

ЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.20.Eh, 72.10.Bg, 72.15.Eb, 75.10.-b, 75.30.Mb, 75.85.+t

Электромагнетизм РЗМ. Квантовая теория

А. И. Мицек, В. Н. Пушкарь

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Академика Вернадского, 36,
03142 Киев, Украина*

Магнитоэлектрические эффекты в редкоземельных металлах (РЗМ) называются «гигантскими» благодаря большим спиновым (S_r), орбитальным (L_r) и угловым (J_r) моментам редкоземельных ионов (РЗИ) в узлах г. Их унитарное описание возможно в представлении многоэлектронных операторных спиноров (МЭОС). Взаимодействие зонных (токовых) фермионов (ЗФ) с флуктуациями химических связей (ФХС) доминирует в процессах релаксации ЗФ и создаёт анизотропию спектра ЗФ и поверхностей Ферми. Функции Грина для ФХС (как фурье-образы МЭОС), рассчитанные методом вторичного квантования, приводят к конечным выражениям времени релаксации $\tau_k(T, J)$ и эффективных масс $m^*(T, J)$ для ЗФ при температуре T . Линейные зависимости электросопротивления (ЭС) $R_{ij}(T)$ и аномального эффекта Холла $R_H(T)$ от температуры T и их квадратичные зависимости от среднего спина РЗИ $S_i(T)$ интерпретируют эксперименты для РЗМ. Дается критика полуклассических и одноэлектронных моделей магнитоэлектрических эффектов.

Ключевые слова: теория магнитоэлектрических эффектов редкоземельных металлов (РЗМ), флуктуации химических связей (ФХС) и рассеяние на них токовых (зонных) фермионов (ЗФ), анизотропия релаксации и эффективной массы ЗФ.

Магнетоелектричні ефекти в рідкісноземельних металах (РЗМ) виявляються «гігантськими» завдяки великим спіновим (S_r), орбітальним (L_r) і

Corresponding author: Oleksandr Ivanovych Mitsek
E-mail: amitsek@gmail.com

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: O. I. Mitsek and V. M. Pushkar, Electromagnetism of REM. Quantum Theory, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 6: 713–728 (2018) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.40.06.0713.

кутовим (J_r) моментам рідкісноземельних йонів (РЗЙ) у вузлах r . Їх унітарний опис є можливим у відображенні багатоелектронних операторних спінорів (БЕОС). Взаємодія зонних (струмових) ферміонів (ЗФ) з флюктуаціями хемічних зв'язків (ФХЗ) домінує у процесах релаксації ЗФ і створює анізотропію спектру ЗФ і поверхонь Фермі. Грінкові функції для ФХЗ, як Фур'є-образи БЕОС, що розраховані методом вторинного квантування, дають кінцеві вирази часу релаксації $\tau_k(T, \mathbf{J})$ та ефективних мас $m^*(T, \mathbf{J})$ для ЗФ за температури T . Лінійні залежності електроопору (ЕО) $R_{ij}(T)$ і аномального Голлового ефекту $R_{ij}(T)$ від температури T та їхні квадратичні залежності від середнього спіну РЗЙ $S_i(T)$ інтерпретують експерименти для РЗМ. Дається критика напівкласичних і одноелектронних моделей магнетоелектричних ефектів.

Ключові слова: теорія магнетоелектричних ефектів рідкісноземельних металів (РЗМ), флюктуації хемічних зв'язків (ФХЗ) і розсіяння на них струмових (зонних) ферміонів (ЗФ), анізотропія релаксації та ефективної маси ЗФ.

Magnetoelectric effects in rare-earth metals (REM) are 'giant' due to large spin (S_r), orbital (L_r), and angle (J_r) moments of rare-earth ions (REI) in sites r . Unitary description of them is possible within the many-electron operator spinors' (MEOS) representation. The interaction of band (current) fermions (BF) with chemical-bonds' fluctuations (CBF) prevails in processes of BF relaxation and creates anisotropy of both BF spectra and Fermi surfaces. The Green functions for CBF (as the MEOS Fourier images) calculated by the secondary quantization lead to final expressions for relaxation time $\tau_k(T, \mathbf{J})$ and effective mass $m^*(T, \mathbf{J})$ of BF at temperature T . Linear dependences of electrical resistance $R_{ij}(T)$ and anomalous Hall effect $R_{ij}(T)$ on temperature T and their quadratic dependences on the mean REI-spin $S_i(T)$ interpret experiments for REM. The criticism of semi-classical and one-electron magnetoelectric effects' models is given.

Key words: theory of magnetoelectric effects in rare-earth metals (REM), chemical-bonds' fluctuations (CBF) and current (band) fermions' scattering by them, anisotropy of BF relaxation and effective mass.

(Получено 20 ноября 2017 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ. АФМ И ФМ СОСТОЯНИЯ РЗМ

Тензор электросопротивления (ЭС) \hat{R} чистых РЗМ и их соединений привязан к магнитной фазовой диаграмме (МФД) [1]. (Влияние изменений атомной структуры и атомных фазовых диаграмм (АФД) анализируется в другом месте.) Диагональные элементы ЭС (R_{ij}) отражают симметрию электрических свойств (ЭС и др.), недиагональные — магнитоэлектрических (эффект Холла и др.). Металлическая связь (полоса энергий перескоков зонных электронов) обуславливает эффективную массу $m^*_\sigma(\mathbf{k})$ носителей заряда с импульсом \mathbf{k} и спином σ . Пересечение зонных спектров $\tilde{\epsilon}_k$ и ветвей валент-

ных возбуждений (флуктуаций химических связей (ФХС) [2] и др.), фононов и т.п. вводит время релаксации $\tau_{ij}(\mathbf{k}, \sigma)$ токовых (зонных) электронов. Такой подход обобщает формулу Друде, выражая тензор \mathbf{R} через тензоры $\hat{\mathbf{m}}^*$ и $\hat{\tau}^{-1}$:

$$R_{ij} = \frac{m_{ij}^*}{n_b e \tau} \tau_{ij}^{-1}, \quad (1.1)$$

где n_b — плотность зонных фермионов $f_{\mathbf{k}\sigma}$. Здесь в классическую формулу (1.1) входят усреднённые значения n_b , m^* и τ , которые должна дать квантовая теория.

Уход валентных электронов в зону $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}$ открывает аспект индивидуальности теории ионов в узлах \mathbf{r} . Она оперирует числом n_c ковалентных электронов со спином \mathbf{S}_r , орбитальным моментом \mathbf{L}_r и угловым моментом \mathbf{J}_r . Эти характеристики объединяет многоэлектронный операторный спинор (МЭОС). Вводим МЭОС для редкоземельного иона (РЗИ) [2]

$$F_r = \{F_{r\sigma}, c_{r\sigma}, v_{rL}\}, \quad F_{r\sigma} = \prod_{\mu=1}^{n_c} a_{r\sigma\mu}^+, \quad (F_{r\sigma} \bar{F}_{r\sigma}) = 1, \quad (1.2)$$

с условием локальности РЗИ в узле \mathbf{r} .

Спин и орбитальный момент выделяются факторами

$$c_{r\sigma}^2 = (1 + \sigma S_r / 2), \quad v_{rL}^2 = (1 + L L_r) / 7, \quad \bar{F}_r = F_r^+, \quad [F_r, \bar{F}_r]_{+,-} = \delta_{rR}. \quad (1.3)$$

Условие локальности (1.3) хорошо определяет статистику флуктуаций химических связей (ФХС) в пространствах Фока (фермионы или бозоны) согласно [2]

$$F_r = F_0 + \sum_k F_k e^{ikr}, \quad F_k = \sum_r F_r e^{-ikr} / N_c, \quad N n_c = N_c, \quad (1.4)$$

где N — число ионов. Для ФХС можно ввести числа заполнения

$$N_{\mathbf{k},\pm}^F = (e^{\beta E_{\mathbf{k}}} \pm 1)^{-1}, \quad [F_{\mathbf{k}}, \bar{F}_{\mathbf{q}}]_{\pm} = \delta_{\mathbf{kq}} / N_c \quad (1.5)$$

для чётных (+) или нечётных (−) n_c . Энергия ФХС ($E_{\mathbf{k}}$) даётся ниже.

Металлическая (зонная) часть энергии связи РЗМ (как и в других металлах)

$$H^b = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^+ f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \varepsilon_{F\sigma}, \quad [f_{\mathbf{k}\sigma}^+, f_{\mathbf{q}\sigma'}]_+ = \delta_{\mathbf{kq}} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad N_{\mathbf{k}}^b = n_{\mathbf{k}}^b(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}). \quad (1.6)$$

Добавочная зонно-ковалентная энергия связи [3]

$$H^{\text{cov}-b} = - \sum_{\mathbf{rR}} \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}) F_r f_{\mathbf{R}}^+ f_{\mathbf{R}} \bar{F}_R = - \sum_{\mathbf{k}} \Gamma(\mathbf{k}) F_0 f_{\mathbf{k}-}^+ f_{\mathbf{k}+} \bar{F}_{0-} + \dots, \quad (1.7)$$

в которой выделено рассеяние электрона (зонного) с переворотом спина ($+ \rightarrow -$).

Связь электросопротивления (ЭС) с атомными (АФД) и магнитными (МФД) фазовыми диаграммами выдвигает две качественные проблемы: 1) примесного ЭС и роли неоднородностей (несохранения \mathbf{k}), 2) скачков ЭС при разрушении антиферромагнитного (АФМ) упорядочения в точках Нееля или метамагнетизма (T_N или T_{mm}). Представления МЭОС адекватно решают эти проблемы для переходных сплавов.

Метод МЭОС расчёта рассеяния зонных электронов на РЗИ проверен в разд. 2 включением ФХС для ФМ состояния. Функциональные зависимости ЭС в форме $R(T, S_T)$ от температуры T и среднего спина S_T рассчитываются в разд. 3 для АФМ состояния. Здесь же выясняется связь магнетосопротивления $\Delta R_T(T, \mathbf{B})$ с магнитным полем \mathbf{B} и спином $S_T(\mathbf{B})$ как функции T , а также рассматриваются скачки $\Delta R_{mm}(\mathbf{B}_m)$ в поле метамагнитного перехода [4]. В разделе 4 выводятся формулы для линейных зависимостей магнетосопротивления $\Delta R_{ij}(T, S^2)$ и аномального эффекта Холла $R_{ij}(T, S^2)$ от температуры T и спина S ряда РЗИ. Анизотропия зонного спектра (эффективной массы m_{ij}^* и поверхности Ферми) рассчитана в разд. 5. «Золотая аномалия» низкотемпературного минимума ЭС $R(T)$ интерпретируется в разд. 6 на примере $\text{AuFe}_{0,01}$ в рамках МЭОС. Фононы в РЗМ анализируются в разд. 7. Заключение и выводы — в разд. 8.

2. РАССЕЯНИЕ ТОКОВЫХ (ЗОННЫХ) ЭЛЕКТРОНОВ В РЗМ. ФМ ФАЗА

Играет роль зонно-ковалентная связь (1.7). Запишем её в представлении ФХС в виде функционала МЭОС [5]:

$$H^{\text{cov-b}} = -\sum_{\mathbf{k}} \Gamma(\mathbf{k}) F_{0\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^+ f_{\mathbf{k}\sigma} \bar{F}_{0\sigma'} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q}) F_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{k}}^+ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \bar{F}_0 + \text{H.c.}] - \dots \quad (2.1)$$

Для начала рассматриваем ФМ-состояние ($\sigma' = \sigma$).

Найдём спектр ФХС: энергии $E_{\mathbf{k}}$ и числа заполнения $N_{\mathbf{k}}$. Выделим в (2.1) основные члены

$$H^{\text{cov-b}} = -\sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{0}) F_0 \bar{F}_0 f_{\mathbf{q}}^+ f_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}} \Gamma(\mathbf{k}) E_{\mathbf{k}} \bar{F}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^+ f_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q}) F_{0\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^+ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} F_{\mathbf{q}\sigma} \quad (2.2)$$

для $\sigma = +$. Здесь числа фермионов $n_{\mathbf{k}}$ и ФХС $N_{\mathbf{k}}$ определены как

$$n_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^+ f_{\mathbf{k}}, \quad \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = n_b, \quad N_{\mathbf{k}} = \langle F_{\mathbf{k}} \bar{F}_{\mathbf{k}} \rangle = N_{F,B}(E_{\mathbf{k}}) = (e^{\beta E_{\mathbf{k}}} \pm 1)^{-1}, \quad (2.3)$$

где $\beta = 1/(k_B T)$.

Используем

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = [\Gamma(0) - \Gamma(\mathbf{k})]n_b, \quad F_0\bar{F}_0 = 1 - \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}. \quad (2.4)$$

Теперь в (2.2) суммируем по \mathbf{q} , учитывая (2.4), и имеем

$$H^{\text{cov}-b} = H_0 + \sum_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}, \quad E_{\mathbf{k}}(n_b) = \Gamma_{\mathbf{k}} \quad (2.5)$$

— сильную зависимость энергии ФХС от плотности зонных электронов.

Полная плотность ФХС

$$N_F = 1 - \rho^2(T), \quad \rho^2(T) = \langle F_0\bar{F}_0 \rangle \quad (2.6)$$

зависит от T , как и параметр связи РЗИ (2.6) ρ^2 .

Теперь можно прямо рассчитать рассеяние зонных фермионов на ФХС и зависимость $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ (т.е. эффективную массу m^* и затухание τ) от ρ^2 и энергии связи Γ для РЗИ.

Вводим (боголюбковские) функции Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^b = \langle\langle f_{\mathbf{k}\sigma} | f_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle, \quad G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{Fb} = \langle\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} F_{0\sigma} \bar{F}_{\mathbf{q}+} | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle. \quad (2.7)$$

Уравнения движения для них, согласно (2.2), суть

$$(E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma})G_{\mathbf{k}\sigma}^b - \sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q})G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{Fb} = 1, \quad (2.8)$$

$$(E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \Gamma_{\mathbf{q}+})G_{\mathbf{k}\mathbf{q},\sigma}^{Fb} - \sum_{\mathbf{q}'} \Gamma^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}') \langle\langle F_{0\sigma} \bar{F}_{\mathbf{q}'} \bar{F}_{0\sigma} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q},+} | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle = 0. \quad (2.8')$$

Второй член в (2.8') имеет главную часть

$$-\Gamma^*(\mathbf{k}, \mathbf{q})G_{\mathbf{k}+\rho_{\sigma}^2}^b(\rho_+^2\delta_{\mathbf{q}0} + N_{\mathbf{q}+}) \text{ и } \Gamma_{\mathbf{k}\rho}^*\rho^4(T)\delta_{0\mathbf{q}}. \quad (2.9)$$

Перенормировка энергии фермиона в первом приближении

$$\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}+} = \sum_{\mathbf{q}} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma)\rho_{\sigma}^2 N_{\mathbf{q}+} / (E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \Gamma_{\mathbf{q}+}). \quad (2.10)$$

Для ФМ-состояния

$$\Gamma(S) = \Gamma(0) + AS^2, \quad \sigma = \pm, \quad (2.11)$$

и проявляется зависимость тензора ЭС от намагниченности РЗИ ($\mathbf{M} \sim \mathbf{S}_T$) через тензор, обратный частоте релаксации $\hat{\tau}$, где

$$\hat{\tau}^{-1}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} |\hat{\Gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, S)|^2 \rho_+^2 N_{\mathbf{q}} \delta[\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \Gamma_{\mathbf{q}+}(S)]. \quad (2.12)$$

Функция Дирака при $k \rightarrow k_F \gg q$ сводится к зависимости от q :

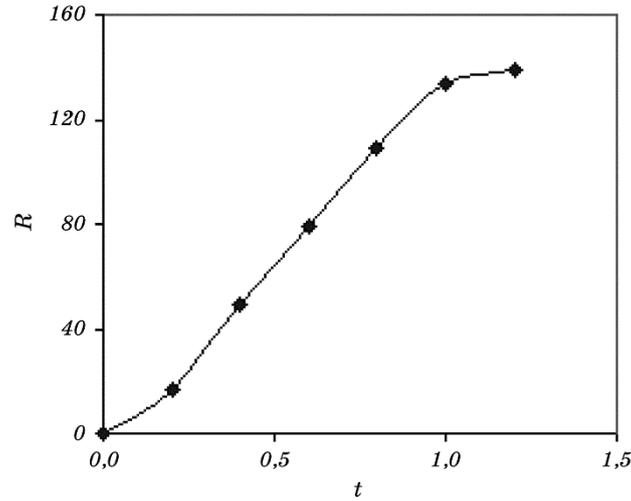


Рис. 1. Зависимость ЭС (R) от температуры $t = T/T_N$ при $T < T_N$ (T_c). Теория (линия) и экспериментальные точки для Gd [6].

Fig. 1. The dependence of electrical resistance (R) on temperature $t = T/T_N$ at $T < T_N$ (T_c); theory (line) and experimental points for Gd [6].

$$\delta[\dots] \sim 1/q. \quad (2.12')$$

Для диагонального члена тензора времени релаксации (т.е. для ЭС) после усреднения вблизи поверхности Ферми имеем

$$\begin{aligned} \tau^{-1}(T, S_T) = & |\Gamma + AS_T^2| \rho^2 + p_1(T/T_F), \quad \Gamma / k_B \sim T_F, \\ p_1 = \text{const}, \quad \rho_+^2 = & \langle F_{0+} \bar{F}_{0+} \rangle, \end{aligned} \quad (2.13)$$

убывающую зависимость ЭС от намагниченности РЗМ $\sim S_T$. Здесь A учитывает разложение $c_s(S_T)$. Сравнение зависимости $R \sim T$, согласно (2.13), с экспериментальными данными [6] представлено на рис. 1. Согласие наблюдается при $T < T_N$, что подтверждает существенную роль рассеяния токовых электронов на ФХС. Этот результат ниже (разд. 3) сравним с выводами расчёта ЭС для АФМ состояния и метамагнитного перехода.

3. АФМ СПИНОВАЯ РЕШЁТКА РЗМ

Охлаждение РЗМ в магнитном поле $B=0$ переводит их в АФМ-состояние разной сложности, но для них $S_T=0$ [1, 6, 7]. Остановимся сперва на простейшем случае чередования ионов с разными спинами (+ или -). Ближайшими соседними окажутся РЗИ с противоположными спинами. Перескоки зонных электронов здесь описы-

ваются гамильтонианами

$$H^{\text{cov-b}} = -\sum_{\mathbf{rR}} \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}) F_{\mathbf{r}^+} f_{\mathbf{R}^-}^+ f_{\mathbf{r}^+} \bar{F}_{\mathbf{R}^-}, \quad S_{\mathbf{r}^-} = -S_{\mathbf{R}^+}. \quad (3.1)$$

Выделяем спиновые факторы МЭОС:

$$c_{\mathbf{r}^+}^2 = (1 - \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}^+})/2, \quad c_{\mathbf{r}^+} \cong (1 \pm \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}^+}/2)/\sqrt{2}. \quad (3.2)$$

Уточняем гамильтониан (3.1):

$$H^{\text{cov-b}} = -\sum_{\mathbf{rR}} \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}) F_{\mathbf{r}^+} f_{\mathbf{R}^-}^+ f_{\mathbf{r}^+} \bar{F}_{\mathbf{R}^-} (1 - qS_T^2), \quad q > 0. \quad (3.3)$$

При расчёте ФХС и ЭС, аналогично (2.5) и (2.10), получаем, в отличие от ФМ-случая (2.10):

$$\tilde{\Gamma}_A(S) = \Gamma(0) - AS^2, \quad \Gamma(0) \rightarrow \Gamma_k, \quad A \sim q_S \Gamma(0). \quad (3.4)$$

Проведя аналогичный разделу 2 расчёт времени релаксации, получим вместо (2.14)

$$\tau_{\text{AFM}}^{-1}(T, S) = [\Gamma(0) - \alpha_A S_T^2]^{-2} QT, \quad (\alpha_A, Q) > 0. \quad (3.5)$$

Обобщая формулы (3.5) и (2.14), имеем для ЭС в ФМ- (-) и АФМ- (+) фазах:

$$R_{-,+}(T, S) = R(T, 0)(1 \mp \alpha_{F,A} S_T^2), \quad R(T, 0) \sim T, \quad (3.6)$$

т.е. уменьшение ЭС при переходе из АФМ- в ФМ-фазу, но увеличение ЭС ниже T_N для АФМ-упорядочения. Это различие наблюдается в тяжёлых РЗМ [1]. В отличие от сложных теоретических моделей [1, 6], здесь это объясняется просто формулой (3.6), следствие которой сравнивается с опытом на рис. 2 для Dy.

Сложнее ситуация в РЗМ при нелинейном (синусоидальном, спиральном и т.п.) спиновом упорядочении. Усложнение (3.1) приводит к более сложной зависимости $\tilde{\Gamma}_k(S_T)$, связанной с периодом спирали. К этой проблеме можно вернуться после уточнения данных опытов на неколлинеарных спиновых структурах РЗМ.

4. МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ И ЭФФЕКТ ХОЛЛА

Поле метамагнетизма $B = B_{mm}$ разрушает АФМ структуру. Спиновые решётки РЗМ переходят в ФМ фазу. Этот переход первого рода сопровождается гистерезисом с рассчитанной в [7] доменной структурой. Её подвижность проявляется в зависимости $R_{ij}(\mathbf{B})$. Величина магнетосопротивления оказывается достаточно большой [8].

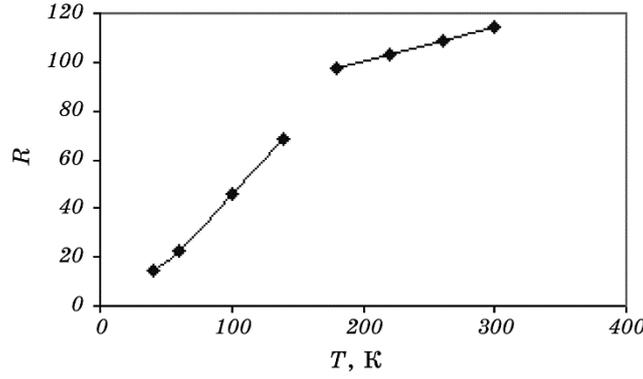


Рис. 2. Зависимость ЭС от температуры при $T < T_N$ в АФМ-фазе. Теория (линия) и экспериментальные точки для Dy [6].

Fig. 2. The dependence of electrical resistance on temperature T at $T < T_N$ in the antiferromagnetic phase; theory (line) and experimental points for Dy [6].

Максимальный эффект (интегральный) при $B \rightarrow B_{mm}$ находим из (3.6):

$$\Delta R_{ij}(T, B_{mm}) = -2R_{ij}(T, 0)\alpha_S S_T^2 \sim -0,1R_{ij}(T, 0) \quad (4.1)$$

при $S_T \sim 10$ и $\alpha_S \sim 10^{-4}$. Для низких $T \ll T_N$ имеем $S_T \cong S$, однако при $T \rightarrow T_N$ величина (4.1) резко падает. Тогда в РЗМ-соединениях типа Fe_3Tb , имеющих $T_c \sim T_N \sim 10^3$ К, эффект магнетосопротивления (4.1) не мал, даже при $T \sim 300$ К; см., например, [8].

Эффект Холла (аномальный) для начала рассматриваем на основе классического определения тензора ЭС (3.6) R_{ij} как функции тензоров масс зонных (токовых) фермионов m_{ij}^* и частоты релаксации $\tau_{ij}^{-1}(T, B)$. Исходим из перенормировки зонного спектра при взаимодействии (рассеянии) с ФХС (2.10), массу \hat{m}^* перенормирует вещественная часть (2.10), а затухание $\hat{\tau}(T, B)$ — мнимая.

При расчёте тензорного характера релаксации зонных фермионов τ_{ij}^{-1} исходим из обобщения (2.5). Усреднение фактора $\Gamma^{ij}(\mathbf{k})$ связано с коррелятором из (2.2)

$$F_{0\sigma j} \bar{F}_{k\sigma j} = F_{0\sigma} \bar{F}_{k\sigma} (1 + q_S S_j^2), \quad S_j = \langle S_j^j \rangle. \quad (4.2)$$

Скрещивая электрический ток (и его поле E_z) и ориентацию спина $S_j = S_x \delta_{jx}$, имеем:

$$m_{ij}^* = m_{zz}^* \delta_{jz} \cong m_0^* \quad (4.2')$$

и частоту релаксации τ_{xx}^{-1} , согласно (4.2) и (3.6). Отсюда имеем холловскую составляющую тензора ЭС из

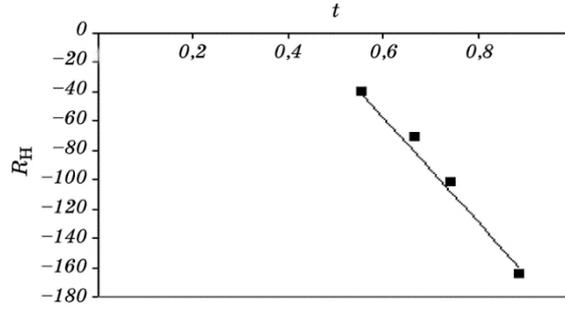


Рис. 3. Зависимость константы эффекта Холла R_H от температуры t . Теория (линия) и экспериментальные точки для Gd [6].

Fig. 3. Dependence of the Hall effect constant R_H on temperature t ; theory (line) and experimental points for Gd [6].

$$R_{zx}(T, S_x) = \frac{R_{zz}(T, 0)}{\sqrt{(1 + \alpha_F S_x^2)^5}}. \quad (4.3)$$

Далее выделяем составляющую Холла тензора ЭС:

$$\Delta R_{zx} = R_{zx}(S) - R_{zx}(0) \cong R_{zz}(0)(5\alpha_F/2)S_x^2(T), \quad T < T_c. \quad (4.4)$$

Она сильно зависит от среднего спина S_T и линейно от T ; см. сравнение с опытом [6] на рис. 3.

5. АНИЗОТРОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

В последнее время активно обсуждается проблема анизотропии зонного спектра в переходных сплавах; см. обзор [9]. Эта анизотропия выявляется данными измерений поверхности Ферми. Расчёты этого эффекта в рамках одноэлектронной (чисто зонной) теории встречаются с логическими трудностями. В представлении МЭОС анизотропия зонного спектра появляется как результат перенормировки эффективной массы $\tilde{m}(S)$ в разд. 2. Начнём с перенормировки ФХС $E_k(S)$.

Подробно запишем энергию ФХС

$$H^{CBF} = \sum_k \Gamma_k(S) F_{kS} \bar{F}_{kS}, \quad E_k = \Gamma_k(S) = \Gamma_k(1 + q_{jj}^S S_j S_j + q_{jj}^L L_j L_j). \quad (5.1)$$

Перенормировка зонного спектра $\tilde{\epsilon}(k, S)$ получается уравнениями разд. 2 для зонно-ковалентного гамильтониана

$$H^{\text{cov-b}}(J) = - \sum_{kq} \Gamma^{Fb}(k, q) F_0(J) f_{k\sigma}^+ f_{k-q, \sigma} \bar{F}_q(J). \quad (5.2)$$

Функции Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^b = \langle\langle f_{\mathbf{k}} | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle, \quad G_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma'}^{Fb} = \langle\langle F_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma} \bar{F}_0 | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle \quad (5.3)$$

подчиняются уравнениям разд. 2. Перенормировка зонной функции Грина (5.3) сопровождается перенормировкой зонного спектра

$$\Delta \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{q}} |\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \rho_0^2 n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} / (\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma'} - E_{\mathbf{q}}), \quad (5.4)$$

где плотности зонных фермионов $n_{\mathbf{q}}$ и ФХС $N_{\mathbf{q}}$ определены выше; см. также [5].

Вещественная часть (5.5) даёт перенормировку эффективной массы зонного фермиона

$$\text{Re}(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}) = -\rho_0^2 \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} |\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 N_{\mathbf{q}} / (\mathbf{k}\mathbf{q}/m^* - \Gamma\mathbf{q}^2). \quad (5.5)$$

Имеем

$$|\tilde{\Gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 = \Gamma_0^2 + \Gamma_{0j}^2 (k_i k_j) (q_S^2 S_i S_j + q_L^2 L_i L_j) \delta_{ij}. \quad (5.6)$$

Получаем анизотропию эффективной массы

$$\Delta m_{jj}^* = U(T) \alpha_j^2 (\Gamma_0^2 / m_0^*) J_j^2, \quad U(T) \sim T, \quad (5.7)$$

т.е. рассчитанная масса фермиона m^* имеет тензорный характер. Её анизотропия слаба при $T \rightarrow 0$ К и нарастает с ростом T в согласии с [9].

6. «ЗОЛОТАЯ АНОМАЛИЯ» ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ Au–Fe_{0,01}

Разбавленные сплавы переходных элементов часто обнаруживают минимум электросопротивления $R(T)$ при низких $T \sim 10$ К [1]. Впервые «золотая аномалия» обнаружена на растворе AuFe_{0,01} (отсюда и название). Не анализируя многочисленный комплекс теорий, в основном в одноэлектронной модели, предлагаем альтернативное (многоэлектронное) объяснение эффекта «золотой аномалии».

В представлении МЭОС вводим для ионов Fe ($n_c = 2$, $S = 1$)

$$D_{\mathbf{r}} = D_{\mathbf{r}}^{(2)} = \{d_{\mathbf{r}\sigma} c_{\mathbf{r}\sigma}\}, \quad c_{\mathbf{r}\sigma}^2 = (1 + \sigma \mathbf{S}_{\mathbf{r}}) / 2, \quad [D_{\mathbf{r}}, \bar{D}_{\mathbf{r}}]_{-} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}}. \quad (6.1)$$

Ионы Fe образуют обменно-связанные ФМ- или АФМ-системы. Полагая более вероятной причиной «золотой аномалии» АФМ-связь ионов (спинов $\mathbf{S}_{\mathbf{r}+}$ и $\mathbf{S}_{\mathbf{r}-}$), вводим гамильтонианы подсистем:

$$H^{\text{cov}} = -\sum_{\mathbf{k}} \Gamma(\mathbf{k}) D_{\mathbf{k}+} \bar{D}_{\mathbf{k}-}, \quad H^b = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^+ f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \Gamma(\mathbf{0}) - \Gamma(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}} \cong \Gamma \mathbf{k}^2. \quad (6.2)$$

Главный член связи подсистем (6.2)

$$H^{\text{cov}-b} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q}) D_{0\uparrow} f_{\mathbf{k}\uparrow}^+ f_{\mathbf{k}\downarrow} \bar{D}_{0\downarrow}, \quad N_{\mathbf{k}} = \langle D_{\mathbf{k}} \bar{D}_{\mathbf{k}} \rangle = (e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1)^{-1} \quad (T < T_F) \quad (6.3)$$

учитывает перескоки зонных фермионов между узлами (Fe), имеющими разные спины, с переворотом спина фермиона.

Используем функции Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^f = \langle\langle f_{\mathbf{k}\sigma} | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle, \quad G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{Df} = \langle\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} D_{0\uparrow} \bar{D}_{0\downarrow} | f_{\mathbf{k}+}^+ \rangle\rangle. \quad (6.4)$$

Уравнения движения:

$$(E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+}) G_{\mathbf{k}+}^f - \sum_{\mathbf{q}} \gamma G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{Df} = 1, \quad (6.5)$$

$$[E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-} - \Gamma(\mathbf{0})] G_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{Df} - C_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = 0. \quad (6.5')$$

Второй член уравнения (6.5') равен

$$C_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = -\Gamma^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \rho_{\uparrow}^2 \rho_{\downarrow}^2 G_{\mathbf{k}\uparrow}^f, \quad \rho_{\sigma}^2 = \langle D_{0\sigma} \bar{D}_{0\sigma} \rangle = \rho^2(T), \quad (6.6)$$

а член перенормировки

$$\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} = \sum_{\mathbf{q}} |\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \rho^4(T) / [E - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} - \Gamma(\mathbf{0})], \quad (6.7)$$

где

$$\rho^2 = 1 - \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}}) \cong 1 - QT, \quad Q \sim 1/T_F; \quad (6.8)$$

см. рис. 4, где $T_F \sim 10$ К.

Поправка первого приближения (6.7) к зонному спектру даёт частоту его релаксации:

$$\tau_{\mathbf{k}}^{-1} = \text{Im}(\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}}) \cong |\gamma(\mathbf{k})|^2 \rho^4(T) (1 - A_F T), \quad A_F^{-1} \sim E_F \sim 10 \text{ К}, \quad (6.9)$$

где

$$E_F \sim \Gamma(\mathbf{0}) x_{\text{Fe}}^2, \quad \Gamma \sim 10^3 k_B, \quad x_{\text{Fe}} \sim 10^{-2}, \quad (6.10)$$

и энергия ковалентной связи ионов Fe (Γ) берётся из данных для 3d-сплавов.

Затухание (6.9) можно рассматривать как результат рассеяния фермионов на точечных дефектах (ионах Fe). Подставляя выводы (6.8) (т.е. данные рис. 5) в (6.9), получаем для ЭС при $T \leq 10$ К результат, изображённый на рис. 6. Данная интерпретация «золотой аномалии» не противоречит общей теории вклада точечных дефек-

тов в ЭС при учёте их спина.

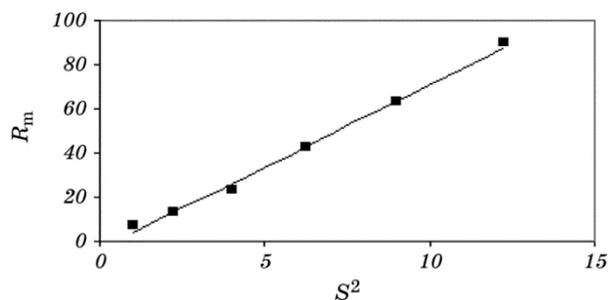


Рис. 4. Магнитная часть ЭС R_m как функция S^2 . Теория (линия) и экспериментальные точки для ряда Tm–Gd [6].

Fig. 4. The magnetic part of the electrical resistance R_m as a function of S^2 ; theory (line) and experimental points for the Tm–Gd series [6].

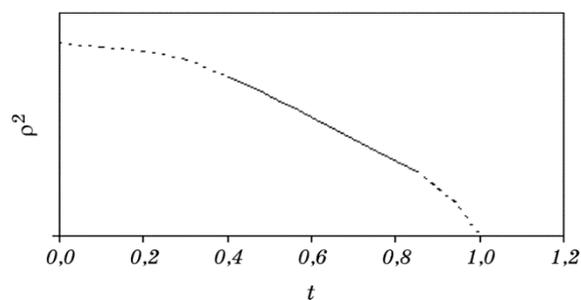


Рис. 5. Зависимость коррелятора ρ^2 от температуры t ($t = T/T_F$).

Fig. 5. Dependence of the correlator ρ^2 on temperature t ($t = T/T_F$).

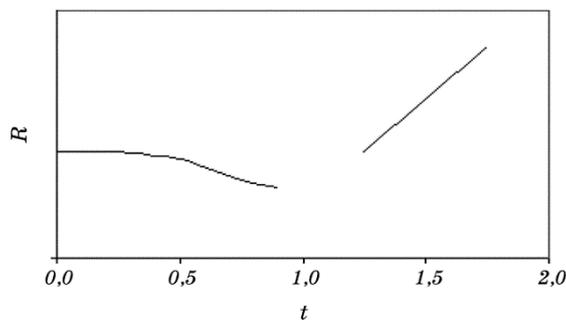


Рис. 6. Ход $R(t)$ при низких $T \leq T_F \sim 10$ К в форме «золотой аномалии» ЭС.

Fig. 6. Variation of $R(T)$ at low $T \leq T_F \sim 10$ K in the form of a ‘gold anomaly’ of electrical resistance.

7. ФОНОНЫ И ЭС В РЗМ

Вводим фононы p (бозоны $b_{\mathbf{k}}$) и их влияние на ковалентную связь без учёта (пока) их поляризации

$$H^p = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}, \quad H^{\text{cov}-b} = \sum_{\mathbf{k}} [\gamma(\mathbf{k}) F_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \bar{F}_0 + \text{H.c.}]. \quad (7.1)$$

Функции Грина

$$G_{\mathbf{k}}^p = \langle\langle b_{\mathbf{k}} | b_{\mathbf{k}}^+ \rangle\rangle, \quad G_{\mathbf{k}}^F = \langle\langle F_0 \bar{F}_{\mathbf{k}} | b_{\mathbf{k}}^+ \rangle\rangle \quad (7.2)$$

подчиняются уравнениям ($E_{\mathbf{k}}$ — энергия ФХС из разд. 3)

$$(E - \omega_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^p - \gamma^*(\mathbf{k}) G_{\mathbf{k}}^F = 1, \quad (E - E_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^F - \gamma(\mathbf{k}) \rho^2 G_{\mathbf{k}}^p = 0. \quad (7.3)$$

Детерминант (7.3) перенормирует элементарные возбуждения

$$\Delta_2 = (E - \omega_{\mathbf{k}})(E - E_{\mathbf{k}}) - |\gamma(\mathbf{k})|^2 \rho^2 \quad (7.4)$$

в виде

$$E_{\mathbf{k}}^{+,-} = \frac{1}{2} \left[\omega_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{(\omega_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})^2 + 4\rho^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2} \right]. \quad (7.5)$$

При низких температурах и средних $\bar{k} \rightarrow 0$ имеем

$$E_{\mathbf{k}}^{+,-} \cong \pm \rho |\gamma(0)| \quad (7.6)$$

и нелинейные зависимости среднего зонного затухания $\tau(T)$, т.е. $R(T)$, что подтверждает эксперимент при $T < 10^2$ К [6]. При $T \geq 10^2$ К перенормировка $E_{\mathbf{k}}^+ \cong \Gamma_{\mathbf{k}} = \Gamma k^2$ незначительна, тогда как

$$E_{\mathbf{k}}^- \cong \omega_{\mathbf{k}} - |\gamma\rho|^2 / \Gamma_{\mathbf{k}}, \quad (7.7)$$

и спектр фононов существенно перенормируется, понижаясь. Тогда главное влияние на ЭС оказывают ФХС. Это подтверждает интерпретацию линейного хода ЭС с ростом T в РЗМ.

Однако перенормировка фононного спектра (7.7) проявляется в зависимости температуры Дебая от $\gamma(S)$ в форме, представленной в [3].

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Результаты расчётов приводят к сильной зависимости электрических и магнитоэлектрических свойств от локальных моментов

РЗИ. Явно получены их зависимости от спина S иона в разд. 2–4. На рисунке 4 приведена зависимость добавки в ЭС $\Delta R(T, S) \sim S^2$, причём экспериментальные точки хорошо ложатся на теоретическую прямую. Аналогичные зависимости для констант Холла ряда РЗМ подтверждаются экспериментально [1, 6].

Для объективности следует уточнить, что идеи наших теорий [4, 5, 7] и их результатов используют интерпретации опытов группы А. В. Дерягина [8, 10–16] по наблюдению магнитных свойств сплавов РЗМ. Хотя их количественные выводы не всегда убедительны, что отмечают и сами авторы. Не обсуждая использование авторами [10–15] одноэлектронных или полуклассических моделей, даём многоэлектронную теорию. Она позволяет ввести в расчёты обсуждение деталей опытных данных. Некоторые одноэлектронные модели «анизотропии поверхности Ферми» здесь также заменяются прямым расчётом зонных спектров в переходных сплавах на основе МЭОС.

1. Электрические и магнитоэлектрические свойства РЗМ сильно зависят от локальных моментов РЗИ (S, L, J). Этот факт лежит в основе многоэлектронной теории МЭОС.
2. Многоэлектронные элементарные возбуждения (ФХС, фурье-образы МЭОС) эффективно рассеивают зонные электроны. Это приводит к линейной зависимости ЭС от температуры $R(T)$ при $T \geq 10^2$ К в согласии с опытом.
3. Анизотропия тензора $R_{ij}(S)$ для ФМ-состояния РЗМ даётся теорией ФХС. Добавки $\Delta R(T, S) \sim S^2$, что интерпретирует данные опытов [1, 6].
4. Расчёт аномального эффекта Холла как недиагональных членов $R_{xz}(T, S) \sim T$ также интерпретирует опыт [6], в отличие от сложных многоэлектронных теорий.
5. Связь спектров фононов и ФХС сдвигает полосу фононов и температуру Дебая на $\Delta T_D \sim S^2$.
6. Анизотропия электронного спектра (поверхности Ферми) возникает как следствие ковалентных связей и ФХС от S , влияющей на зонный спектр.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Вонсовский, *Магнетизм* (Москва: Наука: 1984).
2. А. И. Мицек, *Металлофиз. новейшие технол.*, **23**, № 9: 1149 (2001).
3. А. И. Мицек, В. Н. Пушкарь, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 4: 433 (2015).
4. А. И. Мицек, В. Н. Пушкарь, *Реальные кристаллы с магнитным порядком* (Киев: Наукова думка: 1978).
5. А. И. Мицек, В. Н. Пушкарь, *Металлофиз. новейшие технол.*, **39**, № 4: 425 (2017).

6. B. Coqblin, *The Electronic Structure of Rare-Earth Metals and Alloys: the Magnetic Heavy Rare-Earths* (London–New York–San Francisco: Academic Press: 1977).
7. А. И. Мицек, *Фазовые переходы в кристаллах с магнитной структурой* (Киев: Наукова думка: 1989).
8. A. V. Andreev, A.V. Deryagin, and S. M. Zadvorkin, *phys. status solidi (a)*, **70**, Iss. 2: K113 (1982).
9. Ю. В. Пустовіт, О. А. Кордюк, *Успехи физ. мет.*, **18**, № 1: 1 (2017).
10. А. В. Дерягин, *УФН*, **120**, № 11: 393 (1976).
11. A. Deryagin, A. Ulyanov, E. Barabanova, and Y. Bashkov, *phys. status solidi (a)*, **23**, Iss. 2: K199 (1974).
12. A. Deryagin, A. Ulyanov, N. Kudrevatykh, E. Barabanova, Y. Bashkov, A. Andreev, and E. Tarasov, *phys. status solidi (a)*, **23**, Iss. 1: K15 (1974).
13. А. В. Дерягин, В. В. Баранов, В. А. Реймер, *ЖЭТФ*, **73**, Вып. 4: 1389 (1977).
14. A. V. Deryagin, E. A. Barabanova, and A. I. Ulyanov, *phys. status solidi (a)*, **31**, Iss. 2, 391 (1975).
15. А. В. Дерягин, А. В. Андреев, *ЖЭТФ*, **71**, вып. 3: 1166 (1976).

REFERENCES

1. S. V. Vonsovsky, *Magnetism* (Moscow: Nauka: 1984) (in Russian).
2. A. I. Mitsek, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **23**, No. 9: 1149 (2001) (in Russian).
3. A. I. Mitsek and V. N. Pushkar, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 4: 433 (2015) (in Russian).
4. A. I. Mitsek and V. N. Pushkar, *Realnye Kristally s Magnitnym Poryadkom* [Real Crystals with Magnetic Order] (Kiev: Naukova Dumka: 1978) (in Russian).
5. A. I. Mitsek and V. N. Pushkar, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 4: 425 (2017) (in Russian).
6. B. Coqblin, *The Electronic Structure of Rare-Earth Metals and Alloys: The Magnetic Heavy Rare-Earths* (London–New York–San Francisco: Academic Press: 1977).
7. А. И. Мицек, *Фазовые Переходы в Кристаллах с Магнитной Структурой* [Phase Transitions in Crystals with Magnetic Order] (Kiev: Naukova Dumka: 1989) (in Russian).
8. A. V. Andreev, A.V. Deryagin, and S. M. Zadvorkin, *phys. status solidi (a)*, **70**, Iss. 2: K113 (1982).
9. Yu. V. Pustovit and O. A. Korduk, *Uspehi Fiz. Met.*, **18**, No. 1: 1 (2017) (in Ukrainian).
10. А. В. Дерягин, *УФН*, **120**, No. 11: 393 (1976) (in Russian).
11. A. Deryagin, A. Ulyanov, E. Barabanova, and Y. Bashkov, *phys. status solidi (a)*, **23**, Iss. 2: K199 (1974).
12. A. Deryagin, A. Ulyanov, N. Kudrevatykh, E. Barabanova, Y. Bashkov, A. Andreev, and E. Tarasov, *phys. status solidi (a)*, **23**, Iss. 1: K15 (1974).
13. А. В. Дерягин, В. В. Баранов, and В. А. Реймер, *ЖЭТФ*, **73**, No. 4: 1389 (1977) (in Russian).

14. A. V. Deryagin, E. A. Barabanova, and A. I. Ulyanov, *phys. status solidi (a)*, **31**, Iss. 2: 391 (1975).
15. A. V. Deryagin and A. V. Andreev, *ZhETF*, **71**, No. 3: 1166 (1976) (in Russian).