объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-83-278

Д.Й.Марваков*, Й.П.Влахов*, А.Л.Куземский

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Направлено в журнал
"Теоретическая и математическая физика"

* Софийский университет, НРБ.

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы большое внимание привлекают исследования тех соединений переходных и редкоземельных элементов, которые принято называть магнитными полупроводниками [1]. Уникальные физические свойства этих веществ интересны с прикладной точки зрения. Для квантовой теории магнетизма эти соединения интересны также и тем, что они описываются модельным гамильтонианом, применимость которого надежно установлена [2].

Главная особенность физики магнитных полупроводников - взаимодействие электронов проводимости с намагниченностью. Магнитный порядок оказывает сильное влияние на электрические свойства этих материалов. Обратное влияние имеет место только тогда, когда концентрация электронов проводимости достаточно велика. С точки зрения чисто магнитных свойств целый ряд магнитных полупроводников является весьма хорошей реализацией модели Гейзенберга, описывающей магнитное / EuO, EuS /, метамагнитное / EuSe / и антиферромагнитное / EuTe / упорядочение.

Теории магнитных полупроводников посвящено большое число работ. Для описания целого ряда свойств особый интерес представляет вычисление перенормированных спектров магнитной и электронной подсистем и соответствующих плотностей состояний. Эта задача рассматривалась в работах [3-14] в рамках метода моментов и в работах [15-17] на основе простейших расцеплений для двухвременных температурных функций Грина. Применялись также метод функционального дифференцирования [18] и диаграммная техника [19].

В настоящей работе перенормированные спектры квазичастичных возбуждений магнитного полупроводника вычисляются с помощью метода неприводимых функций Грина [20,21]. В данном методе используются уравнения движения для двухвременных функций Грина, а процедура расцепления проводится только для приближенного вычисления массового оператора. При этом замкнутая самосогласованная система уравнений получается в пренебрежении перенормировкой вершины в электрон-магнонном и электрон-электронном взаимодействиях. Таким образом, метод неприводимых функций Грина /ФГ/ позволяет более последовательным образом вычислять спектры квазичастичных возбуждений и описывать эффекты электрон-магнонного, электрон-электронного и магнон-магнонного рассеяния в рамках единого самосогласованного подхода.

2. ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ

Общепринятой моделью магнитного полупроводника является s–f (s–d) обменная модель. Почти для всех магнитных полупроводников энергетическая зонная схема совпадает в главных чертах. Для определенности будем иметь в виду халькогениды европия - наиболее типичные представители этой группы веществ. Все они являются двухвалентными соединениями $Eu^{2+}X^{2-}$, где X=0, S, Se, Te. Семь 4f электронов иона Eu^{2+} формируют хорошо определенные локализованные магнитные моменты, расположенные в узлах решетки. Систему локализованных моментов описываем гамильтонианом Гейзенберга

$$H_f = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q})S_{\vec{q}}\cdot S_{-\vec{q}}\,. \qquad /1/$$

Обмен между ближайшими соседями является ферромагнитным $(J_{i,i+1}>0)$ для всех соединений европия /уменьшаясь по величине от окисла к теллуриду/. С другой стороны, есть основания считать, что обмен между соседями, следующими за ближайшими, является антиферромагнитным / $J_{i,i+2}<0$, увеличиваясь от окисла к теллуриду/.

Выше локализованных 4f -уровней находится зона 5d -электронов, отделенная щелью /величина которой примерно 1 эВ у окисла и 2 эВ у теллурида/. Электронные состояния, принадлежащие этой зоне, носят резко выраженный сильносвязанный характер и образуют вторую подсистему магнитного полупроводника с гамильтонианом

$$H_e = H_d + H_c,$$

где

$$H_d = \sum_{ij\sigma} T_{ij}\, a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} = \sum_{\vec{k}\sigma}\epsilon(\vec{k})a^{+}_{\vec{k}\sigma}a_{\vec{k}\sigma}, \qquad /2/$$

$$H_c = \frac{U}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}\sigma} a^{+}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}\, a_{\vec{k}\sigma}\, a^{+}_{\vec{p}-\vec{q},-\sigma}\, a_{\vec{p},-\sigma}\,. \qquad /3/$$

Здесь $\epsilon(\vec{k}) = N^{-1}\sum_{ij} T_{ij}\exp[-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)]$ - зонная энергия, а U- интеграл кулоновской корреляции. Иногда для упрощения эти электроны рассматривают как свободные s-электроны проводимости. Однако в общем случае это не всегда справедливо. Похожая ситуация имеет место в тяжелых редкоземельных металлах типа гадолиния, где учет d-зонного характера "электронов проводимости" имеет существенное значение/22,23/.

В случае чистого полупроводника при низких температурах зона "электронов проводимости" пуста. Электронный спектр описывает возбуждение одного электрона в пустую зону. Кулоновский член /3/

при этом не очень существен. Частичное заполнение зоны /что достигается, например, легированием EuO ионами Gd^{3+} / приводит к увеличению роли кулоновской корреляции.

Две описанные подсистемы, т.е. локализованные спины и "электроны проводимости" взаимодействуют посредством контактного d-f обмена/1,2/

$$H_{df} = -I\sum_{i\sigma\sigma'}(\sigma\cdot S_i)_{\sigma\sigma'}\cdot a_{i\sigma'}a_{i\sigma'} =$$

$$= -\frac{I}{\sqrt{N}}\sum_{kq}\{S^{+}_{-q}a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q\uparrow} + S^{-}_{-q}a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q\downarrow} + \qquad /4/$$

$$+ S^{z}(a^{+}_{k\uparrow}a_{k+q\uparrow} - a^{+}_{k\downarrow}a_{k+q\downarrow})\}\,.$$

Оператор /4/ описывает РККИ взаимодействие локализованных спинов 4f -оболочки со спиновой плотностью "электронов проводимости". Для простоты мы рассматриваем локальный интеграл РККИ обмена I. В общем случае интеграл $I(\vec{k}, \vec{k}+\vec{q})$ существенно зависит от квазиимпульса/24/. Обобщение на нелокальный случай можно произвести непосредственно.

Полный гамильтониан магнитного полупроводника представляется в виде суммы

$$H = H_f + H_d + H_{d\text{-}f} + H_c. \qquad /5/$$

В следующих разделах вычислим спектр модели с гамильтонианом /5/.

3. ФУНКЦИИ ГРИНА ЭЛЕКТРОНОВ

Рассмотрим уравнения движения для электронных функций Грина/25,26/

$$G_{k\sigma}(t-t') = -i\,\Theta(t-t')\langle[a_{k\sigma}(t), a^{+}_{k\sigma}(t')]_{-}\rangle\,. \qquad /6/$$

Дифференцируя /6/ по времени t с учетом гамильтониана /5/, для фурье-компонент ФГ получим

$$\omega\langle\langle a_{k\sigma}|a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega} = 1 + \epsilon(k)\langle\langle a_{k\sigma}|a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega} +$$

$$+ \frac{U}{N}\sum_{pq}\langle\langle a^{+}_{p+q,-\sigma}a_{p,-\sigma}a_{k+q,\sigma}|a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle - \frac{I}{\sqrt{N}}\sum_{q}\{\langle\langle S^{-\sigma}_{-q}a_{k+q,-\sigma}|a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega} +$$

$$+ z_{\sigma}\langle\langle S^{z}_{-q}a_{k+q,\sigma}|a^{+}_{k\sigma}\rangle\rangle_{\omega}\}, \qquad /7/$$

где

$$S^{-\sigma}_{-q} = \begin{cases} S^{-}_{-q} & \text{если } \sigma = + \text{ или} \uparrow \\ S^{+}_{-q} & \text{если } \sigma = - \text{ или} \downarrow \end{cases}$$

$$z_\sigma = \begin{cases} 1, & \text{если } \sigma = + \\ -1, & \text{если } \sigma = - \end{cases} .$$

Чтобы отделить перенормировку в приближении среднего поля Хартри-Фока от перенормировки в высших порядках, обусловленных неупругим рассеянием, введем, следуя [20-23], неприводимые ФГ. Для этого представим ФГ в правой части /7/ в виде

$$\langle\langle S^z_{-q}\, a_{k+q,\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle = \langle\langle (S^z_{-q}\, a_{k+q,\sigma})^{ir} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle + \qquad /8/$$

$$+ \delta_{q,0} \langle S^z_{-q} \rangle \langle\langle a_{k+q,\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle ,$$

$$\langle\langle a^+_{p+q,-\sigma} a_{p,-\sigma}\, a_{k+q,\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle = \langle\langle (a^+_{p+q,-\sigma} a_{p,-\sigma} a_{k+q,\sigma})^{ir} | a_{k\sigma} \rangle\rangle + \qquad /9/$$

$$+ \delta_{q,0} \langle a^+_{p+q,-\sigma} a_{p,-\sigma} \rangle \langle\langle a_{k+q,\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle .$$

Выбор неприводимых ФГ однозначно определяется из условий

$$\langle [(S^z_{-q}\, a_{k+q,\sigma})^{ir}, a^+_{k\sigma}]_+ \rangle = 0;$$

$$\langle [(a^+_{p+q,-\sigma}\, a_{p,-\sigma}\, a_{k+q,\sigma})^{ir}, a^+_{k\sigma}]_+ \rangle = 0,$$

которые приводят к тому, что неоднородные члены в уравнениях для неприводимых ФГ обращаются в нуль.

С учетом /8/, /9/ получим из /7/

$$(\omega - \epsilon^\circ(k\sigma)) \langle\langle a_{k\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle_\omega =$$

$$= 1 + \frac{U}{N} \sum_{pq} \langle\langle (a^+_{p+q,-\sigma}\, a_{p,-\sigma} a_{k+q,\sigma})^{ir} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle - \qquad /10/$$

$$- \frac{I}{\sqrt{N}} \sum_q \{ \langle\langle S^{-\sigma}_{-q}\, a_{k+q,\sigma} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle + z_\sigma \langle\langle (S^z_{-q}\, a_{k+q,\sigma})^{ir} | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle \} ,$$

где

$$\epsilon^\circ(k\sigma) = \epsilon(k) - z_{+\sigma} \frac{I}{\sqrt{N}} \langle S^z \rangle + \frac{U}{N} N_{-\sigma}$$

$$N_{-\sigma} = \sum_p \langle n_{p-\sigma} \rangle .$$

Для вычисления неприводимых ФГ в /10/ воспользуемся приемом дифференцирования по второму времени t′. Для фурье-компонент ФГ получаем уравнение движения /для трех ФГ в /10//

$$(\omega - \epsilon^\circ(k\sigma)) \langle\langle A | a^+_{k\sigma} \rangle\rangle = \frac{U}{N} \sum_{p'q'} \langle\langle A | (a^+_{p'+q',-\sigma}\, a_{p',-\sigma}\, a^+_{k-q',\sigma})^{ir} \rangle\rangle - \qquad /11/$$

$$- \frac{I}{\sqrt{N}} \sum_{q'} \{ \langle\langle A | S^\sigma_{q'}, a^+_{k+q',-\sigma} \rangle\rangle + z_\sigma \langle\langle A | (S^z_{q'}, a^+_{k+q',\sigma})^{ir} \rangle\rangle \} ,$$

$$A = \begin{cases} (a^+_{p+q,-\sigma} a_{p,-\sigma} a_{k+q,\sigma})^{ir} \\ (S^{-\sigma}_{-q}\, a_{k+q,-\sigma}) \\ (S^z_{-q}\, a_{k+q,\sigma}) \end{cases} .$$

Система уравнений /10/ и /11/ с помощью введения нулевой ФГ

$$G^\circ_{k\sigma} = (\omega - \epsilon^\circ(k\sigma))^{-1} \qquad /12/$$

запишется в виде

$$G_{k\sigma}(\omega) = G^\circ_{k\sigma} + G^\circ_{k\sigma}(\omega) P_{k\sigma}(\omega) G^\circ_{k\sigma}(\omega) . \qquad /13/$$

Если ввести массовый оператор $M_{k\sigma}(\omega)$, который связан с матрицей рассеяния уравнением

$$P_{k\sigma}(\omega) = M_{k\sigma}(\omega) + M_{k\sigma}(\omega) G^\circ_{k\sigma}(\omega) P_{k\sigma}(\omega) , \qquad /14/$$

то /13/ перепишется в виде уравнения Дайсона

$$G_{k\sigma}(\omega) = G^\circ_{k\sigma}(\omega) + G^\circ_{k\sigma}(\omega) M_{k\sigma}(\omega) G_{k\sigma}(\omega) . \qquad /15/$$

Здесь $M_{k\sigma}(\omega)$ имеет вид $M_{k\sigma}(\omega) = M^1_{k\sigma}(\omega) + M^2_{k\sigma}(\omega)$:

$$M^1_{k\sigma}(\omega) =$$

$$= \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \sum_{p'q'} \langle\langle (a^+_{p+q,-\sigma}\, a_{p,-\sigma}\, a_{k+q,\sigma})^{ir} | (a^+_{p'+q',-\sigma}\, a_{p',-\sigma}\, a^+_{k-q',\sigma})^{ir} \rangle\rangle^P$$

$$
M^2_{k\sigma} = \frac{I^2}{N} \sum_{qq'} \{ \langle\langle S^{-\sigma}_{-q} a_{k+q,-\sigma} | S^{\sigma}_{q'} a^+_{k+q',-\sigma} \rangle\rangle + \\
+ \langle\langle (S^z_{-q} a_{k+q,\sigma})^{ir} | (S^z_{q'} a^+_{k+q',\sigma})^{ir} \rangle\rangle^P \}. \qquad /16/
$$

Из уравнения /14/ следует, что массовый оператор /16/ является связанной /или "собственной"/ частью оператора рассеяния P, в которой не содержится одиночных нулевых ФГ. Представление /16/ является точным.

Перейдем к получению замкнутой самосогласованной системы уравнений для массового оператора /16/. Для этого необходимо найти приближенное выражение его через ФГ $G_{k\sigma}$. Рассмотрим сначала кулоновскую часть

$$
M_c = M^1_{k\sigma}(\omega). \qquad /17/
$$

Выражение /17/ было получено ранее в работе [21] при исследовании электронной корреляции в модели Хаббарда. Запишем спектральное представление для /17/ в виде

$$
M^1_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \int \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3} \times \\
\times \{ n(\omega_1)[1 - n(\omega_2) - n(\omega_3)] + n(\omega_2) n(\omega_3) \} \times \qquad /18/ \\
\times g_{p+q,-\sigma}(\omega_1) g_{k+p,\sigma}(\omega_2) g_{p,-\sigma}(\omega_3),
$$

где

$$
g_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\epsilon). \qquad /19/
$$

Выбирая то или иное начальное приближение для функции $g_{k\sigma}(\omega)$ в правой части /18/, мы можем приближенно вычислить $M^1_{k\sigma}(\omega)$. Таким образом, самосогласованная система уравнений для электрон-электронного рассеяния найдена.

Рассмотрим теперь спин-электронное рассеяние. Удобно переписать $M^2_{k\sigma}(\omega)$ в виде

$$
M^2_{k\sigma}(\omega) = M^{\alpha\beta}_{k\sigma}(\omega) = \frac{I^2}{N} \sum_{qq'} \langle\langle S^{\alpha}_{-q} a_{k+q,\sigma} | S^{\beta}_{q'} a^+_{k+q',\sigma} \rangle\rangle^{(ir,p)} = \\
= \frac{I^2}{N} \sum_{qq'} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} + 1) \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega' t} \langle S^{\beta}_{q'} a^+_{k+q',\sigma} S^{\alpha}_{-q}(t) a_{k+q,\sigma}(t) \rangle^{(ir)}. \qquad /20/
$$

Если пренебречь перенормировкой вершины, а именно корреляцией в распространении электронов и магнитных возбуждений, то можно провести следующее расцепление:

$$
\langle S^{\beta}_{q'} a^+_{k+q,\sigma} S^{\alpha}_{-q}(t) a_{k+q,\sigma}(t) \rangle^{(ir,p)} \approx \\
\approx \langle S^{\beta}_{q'} S^{\alpha}_{-q}(t) \rangle \langle a^+_{k+q',\sigma} a_{k+q,\sigma}(t) \rangle. \qquad /21/
$$

Заметим, что, согласно определению /8/, спаривание операторов, относящихся к одному моменту времени, дает нулевой вклад, так как эти средние уже выделены в нулевую функцию Грина. Подставляя /21/ в /20/ и используя спектральные представления для корреляционных функций спинов и электронов, получаем аналитическое выражение для массового оператора $M^2_{k\sigma}(\omega)$:

$$
M^2_{k\sigma}(\omega) = \frac{I^2}{N} \sum_q \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} + 1) \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega' t} \times \\
\times \Big[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1 t} K^{\beta\alpha}_q(\omega_1) \Big] \Big[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 e^{-i\omega_2 t} A_{k+q,\sigma}(\omega_2) \Big] = \qquad /22/ \\
= \frac{I^2}{N} \sum_q{}' \iint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \frac{1 + \nu(\omega_1) - n(\omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2} m^{\alpha\beta}_q(\omega_1) g_{k+q,\sigma}(\omega_2),
$$

где были введены обозначения

$$
m^{\alpha\beta}_q(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle S^{\alpha}_{-q} | S^{\beta}_q \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi} (e^{\beta\omega} - 1) K^{\alpha\beta}_q(\omega),
$$

$$
K^{\beta\alpha}_q(t) = \langle S^{\beta}_q S^{\alpha}_{-q}(t) \rangle; \quad g_{k\sigma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} (e^{\beta\omega} + 1) A_{k\sigma}(\omega).
$$

Функции $\nu(\omega)$ и $n(\omega)$ - бозевская и фермиевская функции распределения. Уравнение /22/ является приближенным самосогласованным выражением для массового оператора электрон-магнонного рассеяния.

Удобно переписать /22/ в виде

$$
M^2_{k\sigma}(\omega) = \frac{I^2}{N} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \frac{1 + \nu(\omega_1) - n(\omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \times \qquad /23/ \\
\times \{ m^{\sigma_1 - \sigma}_q(\omega_1) g_{k+q,-\sigma}(\omega_2) + m^{zz}_q(\omega_1) g_{k+p,\sigma}(\omega_2) \}.
$$

Перейдем теперь к вычислению массовых операторов /18/ и /23/. Поскольку самосогласованная схема расчета не связана заранее с каким-либо начальным приближением, можно использовать для итерации те приближения, которые удобны. Воспользуемся в качестве первого итерационного приближения для электронной спектральной плотности простейшим однополюсным выражением

$$g_{k\sigma}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon(k\sigma)).$$

Тогда вместо /18/ и /23/ получим

$$M^1_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \frac{n_{p+q,-\sigma}[1 - n_{k+p,\bar{\sigma}}\, n_{q,-\sigma}] + n_{k+p,\sigma}\, n_{q,-\sigma}}{\omega - \epsilon(p+q,\sigma) - \epsilon(k+p,\sigma) + \epsilon(q,-\sigma)} = \frac{U^2}{N^2} \sum_{pq} \frac{N_{kpq}}{\omega - \Omega_{kpq}}, \qquad /24/$$

$$M^2_{k\sigma}(\omega) = \frac{I^2}{N} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \left\{ \frac{1 + \nu(\omega_1) - n(\epsilon(k+q,-\sigma))}{\omega - \omega_1 - \epsilon(k+q,-\sigma)}\, m_q^{\sigma,-\sigma}(\omega_1) + \frac{1 + \nu(\omega_1) - n(\epsilon(k+q,\sigma))}{\omega - \omega_1 - \epsilon(k+q,\sigma)}\, m_q^{zz}(\omega_1) \right\}. \qquad /25/$$

Выражение /24/ было найдено в [21]. Оно описывает электрон-электронное рассеяние в парамагнитном состоянии электронной подсистемы. Выражение /25/ содержит ряд результатов, содержащихся в работах [2,3,17-19]. Для того, чтобы получить результаты работы [19], нужно пренебречь флуктуациями продольных компонент локализованных спинов $m_q^{zz}(\omega) \approx 0$, что оправдано при низких температурах. Далее положим:

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle S^{-\sigma}_{-\vec{q}} \mid S^{\sigma}_{\vec{q}} \rangle\rangle_\omega = \frac{2\langle S^z \rangle}{\sqrt{N}}\, \delta(\omega + \sigma E(\vec{q})),$$

где $E(q)$ - энергия магнонов. В результате найдем из /25/, что

$$M^2_{k+}(\omega) = \frac{2\langle S^z\rangle I^2}{N^{3/2}} \sum_q \frac{n(\epsilon(k+q,-)) - \nu(E(q))}{\omega - \epsilon(k+q,-) + E(q)};$$

$$M^2_{k-}(\omega) = \frac{2\langle S^z\rangle I^2}{N^{3/2}} \sum_q \frac{1 - n(\epsilon(k+q,+)) + \nu(E(q))}{\omega - \epsilon(k+q,+) - E(q)}. \qquad /26/$$

Выражения /26/ совпадают с полученными в /18/ на основе диаграммной техники. В статическом пределе для $m_q^{\alpha\beta}(\omega) \approx m_q^{\alpha\beta}(0)$ сразу получаем из /25/ результат

$$M^2_{k\sigma}(\omega) = \frac{I^2}{N} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} [K_q^{\sigma,-\sigma}\, g_{k+q,-\sigma}(\omega') + K_q^{zz}\, g_{k+q,\sigma}(\omega')], \qquad /27/$$

найденный в [18] с помощью метода функционального дифференцирования. Результаты работы [17] получаются из статического предела /27/ как частный случай. В работе [8] используется гауссовское приближение для спектральной плотности электронов, а в работах [5,6] - двухполюсное приближение. Применимость двухполюсного приближения оправдана в атомном пределе, который мы здесь не рассматриваем. Метод неприводимых ФГ позволяет получать двухполюсные решения в случае сильной корреляции для модели Хаббарда, которые содержат решения по методу моментов как частный случай [21]. Решение в приближении когерентного потенциала [7] легко получить из /15/.

Перенормированная энергия электронов определяется из уравнения

$$\epsilon(\vec{k}\sigma) - \epsilon^0(\vec{k}\sigma) - M_{\vec{k}\sigma}(\epsilon(\vec{k}\sigma)) = 0.$$

При этом затухание квазичастичных электронных возбуждений имеет вид

$$\Gamma_{k\sigma}(\omega) = \frac{1}{\tau} = -\operatorname{Im} M_{k\sigma}(\omega + i\epsilon). \qquad /28/$$

Определим плотность квазичастичных состояний в виде

$$N^e(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{k\sigma} \operatorname{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\epsilon).$$

Зная одночастичную плотность состояний, найдем электронную теплоемкость

$$c_e = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, n(\omega)\, \omega N^e(\omega), \qquad /29/$$

откуда в пределе низких температур получим

$$c_e = \gamma T = T\left(\frac{1}{\pi^2} k_B^2 N^e(\epsilon_f) + \frac{1}{6}\pi^2 k_B^2 T \frac{\partial N^e(\epsilon_+)}{\partial T} + \ldots\right). \qquad /30/$$

Для электронов, далеких от дна зоны, можно определить эффективную массу

$$m^* = k \Big/ \frac{\partial \epsilon(k\sigma)}{\partial k} \qquad /31/$$

и подвижность электронов вблизи уровня Ферми

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} = \frac{e}{m^*}\,\frac{1}{\Gamma_{k\sigma}(\epsilon(k\sigma))}\left(1 - \frac{\partial\,\mathrm{Re}\,M_{k\sigma}(\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=\epsilon(k\sigma)}\right), \qquad /32/$$

которые обобщают результаты работ[2,3,5,15-19].

4. ФУНКЦИИ ГРИНА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СПИНОВ

Перейдем теперь к вычислению спектра возбуждений и затухания ФГ локализованных спинов[25,26]

$$R_k(t-t') = -i\Theta(t-t')\langle[S_k^+(t), S_{-k}^-(t')]_-\rangle . \qquad /33/$$

Вычисление /33/ с помощью метода неприводимых ФГ было проведено в[27] для модели Гейзенберга и в[22,23] для s–f обменной модели. Как показано в[22,23], полная самосогласованная схема расчета требует вычисления матричной ФГ

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} \langle\langle S_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle & \langle\langle S_q^+ | \sigma_{-q}^- \rangle\rangle \\ \langle\langle \sigma_q^+ | S_{-q}^- \rangle\rangle & \langle\langle \sigma_q^+ | \sigma_{-q}^- \rangle\rangle \end{bmatrix} , \qquad /34/$$

где

$$\sigma^-_{-\vec q} = \sum_{\vec k} a^+_{\vec k+\vec q\downarrow}\, a_{\vec k\uparrow} ;$$

Поскольку такой расчет является весьма громоздким, в настоящей работе мы ограничимся более простым, хотя и не вполне последовательным способом самосогласованного вычисления /33/. Расчет ФГ /34/ для магнитного полупроводника с гамильтонианом /5/ будет рассмотрен отдельно.

Дифференцируя /33/ по первому времени и вводя неприводимые ФГ как в[27,22,23], получим для фурье-компонент $R_k(E)$ следующее уравнение:

$$(E - E^\circ(k))R_k(E) = \frac{2\langle S^z\rangle}{\sqrt N} + \frac{1}{\sqrt N}\sum_q J(q)\langle\langle B^{ir}_{k-q,q} | S^-_{-k}\rangle\rangle_\omega + \qquad /35/$$
$$+ \frac{I}{N}\sum_{pq}\{\langle\langle (S^+_{k-q}(a^+_{p\uparrow}a_{p+q\uparrow} - a^+_{p\downarrow}a_{p+q\downarrow}))^{ir} | S^-_{-k}\rangle\rangle - \langle\langle 2S^z_{k-q}a^+_{p\uparrow}a_{p+q\downarrow} | S^-_{-k}\rangle\rangle\} .$$

Здесь

$$B^{ir}_{k-q,q} = (S^+_{k-q}S^z_q - S^+_q S^z_{k-q})^{ir} - (A_q - A_{k-q})S^+_k . \qquad /36/$$

Коэффициенты A_q определяются из условия

$$\langle[B^{ir}_{k-q,q}, S^-_{-k}]\rangle = 0; \qquad A_q = \frac{2K^{zz}_q + K^{-+}_q}{\langle 2S^z\rangle} . \qquad /37/$$

Величина $E^\circ(k)$ представляет собой энергию магнитных возбуждений в приближении среднего поля

$$E^\circ(\vec k) = \frac{\langle S^z\rangle}{\sqrt N}(J(0) - J(\vec k)) + \frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec q}(J(\vec q) - J(\vec k - \vec q))\frac{2K^{zz}_{\vec q} + K^{-+}_{\vec q}}{2\langle S^z\rangle} +$$
$$+ \frac{I}{N}(N\uparrow - N\downarrow) . \qquad /38/$$

Дифференцируя ФГ в правой части /35/ по второму времени и вводя неприводимые ФГ и нулевую ФГ

$$R^\circ_{\vec k}(E) = \frac{2\langle S^z\rangle}{\sqrt N}(E - E^\circ(\vec k))^{-1} , \qquad /39/$$

получим в итоге уравнение Дайсона в виде

$$R = R^\circ + R^\circ \Pi R . \qquad /40/$$

Массовый оператор Π_k равен

$$\Pi_k(E) = \left(\frac{2\langle S^z\rangle}{\sqrt N}\right)^2 \Pi_k(E) = \frac{1}{N}\sum_{qq'} J(q)J(q')\langle\langle B^{ir}_{k-q,q} | B^{+\,ir}_{-(k-q'),-q'}\rangle\rangle^p +$$
$$+ \frac{I^2}{N^2}\sum_{pp'}\sum_{qq'}\{\langle\langle S^+_{k-q}(a^+_{p\uparrow}a_{p+q\uparrow} -$$
$$- a^+_{p\downarrow}a_{p+q\downarrow}))^{ir} | (S^-_{-(k+q')}(a^+_{p'\uparrow}a_{p'+q'\uparrow} - a^+_{p'\downarrow}a_{p'+q'\downarrow}))^{ir}\rangle\rangle^p -$$
$$- 4\langle\langle S^z_{k-q}a^+_{p\uparrow}a_{p+q\downarrow} | S^z_{-(k+q')}a^+_{p'\downarrow}a_{p'+q'\uparrow}\rangle\rangle^{ir,p} . \qquad /41/$$

Таким образом, решение уравнения /40/ примет вид

$$R_k(E) = \frac{2\langle S^z\rangle}{\sqrt N}\left(E - E^\circ(k) - \frac{2\langle S^z\rangle}{\sqrt N}\Pi_k(E)\right)^{-1} . \qquad /42/$$

Для получения замкнутой самосогласованной системы уравнений проведем расцепления, аналогичные тем, которые проводились в предыдущем разделе, т.е. будем пренебрегать вершинными поправками в электрон-магнонном и магнон-магнонном взаимодействиях. В результате получим из /41/

$$\Pi_k(E) = \Pi_k^{mm}(E) + \Pi_k^{em1}(E) + \Pi_k^{em2}(E), \qquad /43/$$

где

$$\Pi_k^{mm} = \frac{1}{N} \sum_q (J(q) - J(k-q))^2 \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 \frac{1 + \nu(E_1) + \nu(E_2)}{E - E_1 - E_2} m_{k-q}^{+-}(E_1) m_q^{zz}(E_2), \qquad /44/$$

$$\Pi_k^{em1} = \frac{I^2}{N^2} \sum_{pq\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 dE_3 \frac{\nu(E_1)[n(E_2) - n(E_3)] + n(E_2)[1 - n(E_3)]}{E - E_1 + E_2 - E_3} \times$$

$$\times m_{k-q}^{+-}(E_1) g_{p\sigma}(E_2) g_{p+q,\sigma}(E_3), \qquad /45/$$

$$\Pi_k^{em2} = -\frac{4I^2}{N^2} \sum_{pq} \int dE_1 dE_2 [\frac{\nu(E_3)[n(E_1) - n(E_2)] + n(E_1)[1 - n(E_2)]}{E + E_1 - E_2 - E_3} \times$$

$$\times \tilde{m}_{k-q}^{zz}(E_3) g_{p\uparrow}(E_1) g_{p+q\downarrow}(E_2). \qquad /46/$$

Здесь при расцеплении последнего члена в /41/ мы полагаем, что $S_q^z = (S_q^z)^{ir} + \langle S^z \rangle \Delta(q)$. Уравнения /44/-/46/ являются приближенными самосогласованными уравнениями для массового оператора ФГ локализованных спинов. Для сравнения с результатом работы [19] рассмотрим выражение /43/ и воспользуемся первым итерационным приближением в виде

$$g_{k\sigma}(E) = \delta(E - \epsilon^\circ(k\sigma)),$$

$$m_q^{+-}(E) = \delta(E - E^\circ(q)). \qquad /47/$$

В результате получим

$$\frac{2\langle S^z \rangle}{\sqrt{N}} \Pi_k^{mm} = \frac{1}{N} \sum_q (J(q) - J(k-q))^2 \frac{K_q^{zz}}{E - E^\circ(k-q)}, \qquad /48/$$

$$\frac{2\langle S^z \rangle}{\sqrt{N}} \Pi_k^{em1} =$$

$$= \frac{I^2}{N^2} \sum_{pq\sigma} \frac{\nu(E^\circ(k-q))[n(\epsilon^\circ(p\sigma)) - n(\epsilon^\circ(p+q,\sigma))] + n(\epsilon^\circ(p\sigma))[1 - n(\epsilon^\circ(p+q,\sigma))]}{E - E^\circ(k-q) + \epsilon^\circ(p\sigma) - \epsilon^\circ(p+q,\sigma)}, \qquad /49/$$

$$\frac{2\langle S^z \rangle}{\sqrt{N}} \Pi_k^{em2} = -\frac{2I^2}{N^2} \sum_k \tilde{K}_{k-q}^{zz} \frac{n(\epsilon^\circ(p\uparrow)) - n(\epsilon^\circ(p+q\downarrow))}{E + \epsilon^\circ(p\uparrow) - \epsilon^\circ(p+q\downarrow)}. \qquad /50/$$

Здесь мы использовали статическое приближение $K_q^{zz}(t) \approx K_q^{zz}(0) = K_q^{zz}$. В работе [19] было найдено выражение /50/.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

В работе изучено взаимодействие электронов проводимости с намагниченностью ферромагнитного полупроводника. Детально рассмотрены процессы неупругого электрон-магнонного, магнон-магнонного и электрон-электронного рассеяния и их влияние на наблюдаемые характеристики, такие, как эффективная масса, подвижность и теплоемкость. Спектр и затухание квазичастичных возбуждений с учетом взаимодействия электронной и магнитной подсистем вычислялись на основе метода неприводимых ФГ. Как для электронного, так и для магнонного массового оператора получены замкнутые самосогласованные системы уравнений в пренебрежении перенормировкой вершины в электрон-магнонном взаимодействии. Полученные системы уравнений решались итерационным способом. В первом итерационном приближении получены явные аналитические выражения для массовых операторов, и на их основе - выражения для квазичастичных спектров и затуханий, которые обобщают результаты работ [10-19]. Как уже говорилось выше, вычисление массового оператора ФГ локализованных спинов не вполне последовательно и должно рассматриваться как первое приближение, позволяющее наиболее просто получить требуемый результат. Тем не менее, даже этот упрощенный вариант самосогласованного метода неприводимых ФГ позволяет более полно описывать процессы неупругого рассеяния квазичастиц в магнитном полупроводнике, чем развитый недавно подход [10], основанный на методе моментов, в котором, по-существу, воспроизведен результат работы [19]. Более точное рассмотрение самосогласованного подхода для ФГ локализованных спинов требует отдельного рассмотрения. Развитая теория допускает также возможность обобщения для случая антиферромагнитного полупроводника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nolting W. phys.stat.sol., 1979, vol.(b)96, No.1, p.11-54.
2. Krisement O. J.Magn.Magnet.Mat., 1976, vol.3, No.1, p.7-17.
3. Nolting W. phys.stat.sol., 1977, vol.(b)79, No.3, p.573-584.
4. Matlak M., Nolting W. phys.stat.sol., 1978, vol.(b)88, No.1, p.231-240.
5. Nolting W. J.Phys.C: Solid State Phys., 1978, vol.11, No.10, p.1427-1439.

6. Nolting W. J.Phys.C: Solid State Phys., 1979, vol.12, No.16, p.3033-3046.
7. Nolting W., Oles A.M. J.Magn.Magnet.Mat., 1980, vol.20, No.2, p.195-200.
8. Nolting W., Oles A.M. J.Phys.C: Solid State Phys., 1980, vol.13, No.19, p.2295-2310.
9. Nolting W., Oles A.M. Phys.Rev., 1980, vol.822, No.12, p.6184-6195.
10. Nolting W., Oles A.M. Z.Phys., 1981, vol.B43, No.1,p.97-45.
11. Nolting W., Oles A.M. Phys.Rev., 1981, vol.B23, No.8, p.4122-4128.
12. Barvik I., Capek V. J.Magn.Magnet.Mat., 1979, vol.14, No.1, p.87-93.
13. Capek V., Chvosta P. phys.stat.sol., 1980, vol.(b)97, p.221-228.
14. Capek V. phys.stat.sol., 1981, vol.(b)103, No.1, p.107-113.
15. Küber J., Vigren D.T. Phys.Rev., 1975, vol.B11, No.11, p.4440-4449.
16. Capek V. Czech.J.Phys., 1977, vol.B27, No.5, p.686-694.
17. Kuivalainen P. et al. phys.stat.sol., 1979, vol.(b)94, No.1, p.181-190.
18. Sinkkonen J. Phys.Rev., 1979, vol.B19, No.12, p.6407-6217.
19. Woolsey R.B., White R.M. Phys.Rev., 1970, vol.B1, No.11, p.4474-4486.
20. Плакида Н.М. ТМФ, 1970, т.5, № 1, с.147-153.
21. Куземский А.Л. ТМФ, 1978, т.36, № 2, с.208-223.
22. Куземский А.Л., Кристоф Ф., Фрауенхайм Т. ОИЯИ, Р17-81-561, Дубна, 1981.
23. Christoph V., Kuzemsky A.L., Frauenhaim T. In: Crystalline Electric Field Effects in f-Electron Magnetism. (Ed. by R.P.Guertin, W.Suski, Z.Zolnierek). Plenum Press, N.Y., 1982, p.219-225.
24. Freeman A.I. In: Magnetic Properties of Rare Earth Metals. (Ed. by R.J.Elliott). Plenum Press, N.Y., 1972, chap.6.
25. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, т.126, сер.математика, физика, № 1, с.53-56.
26. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. "Наука", М., 1975.
27. Плакида Н.М. Phys.Lett., 1973, vol.43A, No.6, p.481-482.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 апреля 1983 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Марваков Д.Й., Влахов Й.П., Куземский А.Л. Р17-83-278

Самосогласованная теория магнитных полупроводников

Развита самосогласованная теория магнитных полупроводников в рамках метода неприводимых функций Грина. Получены самосогласованные выражения для массовых операторов электронной и спиновой ФГ в пренебрежении вершинными поправками. Учитывалось электрон-электронное, электрон-магнонное и магнон-магнонное рассеяние. Найдены квазичастичные спектры и затухания, а также подвижность электронов и электронная теплоемкость.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Marvakov D.J., Vlakhov J.P., Kuzemsky A.L. P17-83-278

A Selfconsistent Theory of Magnetic Semiconductors

A selfconsistent theory of magnetic semiconductors within irreducible Green function method has been developed. The selfconsistent expressions for the electron and spin mass-operators has been obtained neglecting the vertex corrections. The electron-magnon, electron-electron and magnon-magnon scattering corrections are taken into account. The quasi-particle spectrum and damping as well as electron mobility and specific heat has been calculated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.