Физика низких температур, 1996, т. 22, № 10, с. 1144–1146

Спиновые флуктуации и низкотемпературные особенности теплового расширения моносилицида железа

А. Г. Волков, С. В. Кортов, А. А. Повзнер

Уральский государственный технический университет, Россия, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

Статья поступила в редакцию 19 декабря 1995 г., после переработки 6 мая 1996 г.

Проведены низкотемпературные измерения термического коэффициента линейного расширения сильного парамагнетика FeSi. Полученные результаты обсуждаются в рамках спин-флуктуационной теории. Показано, что электронная часть термического коэффициента линейного расширения отрицательна в области температур ниже температуры фазового перехода полупроводник—металл, в металлической фазе она становится положительной. Эта особенность термического коэффициента линейного расширения FeSi объясняется перенормировкой спиновыми флуктуациями плотности состояния d-электронов.

Проведено низькотемпературне вимірювання термічного коефіцієнта лінійного розширення сильного парамагнетика FeSi. Одержані результати обговорюються в рамках спін-флуктуаційної теорії. Показано, що електронна частина термічного коефіцієнта лінійного розширення негативна в області температур нижче температури фазового переходу напівпровідник—метал, в металевій фазі вона стає позитивною. Ця особливість термічного коефіцієнта лінійного розширення FeSi пояснюється перенормуванням спіновими флуктуаціями густини станів d-електронів.

1. В сильно парамагнитном узкощелевом полупроводнике FeSi с шириной запрещенной зоны $\varepsilon_g = 0{,}12$ эВ повышение температуры приводит к электронному превращению, обусловленному исчезновением энергетической щели [1,2]. В работах [2,4] показано, что этот эффект связан с расщеплением энергетического спектра d-электронов спиновыми флуктуациями (СФ):

$$\varepsilon_g(T) = \varepsilon_g(0) - 2Um(T) \ , \qquad (1)$$

где m — амплитуда СФ; U — параметр внутриатомного кулоновского взаимодействия электронов. Кроме того, спин-флуктуационная перенормировка энергий d-электронов ($\varepsilon \to \varepsilon \pm Um$) служит причиной наблюдаемых при электронном превращении аномалий температурных зависимостей магнитной восприимчивости, электронной теплоемкости и электропроводности [3–4].

В настоящей работе представлены результаты теоретического и экспериментального исследований низкотемпературных аномалий коэффициента теплового расширения (КТР) FeSi.

2. Исследовалась температурная зависимость КТР моно- и поликристаллических образцов моносилицида железа в интервале температур 2,5–300 К с использованием прецизионного емкостного дилатометра, описанного в [5]. Погрешность определения коэффициента теплового расширения α составляла $(0{,}2–0{,}3)\cdot 10^{-7}\,\mathrm{K}^{-1}$ при $T < 100$ К, вблизи комнатной температуры достигала значений $0{,}5\cdot 10^{-7}\,\mathrm{K}^{-1}$. Температурный шаг измерений при $T < 50$ К составлял 1 К, а при более высоких температурах 5 К. Полученные экспериментальные данные (значительно превышающие погрешность измерений) представлены в таблице.

Таблица

Температурные зависимости КТР FeSi

T, К	$\alpha\cdot 10^6$, K^{-1}	T, К	$\alpha\cdot 10^6$, K^{-1}	T, К	$\alpha\cdot 10^6$, K^{-1}
14,51	0,079	62,49	1,522	128,70	8,207
17,20	0,084	65,66	1,692	128,70	8,207
20,52	0,106	67,05	1,884	138,87	9,265
22,38	0,121	71,25	2,166	138,87	9,265
24,36	0,125	76,57	2,681	149,51	10,181
26,26	0,136	80,78	3,018	149,51	10,181
28,82	0,167	80,78	3,018	149,51	10.181
31,30	0,196	82,79	3,247	161,20	11,077
33,07	0,226	82,79	3,247	185,52	12,516
35,14	0,284	87,14	3,664	196,25	12,991
37,73	0,340	87,14	3,664	207,43	13,334
40.44	0,405	91,49	4,202	219,04	13,678
43,58	0,583	91,49	4,202	230,55	13,943
45,18	0,734	98,28	4,962	242,37	14,196
48,02	0,858	98,28	4,962	253,66	14,466
50,11	0,722	108,38	6,040	265,68	14,608
52,45	0,818	108,38	6,040	277,79	14,846
54,47	0,965	118,76	7,187	286,68	15,159
59,69	1,331	118,76	7,187	305,21	15,448

© А. Г. Волков, С. В. Кортов, А. А. Повзнер, 1996

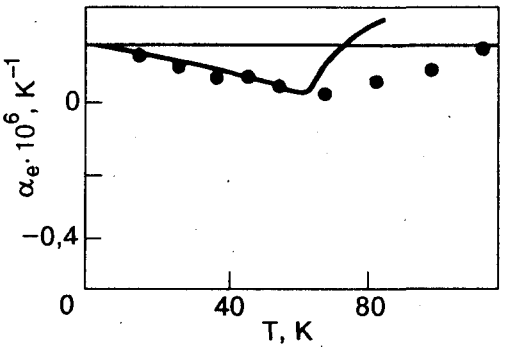

Рис. 1. Температурные зависимости электронного вклада в КТР, рассчитанного по (5) (сплошная линия) и из экспериментальных данных настоящей работы (●).

Фононная составляющая КТР (α_{ph}) FeSi рассчитывалась в модели Дебая с температурой Дебая $T_D = 560$ K, определенной из анализа результатов исследований неупругого рассеяния нейтронов [6].

Из данных, представленных в таблице, следует, что электронная составляющая КТР ($\alpha_e = \alpha - \alpha_{ph}$) FeSi является отрицательной в области низких температур и изменяет знак вблизи электронного превращения (рис. 1).

3. Воспользуемся для анализа экспериментальных данных по электронной части КТР FeSi результатами спин-флуктуационной теории [3,7], в которой описывается перенормировка спиновыми флуктуациями плотности электронных состояний и термодинамического потенциала:

$$g(\varepsilon, Um) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} g_0(\varepsilon + \sigma Um) \ , \qquad (2)$$

$$\Omega_c = Um^2 + \sum_{\mathbf{q},\, n} U(\chi_0^0(0) - \chi_{\mathbf{q}}^0(\omega_n)) m_{\mathbf{q}}^2(\omega_n) +$$

$$+ \Omega_e^0 - T \sum_{\mathbf{q},\, n} \ln m_{\mathbf{q}}(\omega_n) \ , \qquad (3)$$

$g_0(\varepsilon)$ — плотность электронных состояний при $U = 0$; T — температура в энергетических единицах;

$$\Omega_e^0 = -T \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon, Um) \ln (1 + \exp T^{-1}(\mu - \varepsilon))\, d\varepsilon$$

— одноэлектронный потенциал; $\chi_{\mathbf{q}}^0(\omega_n)$ — паулиевская магнитная восприимчивость; $\mathbf{q}$ — флуктуационный квазиимпульс; $\omega_n = 2nT$ — мацубаровская бозевская частота; n — целое число;

$$m^2 = \sum_{\mathbf{q},\, n} m_{\mathbf{q}}^2(\omega_n) \ ;$$

μ — химический потенциал, определяемый из условия электронейтральности;

$$m_{\mathbf{q}}^2(\omega) = \frac{1}{2} (\delta + X_{\mathbf{q}}(\omega))^{-1}$$

— квадрат амплитуды спиновых флуктуаций с квазиимпульсом $\mathbf{q}$ и частотой ω;

$$\delta = (1 - n_{ef}/m)$$

— знаменатель однородной парамагнитной восприимчивости;

$$X_{\mathbf{q}}(\omega) = U\chi_0^0(0) - U\chi_{\mathbf{q}}^0(\omega) \ ;$$

$$n_{ef} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, g(\varepsilon + \sigma Um) f(\varepsilon - \mu) \ ;$$

$f(\varepsilon - \mu)$ — функция Ферми—Дирака. Кроме того, при описании электронного термодинамического потенциала и вычислении амплитуды спиновых флуктуаций (m) следует иметь в виду известную аппроксимацию паулиевской восприимчивости:

$$U\chi_{\mathbf{q}}^0(\omega) = U\chi_0^0(0) - a\mathbf{q}^2 + ib\omega/\mathbf{q} \qquad (4)$$

(a и b — параметры пространственно-временной неоднородности, определяемые прямыми расчетами или из нейтронографических данных [7,8]).

Используя модель объемного расширения, в которой зависимость электронного потенциала от объема V связывается только с изменением ширины d-зоны [9,10] (причем, согласно [11], $\partial \ln W/\partial \ln V = -5/3$), получаем следующее выражение для электронной части КТР рассматриваемой системы d-электронов:

$$\alpha_e = \partial^2 \Omega_e / \partial T \partial V = \alpha_{0,e} + \alpha_{sf} \ . \qquad (5)$$

Здесь

$$\alpha_{0,e} = (5/9\kappa V_0) \left\{ \pi^2 T g(\mu, Um) + 3U\tilde{g}(\mu, Um) \frac{dm^2}{dT} \right\} \qquad (6)$$

и

$$\alpha_{sf} = -(U^2/\kappa) \times$$

$$\times \partial \left\{ \sum_{\mathbf{q},\, n} m_{\mathbf{q}}^2(\omega_n)\, \partial \left(\chi_0^0(0) - \chi_{\mathbf{q}}^0(\omega_n) \right) / \partial V \right\} / \partial T =$$

$$= -(5U/3\kappa V_0)[1 - n_{ef}/(3m)]\, \partial m^2/\partial T \qquad (7)$$

— соответственно одноэлектронное и спин-флуктуационное слагаемые;

$$\tilde{g}(\mu, Um) = \prod_{\alpha=\pm 1} g_0(\mu + \alpha Um)/g(\mu, Um) \ ;$$

κ — коэффициент изотермической сжимаемости; $V_0 = V(0)$; $m^2 = b(T^2/U)\delta^{-1}(\delta + a)^{-1}$ [7]. Согласно (7), флуктуационный вклад в КТР является отрицательным, так как амплитуда флуктуаций m растет с увеличением температуры. Поэтому до тех пор, пока химический потенциал находится в энергетической щели спектра d-электронов, одноэлектронное слагаемое (6) $\alpha_{0e} = 0$ и электронный вклад в КТР α_e является отрицательным. После электронного превращения полупроводник—металл, когда энергетическая щель в спектре d-электронов исчезает, отрицательный α_{sf} быстро подавляется за счет резкого увеличения $\alpha_{0,e}$, что и приводит к смене знака электронной части коэффициента теплового расширения.

Расчеты α_e для моносилицида железа были проведены в модели плотности электронных состояний [12], использованной нами ранее в [2–4] для расчетов других электронных свойств. При этом так же, как и в [2–4], принималось, что $a = 0$, $b = 10U^{-1}$, $U = 0{,}8$ эВ.

Полученные результаты представлены на рис. 1 и указывают на изменение знака электронной составляющей КТР FeSi. Что касается полного КТР FeSi (включающего в себя электронную и фононную части), то, согласно проведенным оценкам, он остается положительным вплоть до температуры 1,5 К, а при $T < 1{,}5$ К становится отрицательным. Однако в настоящее время мы не располагаем возможностью экспериментального подтверждения этого вывода теории.

Рассмотренный в настоящей работе механизм формирования отрицательного КТР представляется важным для узкощелевых сильно парамагнитных полупроводников на основе соединений d-металлов.

1. Z. Schlesinger, Z. Fisk, H. T. Zhang, M. B. Maple, J. F. DiTusa, and G. Aepli, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1748 (1993).
2. А. Г. Волков, А. А. Повзнер, П. В. Гельд, *ФТТ* **26**, 1675 (1984).
3. П. В. Гельд, А. А. Повзнер, А. Г. Волков, *ДАН СССР* **283**, 358 (1985).
4. П. В. Гельд, А. А. Повзнер, Ш. Ш. Абельский, Л. Ф. Ромашова, *ДАН СССР* **313**, 1107 (1990).
5. А. А. Севастьянов, С. М. Бармин, С. В. Кортов, *ФТТ* **25**, 596 (1983).
6. А. С. Иванов, Н. Л. Митрофанов, А. Ю. Румянцев, *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерно-физические исследования, теория и эксперимент* **2**, 79 (1989).
7. А. А. Повзнер, А. Г. Волков, *ФММ* **66**, 1073 (1988).
8. Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).
9. N. D. Lang and H. Ehreinreich, *Phys. Rev.* **168**, 605 (1968).
10. П. В. Гельд, А. А. Повзнер, А. А. Волков, *ДАН СССР* **333**, 321 (1993).
11. V. Heine, *Phys. Rev.* **67**, 673 (1967).
12. O. Nakanihsi, A. Janase, and A. Hasegawa, *J. Magn. Magn. Mater.* **15–18**, 879 (1980).

Spin fluctuations and low temperature features of thermal coefficient of linear expansion of iron monosilicide

A. G. Volkov, S. V. Kortov, and A. A. Povzner

The low temperature measurements of thermal coefficient of linear expansion of strong paramagnet FeSi are carried out. The results obtained are discussed within the framework of spin-fluctuation theory. It is shown that electronic part of the thermal coefficient of linear expansion is negative in the range of temperatures lower that of the semiconductor–metal phase transition. In metal phase it becomes positive. This specific feature of the thermal coefficient is explained by the spin-fluctuation renormalization of d-electronic states density.