 4\pi\chi^{\alpha\beta}$, где $\delta^{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Недиагональный «магнитный» вклад в динамическую диэлектрическую восприимчивость определяется выражением

$$\chi^{\perp}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = -\frac{\chi^{+}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) - \chi^{-}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon})}{2}, \quad (5)$$

а связь с диагональными «магнитными» компонентами имеет вид

$$\chi^{0}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) + \chi^{\|}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = \frac{\chi^{+}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) + \chi^{-}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon})}{2}, \quad (6)$$

где $\chi^{+}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon})$ и $\chi^{-}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon})$ — восприимчивости для право- и левополяризованных циркулярных полей соответственно.

Для системы квазилокальных оптических диполей с хаотической пространственной модуляцией циркулярные компоненты восприимчивости определяются формулой

$$\chi^{\mp}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = \frac{1}{N} \sum_{\lambda\lambda'} \langle \chi^{\mp}_{\lambda\lambda'}(\tilde{\varepsilon}) \rangle_c \, e^{i(\mathbf{Q}\lambda - \mathbf{Q}'\lambda')}, \quad (7)$$

где

$$\chi^{\mp}_{\lambda\lambda'}(\tilde{\varepsilon}) = -\frac{1}{2v_a} \sum_{\sigma} \Big\{ \langle D^{\mp}_{\lambda if\mu} D^{\pm}_{\lambda' fi\mu} \rangle_c \, G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\lambda, \lambda', \tilde{\varepsilon}) + \langle D^{\mp}_{\lambda fi\mu} D^{\pm}_{\lambda' if\mu} \rangle_c \, G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\lambda, \lambda', \tilde{\varepsilon}) \Big\},$$

$$G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\lambda, \lambda', \tilde{\varepsilon}) = \langle\langle c^{+}_{\lambda,i,\mu,\sigma} c_{\lambda,f,\mu\pm1,\sigma} \mid c^{+}_{\lambda',f,\mu\pm1,\sigma} c_{\lambda',i,\mu,\sigma} \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}},$$

$$G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\lambda, \lambda', \tilde{\varepsilon}) = \langle\langle c^{+}_{\lambda,f,\mu\mp1,\sigma} c_{\lambda,i,\mu,\sigma} \mid c^{+}_{\lambda',i,\mu,\sigma} c_{\lambda',f,\mu\mp1,\sigma} \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}}.$$

Результат усреднения по конфигурациям может быть выражен через средние по кристаллу. Пренебрегая различием между $\langle D^{\mp}_{\lambda if\mu} D^{\pm}_{\lambda' fi\mu} \rangle_c$ и $\langle D^{\mp}_{\lambda fi\mu} D^{\pm}_{\lambda' if\mu} \rangle_c$, опуская индекс μ и ограничиваясь случаем статистически независимых узлов, получаем

$$\langle D^{\mp}_{\lambda if\mu} D^{\pm}_{\lambda' fi\mu} \rangle_c = \langle D^{\mp}_{\lambda fi\mu} D^{\pm}_{\lambda' if\mu} \rangle_c = D^2 + d^2 \delta_{\lambda,\lambda'}, \qquad \delta_{\lambda,\lambda'} = \begin{cases} 1, & \lambda = \lambda' \\ 0, & \lambda \neq \lambda' \end{cases}. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7) и переходя в фермионных операторах от координатного представления к пространству волновых векторов ($\mathbf{k}$-представлению), после выполнения суммирования по λ и λ' получаем две компоненты восприимчивости: когерентную χ_{coh}, определяемую квадратом D^2 среднего по кристаллу значения величины квазилокальных оптических диполей, и некогерентную χ_{incoh}, определяемую средним по кристаллу значением квадрата d^2 их флуктуаций:

$$\chi^{\pm}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = \chi^{\pm}_{\text{coh}}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) + \chi^{\pm}_{\text{incoh}}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon});$$

$$\chi^{\mp}_{\text{coh}}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = -\frac{D^2}{v_a N} \sum_{R} \Big[G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) + G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) \Big] \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \, \delta_{\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1-\mathbf{Q}'},$$

$$\chi^{\mp}_{\text{incoh}}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \tilde{\varepsilon}) = -\frac{d^2}{v_a N^2} \sum_{R} \Big[G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) + G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) \Big] \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1+\mathbf{Q}} \, \delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}'_1+\mathbf{Q}'}, \quad (9)$$

$$G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) = \langle\langle c^{+}_{\mathbf{k},i,\mu,\sigma} c_{\mathbf{k}',f,\mu\pm1,\sigma} \mid c^{+}_{\mathbf{k}_1,f,\mu\pm1,\sigma} c_{\mathbf{k}'_1,i,\mu,\sigma} \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}},$$

$$G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \tilde{\varepsilon}) = \langle\langle c^{+}_{\mathbf{k},f,\mu\mp1,\sigma} c_{\mathbf{k}',i,\mu,\sigma} \mid c^{+}_{\mathbf{k}_1,i,\mu,\sigma} c_{\mathbf{k}'_1,f,\mu\mp1,\sigma} \rangle\rangle_{\tilde{\varepsilon}};$$

$$R = \{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \sigma\}.$$

Вычисления

Выражение для восприимчивости следует из решения уравнений движения для функций Грина в формулах (9), имеющих вид

$$\langle\langle A \mid B \rangle\rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle [A, B] \rangle + \langle\langle [A, H] \mid B \rangle\rangle_{\omega},$$

где $[A, B]$ — коммутатор операторов A и B. Вычисление дает

$$G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'_1,\tilde{\varepsilon}) = \frac{n_{\mathbf{k},i,\mu,\sigma} - n_{\mathbf{k}',f,\mu\pm1,\sigma}}{\tilde{\varepsilon} - E_{fi,\mu\pm1}(\mathbf{k}',\mathbf{k})}\,\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'_1}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}_1} = G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\tilde{\varepsilon})\,\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'_1}\,\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}_1}\,, \quad (10)$$

$$G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'_1,\tilde{\varepsilon}) = \frac{n_{\mathbf{k},f,\mu\mp1,\sigma} - n_{\mathbf{k}',i,\mu,\sigma}}{\tilde{\varepsilon} + E_{fi,\mu\mp1}(\mathbf{k}',\mathbf{k})}\,\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'_1}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}_1} = G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\tilde{\varepsilon})\,\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'_1}\,\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}_1}\,, \quad (11)$$

$$E_{fi,\mu\pm1,\sigma}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = E_{f,\mu\pm1,\sigma}(\mathbf{k}') - E_{i,\mu,\sigma}(\mathbf{k})\,. \quad (12)$$

Подставив (10)–(12) в (9), получаем

$$\chi^{\mp}_{\mathrm{coh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}',\tilde{\varepsilon}) = -\frac{D^2}{v_a N}\times \sum_{\mathbf{k}\sigma}\left\{G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q},\tilde{\varepsilon}) + G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q},\tilde{\varepsilon})\right\}\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}\,, \quad (13)$$

$$\chi^{\mp}_{\mathrm{incoh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}',\tilde{\varepsilon}) = -\frac{d^2}{v_a N^2}\times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma}\left\{G^{\pm}_{fi\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\tilde{\varepsilon}) + G^{\pm}_{if\mu\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\tilde{\varepsilon})\right\}\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}\,. \quad (14)$$

Результаты

Используя (5)–(7), (13) и (14) и принимая во внимание, что связь $\chi_{\mathrm{coh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}';\tilde{\varepsilon})$ и $\chi_{\mathrm{incoh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}';\tilde{\varepsilon})$ с волновыми векторами электромагнитной волны $\mathbf{Q}$ и поляризации системы $\mathbf{Q}'$ может быть представлена в виде

$$\chi_{\mathrm{coh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}';\tilde{\varepsilon}) = \chi_{\mathrm{coh}}(\mathbf{Q};\tilde{\varepsilon})\,\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}$$

и

$$\chi_{\mathrm{incoh}}(\mathbf{Q},\mathbf{Q}';\tilde{\varepsilon}) = \chi_{\mathrm{incoh}}(\tilde{\varepsilon})\,\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}$$

соответственно, для однородного внешнего поля ($\mathbf{Q} = 0$, т.е. для случая, когда длина волны света существенно превышает характерные длины пространственной модуляции системы квазилокальных оптических диполей) в пределе $\gamma \to 0$ получаем следующие выражения для динамических диэлектрических восприимчивостей $\chi(\varepsilon) = \chi_1(\varepsilon) + i\chi_2(\varepsilon)$:

$$\chi^{xy}_{1\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) = \frac{\pi D^2}{v_a}\left[N_{fi}(\varepsilon+\Delta_M) - N_{fi}(\varepsilon-\Delta_M)\right],$$

$$\chi^{xy}_{2\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) = \frac{4\varepsilon\Delta_M D^2}{v_a N}\times \sum_{\mathbf{k}}\frac{n_{\mathbf{k},i}\,E_{fi}(\mathbf{k})}{\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k})+\Delta_M]^2\}\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k})-\Delta_M]^2\}}\,, \quad (15)$$

$$\chi^{xy}_{1\mathrm{incoh}}(\varepsilon) = \frac{\pi d^2}{v_a}\left[\tilde{N}_{fi}(\varepsilon+\Delta_M) - \tilde{N}_{fi}(\varepsilon-\Delta_M)\right],$$

$$\chi^{xy}_{2\mathrm{incoh}}(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon\Delta_M d^2}{v_a N^2}\times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\frac{n_{\mathbf{k},i}\,E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')}{\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')+\Delta_M]^2\}\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')-\Delta_M]^2\}}, \quad (16)$$

$$\chi^{0}_{1\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) + \chi^{\parallel}_{1\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) = -\frac{2D^2}{v_a N}\times \sum_{\mathbf{k}}\frac{n_{\mathbf{k},i}\,E_{fi}(\mathbf{k})[\varepsilon^2 - E^2_{fi}(\mathbf{k}) + \Delta^2_M]}{\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k})+\Delta_M]^2\}\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k})-\Delta_M]^2\}},$$

$$\chi^{0}_{2\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) + \chi^{\parallel}_{2\mathrm{coh}}(0;\varepsilon) = \frac{\pi D^2}{v_a}\left[N_{fi}(\varepsilon+\Delta_M) + N_{fi}(\varepsilon-\Delta_M)\right], \quad (17)$$

$$\chi^{0}_{1\mathrm{incoh}}(\varepsilon) + \chi^{\parallel}_{1\mathrm{incoh}}(\varepsilon) = -\frac{2d^2}{v_a N^2}\times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\frac{n_{\mathbf{k},i}\,E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')[\varepsilon^2 - E^2_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}') + \Delta^2_M]}{\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')+\Delta_M]^2\}\{\varepsilon^2 - [E_{fi}(\mathbf{k},\mathbf{k}')-\Delta_M]^2\}},$$

$$\chi^{0}_{2\mathrm{incoh}}(\varepsilon) + \chi^{\parallel}_{2\mathrm{incoh}}(\varepsilon) = \frac{\pi d^2}{v_a}\left[\tilde{N}_{fi}(\varepsilon+\Delta_M) + \tilde{N}_{fi}(\varepsilon-\Delta_M)\right]. \quad (18)$$

В выражениях (15)–(18) использованы следующие обозначения:

$$E_{fi}(\mathbf{k},\,\mathbf{k}') = E_f - E_i + T_f(\mathbf{k}') - T_i(\mathbf{k}) + \zeta\mu/2\ ,$$

$$E_{fi}(\mathbf{k}) = E_{fi}(\mathbf{k},\,\mathbf{k})\ ,$$

$$N_{fi}(\varepsilon) = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},i}\ \delta[\varepsilon - E_{fi}(\mathbf{k})]\ ,$$

$$\tilde{N}_{fi}(\varepsilon) = \frac{1}{2N^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k},i}\ \delta[\varepsilon - E_{fi}(\mathbf{k}',\,\mathbf{k})]\ ;$$

здесь и далее индексы μ и σ опущены. Учтено, что в используемой модели система, описываемая «невозмущенным» гамильтонианом $\mathcal{H}$, является однородно намагниченной, нижняя зона i заполнена частично ($n_{\mathbf{k},i} \equiv n_{\mathbf{k},i,\mu,\sigma} \neq 0$, $n_{\mathbf{k},i,-\mu,-\sigma} = 0$, $\sigma = 1/2$), а верхняя f полностью свободна ($n_{\mathbf{k}',f,\mu\pm1,\sigma} = 0$).

Разлагая выражения (15)–(18) в ряд вдали от резонанса ($|\,\varepsilon - E_{fi}\,| >> \Delta_M$), получаем в главном приближении по Δ_M :

$$\chi^{xy}(0;\ \varepsilon) = \chi_2^{xy}(0;\ \varepsilon)\ ,$$

$$\chi_{2\mathrm{coh}}^{xy}(0;\ \varepsilon) = \frac{4D^2\varepsilon\Delta_M}{v_a\,N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{n_{i,\mathbf{k}}\,E_{fi}(\mathbf{k})}{[\varepsilon^2 - E_{fi}^2(\mathbf{k})]^2}\ ,$$

$$\chi_{2\mathrm{incoh}}^{xy}(0;\ \varepsilon) = \frac{4d^2\varepsilon\Delta_M}{v_a\,N^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\frac{n_{i,\mathbf{k}}\,E_{fi}(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')}{[\varepsilon^2 - E_{fi}^2(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')]^2}\ . \quad (19)$$

$$\chi^0(0;\ \varepsilon) + \chi^{\|}(0;\ \varepsilon) = \chi_1^0(0;\ \varepsilon) + \chi_1^{\|}(0;\ \varepsilon)\ ,$$

$$\chi_{1\mathrm{coh}}^0(0;\ \varepsilon) + \chi_{1\mathrm{coh}}^{\|}(0;\ \varepsilon) =$$

$$= \frac{2D^2}{v_a\,N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{n_{i,\mathbf{k}}\,E_{fi}(\mathbf{k})}{E_{fi}^2(\mathbf{k}) - \varepsilon^2}\left\{1 + \frac{\Delta_M^2[E_{fi}^2(\mathbf{k}) + 3\varepsilon^2]}{[E_{fi}^2(\mathbf{k}) - \varepsilon^2]^2}\right\}, \quad (20)$$

$$\chi_{1\mathrm{incoh}}^0(0;\ \varepsilon) + \chi_{1\mathrm{incoh}}^{\|}(0;\ \varepsilon) =$$

$$= \frac{2d^2}{v_a\,N^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\frac{n_{i,\mathbf{k}}\,E_{fi}(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')}{E_{fi}^2(\mathbf{k},\,\mathbf{k}') - \varepsilon^2}\left\{1 + \frac{\Delta_M^2[E_{fi}^2(\mathbf{k},\,\mathbf{k}') + 3\varepsilon^2]}{[E_{fi}^2(\mathbf{k},\,\mathbf{k}') - \varepsilon^2]^2}\right\}.$$

В статическом пределе ($\varepsilon = 0$) формулы (19), (20) принимают вид

$$\chi^{xy}(0;\ 0) = 0\ ;$$

$$\chi^0(0;\ 0) + \chi^{\|}(0;\ 0) = \chi_1^0(0;\ 0) + \chi_1^{\|}(0;\ 0)\ ,$$

$$\chi_{\mathrm{coh}}^0(0;\ 0) + \chi_{\mathrm{coh}}^{\|}(0;\ 0) = \frac{2D^2}{v_a\,N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{n_{i,\mathbf{k}}}{E_{fi}(\mathbf{k})}\left\{1 + \frac{\Delta_M^2}{E_{fi}^2(\mathbf{k})}\right\}, \quad (21)$$

$$\chi_{\mathrm{incoh}}^0(0;\ 0) + \chi_{\mathrm{incoh}}^{\|}(0;\ 0) =$$

$$= \frac{2d^2}{v_a\,N^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\frac{n_{i,\mathbf{k}}}{E_{fi}(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')}\left\{1 + \frac{\Delta_M^2}{E_{fi}^2(\mathbf{k},\,\mathbf{k}')}\right\}.$$

Из сравнения выражений (19) и (20) видно, что недиагональная восприимчивость χ^{xy}, в отличие от диагональной $\chi^0 + \chi^{\|}$, при переходе через область резонансов не меняет знак.

Для переходов в системе локализованных электронов ($T(\mathbf{k}) = 0$) спектры χ_{coh} и χ_{incoh} становятся подобными, и вместо формул (19) и (21) имеем

$$\chi^{xy}(0;\ \varepsilon) = \frac{4\langle|\,D_\lambda\,|^2\rangle\varepsilon\Delta_M\,ZE_{fi}}{v_a(E_{fi}^2 - \varepsilon^2)^2}\ , \quad (22)$$

$$\chi^0(0;\ 0) + \chi^{\|}(0;\ 0) = \frac{2\langle|\,D_\lambda\,|^2\rangle Z}{v_a\,E_{fi}}\left\{1 + \frac{\Delta_M^2}{E_{fi}^2}\right\}, \quad (23)$$

где $\langle|\,D_\lambda\,|^2\rangle = D^2 + d^2$ — средний квадрат модуля дипольного момента на узле λ; Z — число «магнитооптических» электронов на атом (в данном случае это число электронов на уровне i).

Зависимости вещественных частей $\chi_{1\mathrm{coh}}^{xy}$ и $\chi_{1\mathrm{incoh}}^{xy}$ от энергии фотона представлены на рис. 2.

Обсуждение

Выражения (15), (16) дают полное качественное описание магнитного вклада в динамическую диэлектрическую восприимчивость системы квазилокальных оптических диполей. По сравнению с ситуацией в совершенных кристаллах в данном случае спектр $\chi^{\alpha\beta}(\omega)$ распадается на две компоненты — когерентную $\chi_{\mathrm{coh}}^{\alpha\beta}$ и некогерентную $\chi_{\mathrm{incoh}}^{\alpha\beta}$ [2,3]. Первая формируется прямыми (или вертикальными) электронными переходами, т.е. переходами с сохранением квазиимпульса электрона, вторая — непрямыми (невертикальными), т.е. переходами с произвольными изменениями электронных квазиимпульсов. Интенсивность когерентной компоненты пропорциональна квадрату среднего по кристаллу значения электро-

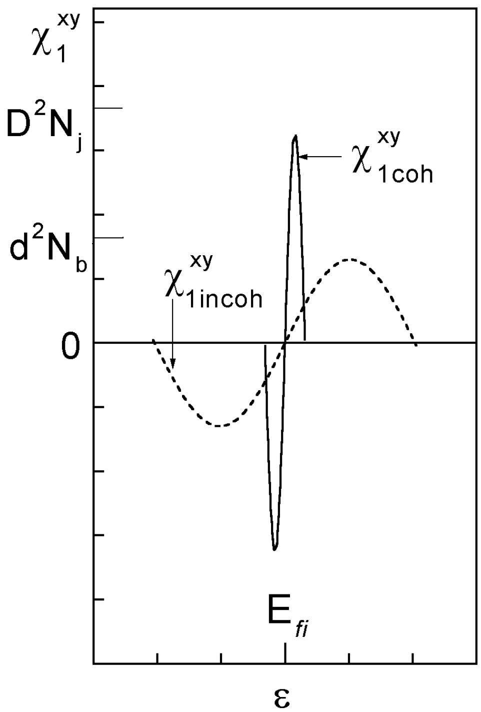

Рис. 2. Схематический вид рассчитанного спектра $\chi_1^{xy}(\varepsilon)$ вещественной части недиагональной диэлектрической восприимчивости хаотизированного f–d-магнетика: E_{fi} — энергия электронного $i \to f$-перехода; $D = \langle D_\lambda \rangle$ — средний дипольный момент этого перехода; $d = \langle d_\lambda^2 \rangle^{1/2}$ — пространственная флуктуация момента D_λ; параметры N_b и N_j пропорциональны произведению максимальных значений электронных плотностей состояний в зонах i и f и их межзонной плотности состояний соответственно; масштаб по горизонтали — в единицах T_i.

дипольного момента оптического перехода, интенсивность некогерентной — среднему квадрату флуктуации электродипольного момента.

Вдали от резонансных частот $E_{fi,\mu\pm1}$ дисперсная часть (поляризуемость) $\chi_2^{xy}(\omega)$ недиагональной компоненты линейна в главном порядке по магнитному полю H_0 и константе спин-орбитального взаимодействия ζ, диагональные же магнитные вклады $\chi_1^{||}(\omega)$ квадратичны по эффективному полю $\Delta_M = \zeta/2 - \mu_B H_0$. Структура формулы (22) аналогична структуре формулы Нагаева [6], формула (23) дает магнитный вклад в статическую диэлектрическую восприимчивость.

Базисными функциями гамильтониана настоящей модели являются собственные функции оператора z-проекции орбитального момента, коммутирующего с гамильтонианом орбитального движения системы электронов в магнитном поле [21]. Такая модель содержит две резонансных частоты $E_{fi,\mu\pm1}$ в отличие от моделей с гамильтонианом, основанным на собственных функциях кристаллического поля (см., например, [6]). В последнем случае энергетический спектр в первом приближении по ζ (и H_0) содержит только одну резонансную частоту E_{fi} [28], но вдали от резонансной области обе модели дают совпадающие результаты. Выбор между обеими моделями (или их модификациями) при описании магнитооптических спектров в непосредственной близости от резонансов определяется величиной отношения Δ_M к соответствующему параметру кристаллического поля исследуемой системы.

Как можно видеть из (17), (18), спектр $\chi^0(\varepsilon) + \chi^{||}(\varepsilon)$ отличается от диагональной диэлектрической восприимчивости немагнитного происхождения (см., например, [1]). Поглощательная часть $\chi_2^0(\varepsilon) + \chi_2^{||}(\varepsilon)$ содержит два равноотстоящих от E_{fi} пика, которые, впрочем, имеют такую же форму, как и «немагнитный» пик поглощения. Дисперсная часть $\chi_1^0(\varepsilon) + \chi_1^{||}(\varepsilon)$ также представляет собой две раздвинутые относительно E_{fi} характерные «осцилляции», аналогичные вкладам в обычную «немагнитную» динамическую диэлектрическую восприимчивость.

Магнитооптический эффект возникает при взаимодействии света с каждым атомом в отдельности даже при отсутствии внешнего магнитного поля как результат спин-орбитального взаимодействия, но в случае, если средний по кристаллу магнитный момент равен нулю, макроскопический эффект отсутствует. Для вычисления диэлектрической восприимчивости системы в отсутствие макроскопической намагниченности необходимо включить в схему расчета (например, в модели псевдосплава) *равное количество* узлов с электронными переходами

$$|\lambda, i, \mu, \sigma\rangle \to |\lambda, f, \mu\pm1, \sigma\rangle$$

и

$$|\lambda, i, -\mu, -\sigma\rangle \to |\lambda, f, -\mu\mp1, -\sigma\rangle\ .$$

При этом спектры $\chi^+(\varepsilon)$ и $\chi^-(\varepsilon)$ содержат по две резонансные частоты и полностью совпадают. В результате $\chi^{xy}(\varepsilon) = 0$, а $\chi^{||}(\varepsilon) \neq 0$, так что соотношение (23) может объяснить экспериментально обнаруженную квадратичную по магнитному моменту иона добавку к статической электронной поляризуемости оксидов железа [29,30] и редкоземельных элементов [31].

Авторы признательны В. В. Еременко и Н. Ф. Харченко за интерес и поддержку работы, А. А. Логинову за конструктивное обсуждение.

Работа была частично поддержана грантами Международного научного фонда и Правительства Украины (ISF#U9L000 и ISF/UA#U9L200), а

также Лейденской лабораторией им. Камерлинг—Оннеса и Голландской организацией научных исследований.

1. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1974); J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, University Press, Cambridge (1972).
2. А. Б. Безносов, В. П. Гнездилов, В. В. Еременко, *Письма в ЖЭТФ* **38**, 486 (1983); *ФНТ* **10**, 954 (1984).
3. A. B. Beznosov, V. V. Eremenko, and V. P. Gnezdilov, *J. Magn. Magn. Mater.* **43**, 243 (1984); **54–57**, 1251 (1986).
4. А. Б. Безносов, В. П. Гнездилов, В. В. Еременко, *Письма в ЖТФ* **10**, 14906 (1984); *ЖТФ* **55**, 1866 (1985).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Изд-во физ.-мат. лит., Москва (1959).
6. Э. Л. Нагаев, *Физика магнитных полупроводников*, Наука, Москва (1979); E. L. Nagaev, *Physics of Magnetic Semiconductors*, Mir, Moscow (1983).
7. А. В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, Изд-во физ.-мат. лит., Москва (1961).
8. B. R. Cooper, *Phys. Rev.* **A139**, 1505 (1965).
9. J. L. Erskine and E. A. Stern, *Phys. Rev.* **B8**, 1239 (1973).
10. H. Ebert, *Rep. Prog. Phys.* **59**, 1665 (1996).
11. V. N. Antonov, A. N. Yaresko, A. Ya. Perlov, V. V. Nemoshkalenko, P. M. Oppeneer, and H. Eschrig, *ФНТ* **25**, 527 (1999).
12. Н. Мотт, Э. Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, Мир, Москва (1982); M. F. Mott and E. A. Davis, *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford (1979).
13. Э. Л. Нагаев, *УФН* **166**, 833 (1996).
14. В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, *ФНТ* **26**, 231 (2000).
15. E. S. Orel and A. B. Beznosov, в кн.: *Физические явления в твердых телах*, В. В. Ульянов (ред.), ХГУ, Харьков: ХГУ (1995), с. 41.
16. Э. С. Орел, А. Б. Безносов, *УФЖ* **40**, 579 (1995).
17. А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1979).
18. Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, Москва (1985).
19. H. Jones, *Phys. Rev.* **134**, 958 (1964).
20. Г. Эренрейх, Л. Шварц, *Электронная структура сплавов*, Мир, Москва (1979); H. Ehrenreich and L. Schwartz, *The Electronic Structure of Alloys, Solid State Physics*, 31 (1976).
21. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976).
22. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
23. K. Elk and W. Gasser, *Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkorperphysik*, Akademie-Verlag, Berlin (1979).
24. Е. В. Кузьмин, Г. А. Петраковский, Э. А. Завадский, *Физика магнитоупорядоченных веществ*, Наука, Новосибирск (1976).
25. P. N. Argyres, *Phys. Rev.* **97**, 334 (1955).
26. Г. С. Кринчик, В. А. Артемьев, *ЖЭТФ* **53**, 1901 (1967).
27. А. В. Малаховский, *Избранные вопросы оптики и магнитооптики соединений переходных элементов*, Наука, Новосибирск (1992).
28. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
29. A. B. Beznosov, V. V. Eremenko, and A. I. Galuza, *Abstracts of the Intern. Conf. on Magnetism*, 1Pe13, San Francisco (1985).
30. A. B. Beznosov, A. I. Galuza, V. V. Eremenko, *Fiz. Nizk. Temp.* **18**, S1-183 (1992).
31. А. Б. Безносов, А. И. Галуза, *Тез. докл. XIV Всерос. конф. по физике сегнетоэлектриков*, Иваново, Ив. гос. ун-т (1995), с. 310.

The dynamic dielectric susceptibility tensor of a randomized *f–d*-magnet

A. B. Beznosov and E. S. Orel

The magnetic contribution to the dynamic dielectric susceptibility tensor $\chi^{\alpha\beta}(\omega) = \chi_1^{\alpha\beta}(\omega) + i\chi_2^{\alpha\beta}(\omega)$ of a system of random quasi-local optical dipoles in an isotropic magnetic conductor is calculated by the two-time retarded Green function technique. The spectrum obtained consists of *coherent* $\chi_{\text{coh}}^{\alpha\beta}$ and *incoherent* $\chi_{\text{incoh}}^{\alpha\beta}$ components, formed by the electron excitations with zero and arbitrary quasi-momentum, respectively. Far from the resonance frequencies (where χ is represented by the dispersive part only) the off-diagonal components $\chi_2^{\alpha\neq\beta}(\omega)$ are linear in the effective field $\Delta_M = \zeta/2 - \mu_B H_0$ (ζ is the spin-orbit coupling constant, μ_B is the Bohr magneton, and H is a magnetic field) in the main order, while the field-dependent contribution to the diagonal components $\chi_1^{\alpha\alpha}(\omega)$ is quadratic in Δ_M .