

# ФОРМИРОВАНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ ХАББАРДОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ В МОНОСИЛИЦИДЕ ЖЕЛЕЗА

*Н. Е. Случанко\*, В. В. Глушков, С. В. Демишиев, М. В. Кондрин,  
В. Ю. Иванов, К. М. Петухов, Н. А. Самарин*

*Институт общей физики Российской академии наук  
117942, Москва, Россия*

*A. A. Меновский\*\**

*Van der Waals-Zeeman Laboratory, University of Amsterdam  
1018 XE Amsterdam, The Netherlands*

*B. B. Мошалков*

*Laboratory voor Vaste-Stoffysica en Magnetisme, Kuleuven  
B-3001 Leuven, Belgium*

Поступила в редакцию 4 июля 2000 г.

В основу анализа низкотемпературных аномалий физических свойств моносилицида железа положены результаты детальных измерений проводимости, коэффициентов Холла и термоэдс, а также магнитных характеристик, полученные на монокристаллических образцах FeSi высокого качества при гелиевых и промежуточных температурах. Показано, что наиболее полная и последовательная интерпретация магнитных, транспортных и оптических характеристик достигается в рамках модели Хаббарда. Определены параметры модели, приведены аргументы, свидетельствующие об образовании спиновых поляронов и перенормировке плотности состояний в FeSi в окрестности энергии Ферми при промежуточных температурах. Обнаружено, что с понижением температуры в интервале  $T < T_c \approx 15$  К в системе спиновых поляронов в FeSi реализуется переход к когерентному режиму спиновых флуктуаций и в результате ферромагнитный характер взаимодействия обуславливает образование магнитных микрообластей размером  $\sim 10$  Å. Обменное усиление намагниченности в окрестности носителя заряда в таких микрообластях, по-видимому, является причиной появления аномальной составляющей коэффициента Холла и гистерезиса намагниченности FeSi при гелиевых температурах. Обсуждается природа низкотемпературного перехода при  $T_m \approx 7$  К в системе взаимодействующих магнитных микрочастиц в моносилициде железа.

PACS: 71.27.+a

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время заметный интерес исследователей привлекает класс узкозонных полупроводников на основе редкоземельных элементов, в которых сильные квазичастичные взаимодействия приводят к образованию щели в зонном спектре в окрестности энергии Ферми. К указанному классу кондо-изоляторов принято относить также кубическое

соединение FeSi [1], в основном, за счет сходного поведения физических характеристик классического полупроводника с промежуточной валентностью SmB<sub>6</sub> [2] и моносилицида железа [1, 3]. В то же время, по мнению ряда авторов (см., например, [4]), серьезные сомнения вызывает справедливость использования модели кондо-решетки в случае, когда уровень Ферми располагается непосредственно в узкой 4f (3d)-полосе, приводя к возникновению быстрых флуктуаций зарядовой плотности в гексабориде самария (валентность самария  $v_{Sm} \approx 2.6$  [5]) и обус-

---

\*E-mail: nes@lt.gpi.ru  
\*\*A. A. Menovsky.

лавливая развитие спиновых флуктуаций в моносилициде железа [6]. Недавно показано [7, 8], что наиболее адекватное описание аномального поведения  $\text{SmB}_6$  может быть получено в рамках модели формирования при низких температурах,  $T \leq 15$  К, экситон-поляронных комплексов [9] вследствие быстрых ( $\sim 10^{-12}$  с) валентных флуктуаций на центрах самария.

Аналогично в [10, 11] были приведены экспериментальные данные, которые являются аргументами против применения модели кондо-изолятора и в случае интерпретации физических характеристик FeSi. Было показано, что FeSi, по-видимому, представляет собой спин-поляронный диэлектрик моттовского типа с сильными хаббардовскими корреляциями. В то же время формирование основного состояния в моносилициде железа сопровождается появлением при гелиевых температурах аномальной составляющей коэффициента Холла [10–12], а также возникновением ряда особенностей на температурных зависимостях высокочастотной проводимости, термоэдс и емкости [13]. Для объяснения генезиса указанных аномалий в окрестности  $T = T_m \approx 7$  К было высказано [10, 13] предположение о фазовом превращении в электронной подсистеме FeSi, однако вопрос о природе и характере перестройки электронной структуры вплоть до настоящего времени остается открытым.

В связи с этим целью настоящей работы явились проведение детального исследования коэффициента Холла при гелиевых и промежуточных температурах в широкой окрестности  $T_m$ , а также измерение намагниченности и магнитосопротивления на монокристаллических образцах моносилицида железа высокого качества.

## 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследований использовались монокристаллические образцы FeSi из того же слитка, что и в [10, 13]. Особое внимание уделялось приготовлению поверхности образцов и контактов для проведения резистивных измерений. При измерениях намагниченности использовались промышленный (PARC M155, США) и лабораторный вибрационные магнитометры с криостатами в диапазоне рабочих температур 2–300 К и электромагнитом ( $H \leq 12.5$  кЭ). Измерения коэффициента Холла проводились на автоматизированной экспериментальной установке оригинальной конструкции с вращением образца с помощью шагового двигателя (шаг —  $3.6^\circ$ ) в фиксированном магнитном поле сверхпроводящего соленоида

( $H \leq 80$  кЭ). В режиме измерений малых сигналов для повышения точности использовался нововольтметр Keithley-2182. Сбор данных и управление вращением образца и температурой в рабочем объеме осуществлялись персональным компьютером через микропроцессорный интерфейс оригинальной конструкции.

## 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 1а представлены типичные экспериментальные кривые, полученные при регистрации полевых зависимостей холловского сопротивления FeSi при гелиевых температурах. Характерной чертой поведения  $R(H)$  является гистерезис, наблюдаемый в интервале магнитных полей  $H < 5$  кЭ и отвечающий появлению аномальной составляющей холловского сигнала (см. также [10, 12]). Следует отметить, что в интервале  $H \leq 10$  кЭ амплитуда аномального холловского напряжения существенно превышает нормальную компоненту  $U^n(H)$ . Напротив, поведение намагниченности при гелиевой тем-

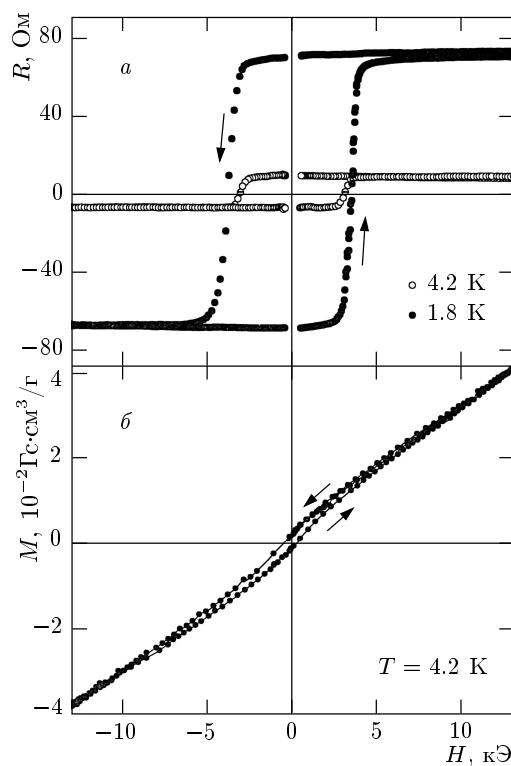


Рис. 1. Полевые зависимости (а) холловского сопротивления  $R(H)$  и (б) намагниченности  $M(H)$  моносилицида железа при гелиевых температурах

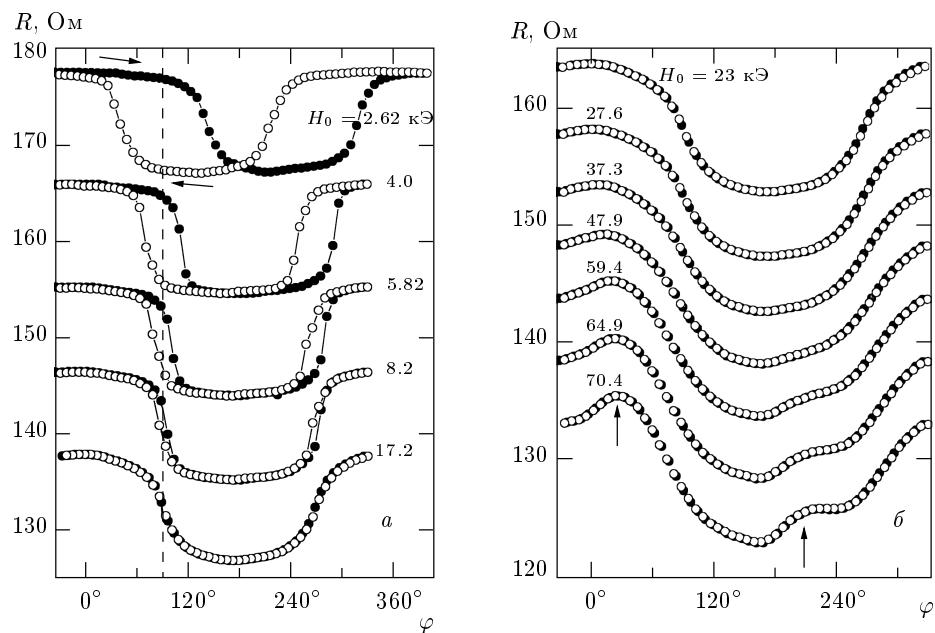
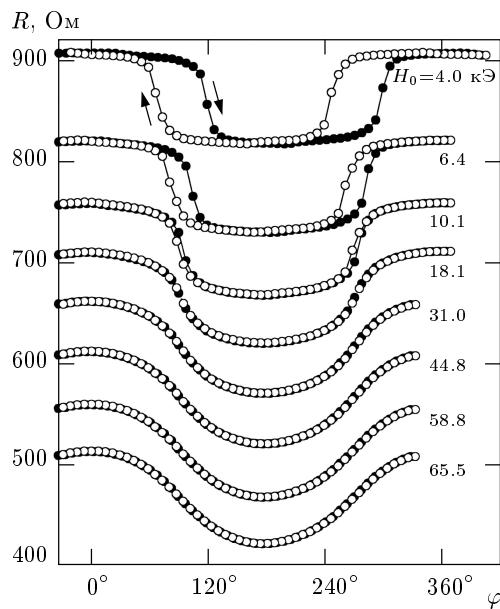


Рис. 2. Угловые зависимости холловского сопротивления  $R(\varphi)$  в FeSi при  $T = 4.2$  К (для каждой кривой приведены значения напряженности магнитного поля  $H_0$  в кЭ)

пературе (рис. 1б) характеризуется преобладающим парамагнитным вкладом, линейным по магнитному полю в указанном интервале  $H \leq 12.5$  кЭ, и небольшой «ферромагнитной» составляющей  $M_S(H)$ . Малые абсолютные значения  $M_S(H) < 5 \cdot 10^{-3}$  Гс·см<sup>3</sup>/г, а также отсутствие воспроизведимости намагниченности при варьировании условий охлаждения и при многократном перемагничивании монокристаллического образца FeSi (так называемые эффекты памяти) позволяют высказать предположение о «замораживании» магнитных моментов в матрице монокристида железа и переходе в состояние спинового стекла при гелиевых температурах (см., например, [14]).

С целью выяснения особенностей формирования магнитных моментов в FeSi при низких температурах были выполнены детальные исследования угловых зависимостей холловского сопротивления. Результаты измерений  $R(\varphi)$  ( $\varphi$  — угол между направлением [111] нормали к поверхности образца и магнитным полем  $H$ ) при фиксированных значениях  $H < 80$  кЭ и температуры в интервале 1.6–20 К представлены на рис. 2–4. Исследования угловых зависимостей холловского сопротивления при гелиевых температурах (рис. 2, 3) подтверждают преобладающий характер аномальной составляющей в интервале полей  $H \leq 20$  кЭ. Увеличение магнитного поля при этом приводит к резкому сужению петли

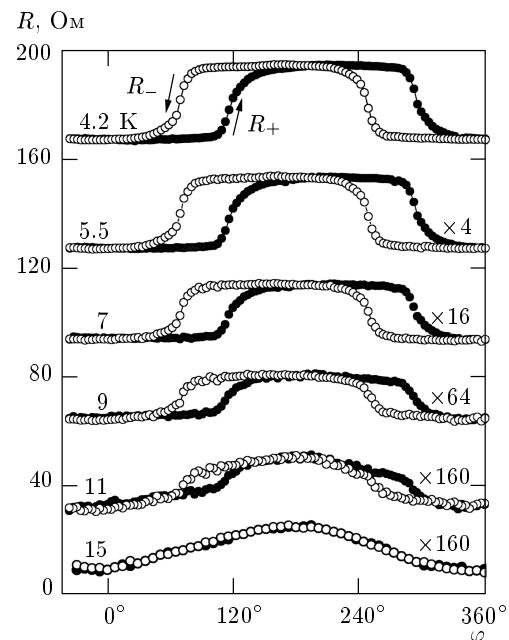
гистерезиса, ширина которой в полях  $H > 10$  кЭ становится сравнимой с погрешностью экспериментальной методики. Одновременно при увеличении  $H$  увеличивается амплитуда нормальной компоненты холловского напряжения рис. 2, 3. Отметим также, что на угловых зависимостях холловского сопротивления при гелиевой температуре в интервале полей  $H \geq 35$  кЭ появляется дополнительная составляющая сигнала удвоенной частоты (обозначена стрелками на рис. 2б). С увеличением температуры выше гелиевой амплитуда аномальной компоненты холловского сигнала резко убывает (рис. 4, 5), одновременно уменьшается ширина петли гистерезиса  $\Delta\varphi_{hyst}$ . На рисунке 5 приведена угловая зависимость параметра  $\Delta R_{hyst}(\varphi) = (R_+ - R_-)/2$ , характеризующего полуразность между кривыми на рис. 4, снятыми при вращении образца в противоположных направлениях. Полученная таким образом амплитуда аномальной составляющей холловского сопротивления в дальнейшем используется в процедуре разделения нормального и аномального вкладов в коэффициент Холла. Из данных, приведенных на рис. 5, может быть получена также температурная зависимость ширины гистерезиса  $\Delta\varphi_{hyst}$ , измеренной на полувысоте максимума  $\Delta R_{hyst}(\varphi)$ . На рисунке 6 представлены температурные зависимости параметра  $\Delta\varphi_{hyst}$ , найденные по результатам измерений для различных значений магнитного поля в ин-



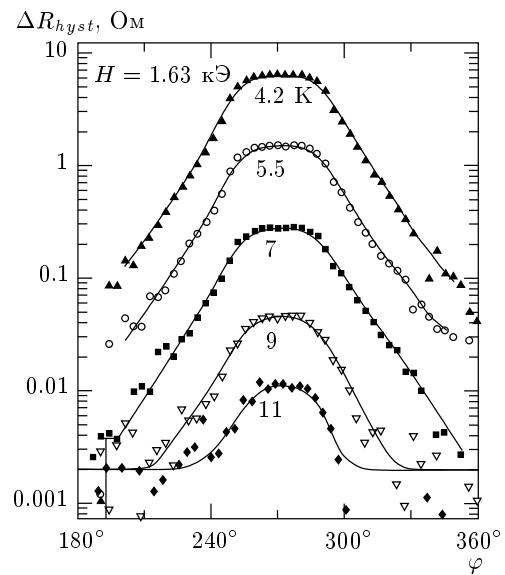
**Рис. 3.** Угловые зависимости холловского сопротивления  $R(\varphi)$  в FeSi при  $T = 1.73$  К (для каждой кривой приведены значения напряженности магнитного поля  $H_0$  в кЭ)

тервале  $H < 4$  кЭ. Следует подчеркнуть, что вслед за сравнительно медленным уменьшением ширины петли гистерезиса  $\Delta\varphi_{hyst}$  в интервале  $T \leq 11$  К с увеличением температуры наблюдается участок резкого убывания  $\Delta\varphi_{hyst}$  (см. рис. 6), и при температурах выше 15 К во всем диапазоне магнитных полей, используемых в настоящей работе, на угловых зависимостях  $R(\varphi)$  присутствует только нормальная (синусоидальная) компонента холловского сигнала, обусловленная носителями заряда  $p$ -типа в матрице моносилицида железа (см., например, рис. 4). Подчеркнем также, что знаки коэффициентов Холла  $R_H(T)$  и термоэдс  $S(T)$  в FeSi совпадают в интервале температур 15–70 К, причем с понижением температуры в диапазоне  $T \leq 15$  К появлению аномальной компоненты холловского сигнала отрицательной полярности отвечает резкое уменьшение положительной величины  $S(T)$  [10].

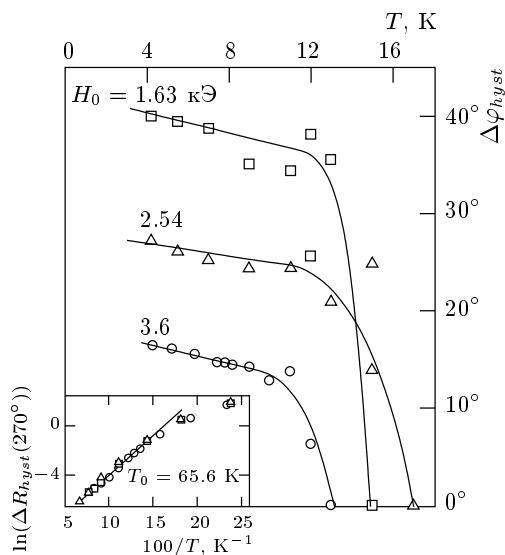
Отмеченные выше эффекты памяти, обусловленные зависимостью экспериментальных параметров FeSi от предыстории (последовательности циклов изменения температуры и магнитного поля на образце), наблюдались также при регистрации угловых зависимостей холловского сопротивления. На рисунках 7, 8 в качестве примера представлены два семейства экспериментальных кривых  $R(\varphi)$ , измеренные при гелиевой температуре при фиксированных зна-



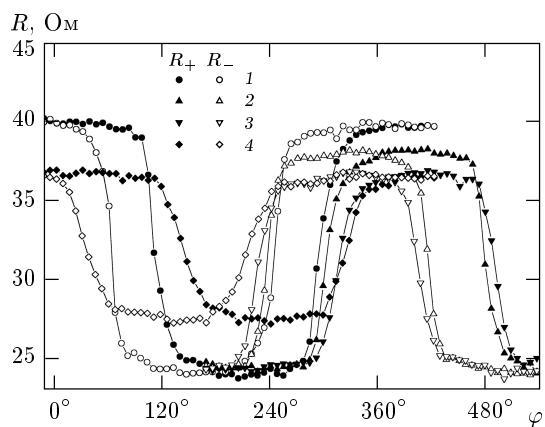
**Рис. 4.** Угловые зависимости холловского сопротивления  $R(\varphi)$  моносилицида железа в магнитном поле  $H_0 = 1.63$  кЭ при различных температурах (в правой части рисунка приведены коэффициенты масштабирования экспериментальных данных)



**Рис. 5.** Изменение аномальной составляющей холловского сопротивления  $\Delta R_{hyst}(\varphi) = (R_+ - R_-)/2$ , полученной по экспериментальным данным рис. 4

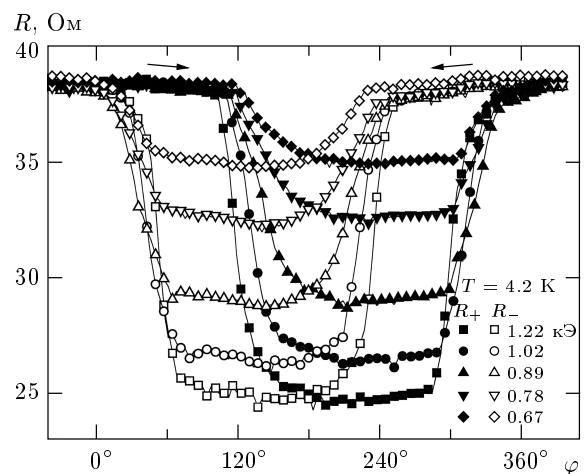


**Рис. 6.** Температурные зависимости ширины петли гистерезиса холловского сопротивления  $\Delta\varphi_{hyst}(T)$  в FeSi. На вставке приведены активационные зависимости параметра  $\Delta R_{hyst}(270^\circ)$  для трех указанных значений магнитного поля



**Рис. 7.** Серия угловых зависимостей холловского сопротивления  $R$  ( $T = 4.2$  К), измеренных при перестройке величины магнитного поля между фиксированными значениями  $H_0$ , выполненной при различной ориентации образца FeSi относительно направления вектора  $\mathbf{H}$ :  $\varphi_0 = 180^\circ$  (1)  $\rightarrow$  (2)  $\rightarrow$  (3) и  $\varphi_0 = 360^\circ$  (3)  $\rightarrow$  (4), а также при значениях магнитного поля  $H_0 = 1.7$  кЭ (1), 1.28 кЭ (2), 1.06 кЭ (3) и 0.89 кЭ (4)

чениях магнитного поля  $H_0$  в интервале 0.5–2 кЭ. В эксперименте, представленном на рис. 7, значения  $R(\varphi = 0^\circ)$  и  $R(\varphi = 180^\circ)$ , разность которых определяет удвоенную полную величину холловского сопротивления, оказываются зависящими не только



**Рис. 8.** Изменение гистерезисного вклада в  $R(\varphi)$  FeSi, вызванное уменьшением магнитного поля от  $H_0 = 1.22$  кЭ до 0.67 кЭ при  $T = 4.2$  К. Перестройка величины  $H_0$  выполнена при фиксированной ориентации образца относительно направления вектора  $\mathbf{H}$ :  $\varphi_0 = 180^\circ$

ко от амплитуды внешнего магнитного поля, но также и от величины и направления вектора  $\mathbf{H}$  во время изменения  $H_0$  между фиксированными значениями. Кроме того, при перестройке величины  $H_0$  в строго определенной ориентации образца во внешнем магнитном поле ( $\mathbf{H}$  перпендикулярно поверхности образца) фиксированным оказывается одно из значений ( $R(\varphi = 0^\circ)$  на рис. 8), тогда как убывание холловского сопротивления при уменьшении  $H_0$  происходит практически исключительно за счет изменений величины  $R(\varphi = 180^\circ)$ . Анализ кривых на рис. 7, 8 позволяет оценить изменение амплитуды гистерезиса холловского сопротивления в магнитном поле (см., например, рис. 9). На вставке к рис. 9 показана также полевая зависимость площади петли гистерезиса  $S_{hyst}(H)$ , найденная путем интегрирования экспериментальных результатов рис. 9.

Для выяснения влияния вклада от магнитореостистивной составляющей на результаты измерений холловской компоненты сигнала в работе исследовались также температурные, полевые и угловые зависимости удельного сопротивления FeSi в интервале температур  $T \leq 10$  К. На рисунке 10 представлены типичные кривые отрицательного магнитосопротивления FeSi, измеренные при гелиевых температурах. Следует подчеркнуть, что поведение этого сопротивления в FeSi, так же как и обсуждавшегося выше холловского сопротивления, существенно отличается от наблюдавшегося в так называемом соедине-

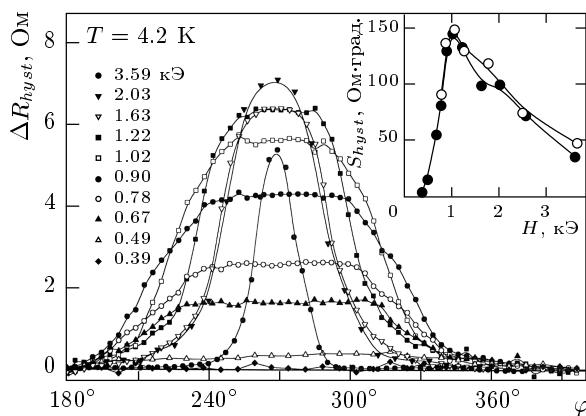


Рис. 9. Угловые зависимости аномальной составляющей холловского сопротивления  $\Delta R_{hyst}(\varphi) = (R_+ - R_-)/2$ , измеренные для различных значений магнитного поля  $H_0$  при  $T = 4.2$  К. На вставке приведена полевая зависимость площади петли гистерезиса, полученная обработкой данных рис. 9

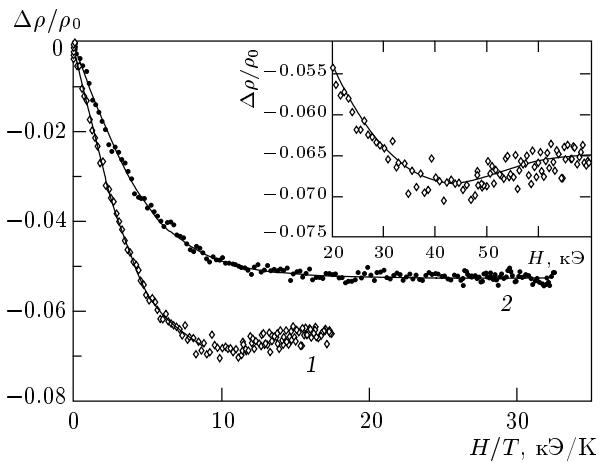


Рис. 10. Полевые зависимости магнитосопротивления образца FeSi, измеренные при  $T = 4.2$  К (1) и  $T = 1.73$  К (2). На вставке показан участок кривой  $\Delta\rho/\rho_0(H)$  ( $T = 4.2$  К) в магнитном поле  $H > 20$  кГ

ни-аналоге — кондо-изоляторе SmB<sub>6</sub>, для которого квадратичная зависимость  $\Delta\rho(H)$  была зарегистрирована в полях вплоть до 500 кГ [15]. Кривая  $\Delta\rho(H, T = 4.2$  К) в FeSi в интервале  $H \leq 35$  кГ достаточно хорошо аппроксимируется функцией Бриллюэна (см. рис. 10):

$$\begin{aligned} \Delta\rho^I &= \rho_0 B_J(\alpha) = \\ &= \rho_0 \left( \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \frac{2J+1}{2J} \alpha - \frac{1}{2J} \operatorname{ctg} \frac{\alpha}{2J} \right), \quad (1) \end{aligned}$$

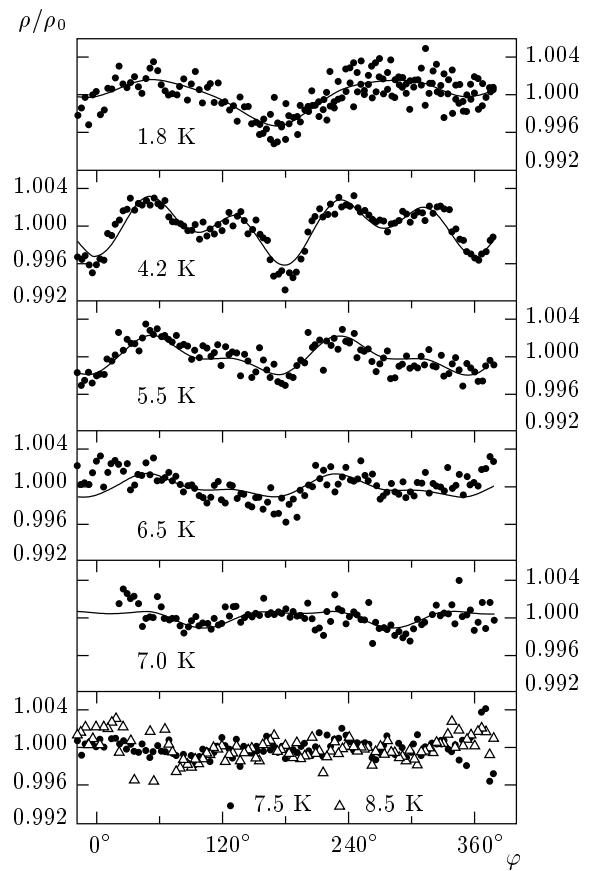


Рис. 11. Угловая зависимость магнитосопротивления  $\rho(H = 70.2$  кГ,  $\varphi)/\rho(\varphi_0)$ , полученная в эксперименте с вращением образца FeSi в фиксированном магнитном поле  $H = 70.2$  кГ при различных температурах

где  $\alpha = g\mu_B JH/k_B T$ ,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $k_B$  — постоянная Больцмана. В окрестности  $H \approx 35$  кГ вследствие появления дополнительного вклада  $\Delta\rho^{II}$  в  $\Delta\rho(H)$  на зависимости магнитосопротивления при гелиевой температуре наблюдается широкий минимум с последующей тенденцией к насыщению величины отрицательного магнитосопротивления в полях  $H \geq 60$  кГ (рис. 10, кривая 1, см. также вставку). С понижением температуры от 4.2 до 1.7 К дополнительный вклад в  $\Delta\rho(H)$  не регистрируется в полях до 70 кГ, и в результате магнитосопротивление во всем диапазоне изменения  $H$ , используемом в настоящей работе, с хорошей точностью описывается функцией Бриллюэна (см. рис. 10, кривая 2).

Выполненные в работе измерения угловых зависимостей магнитосопротивления (см. рис. 11) позволяют исключить сколь-нибудь заметное влияние эффектов отрицательного магнитосопротивления,

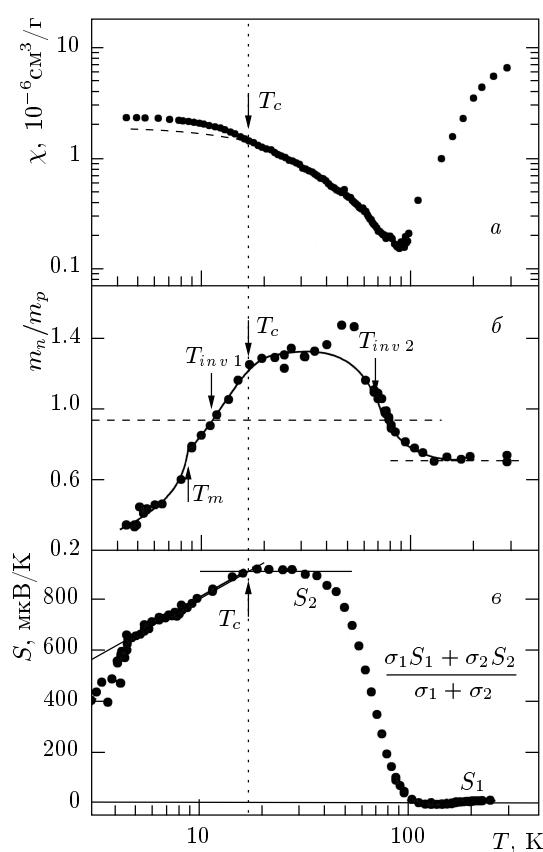


Рис. 12. Температурные зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  (а), отношения эффективных масс носителей заряда  $m_n/m_p$  (б) и коэффициента термоэдс  $S(T)$  в FeSi (в)

возникающих вследствие «неэквипотенциальности» в расположении холловских контактов на образце, на появление обсуждавшихся выше (рис. 1–5) аномалий холловского сопротивления. В частности, в результате проведенных исследований установлено, что величина  $\Delta\rho/\rho(\varphi)$  в указанном интервале температур в полях до 70 кЭ не превышает значения 0.5%. При этом аномальная угловая зависимость отрицательного магнитосопротивления (рис. 11) оказывается связанный с отмеченной выше составляющей  $\Delta\rho^{\text{II}}(H)$ , дающей вклад в магнитосопротивление в полях  $H \geq 35$  кЭ, и исчезает с повышением температуры до значений  $T = T_m \approx 7$  К.

В заключение данного раздела, перед тем как перейти к обсуждению результатов и анализу физических характеристик моносилицида железа, остановимся кратко на результатах измерений намагниченности, выполненных нами в интервале промежуточных температур. Отметим, что ограничения точ-

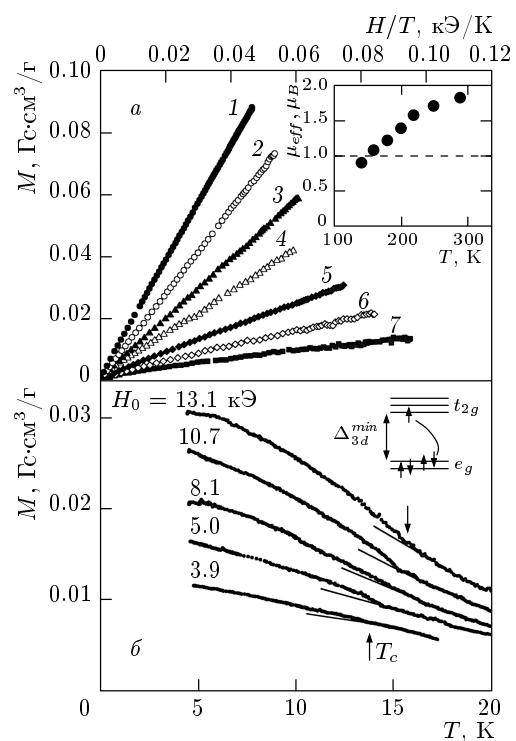


Рис. 13. а) Полевые зависимости намагниченности в координатах  $M(H/T)$ , полученные для фиксированных температур в интервале  $T > 120$  К: 1 —  $T = 290$  К, 2 — 250 К, 3 — 220.2 К, 4 — 200.7 К, 5 — 179.5 К, 6 — 159.5 К и 7 — 141 К. На вставке показана температурная зависимость эффективного магнитного момента  $\mu_{eff}$ , определенного путем аппроксимации экспериментальных данных с помощью выражения (3). б) Температурные зависимости  $M(T)$  в окрестности  $T_c \approx 15$  К, измеренные при фиксированных значениях магнитного поля  $H_0$ . На вставке схематически показано расщепление  $3d$ -полосы железа в кристаллическом поле FeSi

ности используемых магнитометров позволили провести надежные измерения полевых зависимостей  $M(H, T_0)$  лишь в диапазонах температур  $T \leq 50$  К и  $T \geq 120$  К, тогда как в окрестности минимума магнитной восприимчивости в FeSi при  $T \approx 90$  К (см. рис. 12а) резкое уменьшение магнитного отклика привело к плохой воспроизведимости полученных экспериментальных данных. Результаты измерений намагниченности FeSi представлены на рис. 13. На рис. 13а видно, что в диапазоне  $T \geq 120$  К в магнитных полях  $H \leq 12.5$  кЭ кривые  $M(H)$  достаточно хорошо аппроксимируются начальным участком функции Бриллюэна. В то же время на температурных зависимостях намагниченности FeSi, измеренных в интервале  $T \leq 50$  К, в окрестности

$T_c \approx 13\text{--}15$  К обнаружен слабо выраженный излом  $M(T)$  (см. рис. 13б), который коррелирует с появлением низкотемпературных аномалий холловского сопротивления (рис. 2–5) и отрицательного вклада в термоэдс [10] (см. также рис. 12б) в моносилициде железа. Интерполяция данных магнитных измерений (рис. 12а, 13б) на диапазон температур ниже точки излома,  $T < T_c$ , дает возможность выявить возникновение дополнительного магнитного вклада в  $M(T, H_0)$  (рис. 13б) и  $\chi(T)$  (рис. 12а), который, по-видимому, с дальнейшим понижением температуры при  $T \leq 7$  К трансформируется в отмеченную ранее «ферромагнитную» составляющую намагниченности  $M_S(H)$  в FeSi (см. рис. 1б).

Отметим, что в общих чертах похожее поведение магнитных характеристик моносилицида железа было найдено в [16] при измерениях монокристаллических образцов FeSi с помощью сквид-магнитометра, причем авторы [16] ограничились при измерениях намагниченности лишь температурами 5 и 300 К и, таким образом, при анализе полученных результатов были лишены возможности корректно учесть различные вклады в  $M(H, T)$  при переходе от режима собственной к «примесной» проводимости в FeSi.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При анализе приведенных в предыдущем разделе экспериментальных результатов прежде всего обращает на себя внимание резкое количественное несоответствие амплитуды эффектов от нормальной и аномальной (магнитной) составляющих намагниченности и коэффициента Холла. Действительно, при гелиевых температурах в магнитных полях до 10 кЭ аномальный вклад в холловское сопротивление является доминирующим, тогда как при описании намагниченности преобладающим оказывается парамагнитный вклад, который определяет как амплитуду сигнала, так и характер зависимости  $M(H)$  в FeSi. Поскольку экспериментальные результаты получены на монокристаллических образцах высокого качества и, таким образом, наличие примесной магнитоупорядоченной фазы в объеме монокристаллов FeSi представляется маловероятным, для объяснения эффектов усиления коэффициента Холла следует предположить существование локально увеличенной намагниченности в непосредственной окрестности носителей заряда. В такой ситуации одним из наиболее продуктивных подходов к интерпретации аномалий транспортных и магнитных характеристик моносилицида железа, на наш взгляд, может

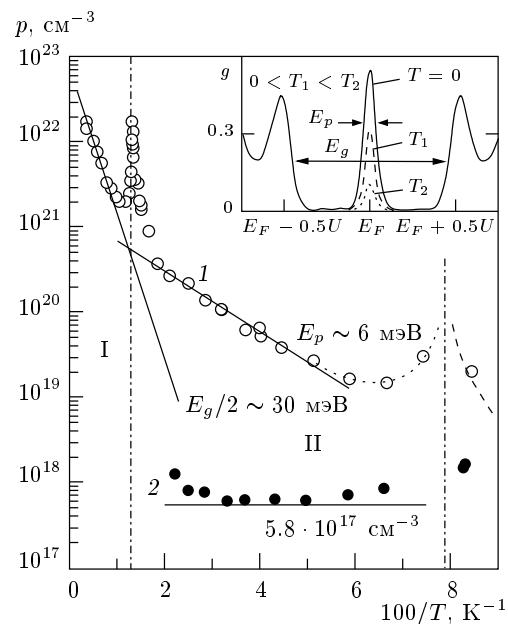


Рис. 14. Активационные асимптотики параметров:  $p = \frac{\mu_n/\mu_p - 1}{\mu_n/\mu_p + 1} \frac{1}{R_H|e|}$  для  $\mu_n/\mu_p \approx 1.5$  [10] (1) и  $p = N_{Fe} \exp(|e|S_2/k_B)$  (2) в FeSi. На вставке приведена плотность состояний в модели Хаббарда для  $2 \leq U/D \leq 3$  по результатам расчетов [17] (см. также [18, 19]).

являться предложенный в [10, 11] подход, основанный на описании свойств FeSi в рамках модели Хаббарда [17] в критическом диапазоне значений параметров  $2 \leq U/D < 3$  ( $U$  — хаббардовское растяжение,  $2D$  — ширина полосы проводимости, см. также [18, 19]). При этом в соответствии с результатами исследований транспортных характеристик и термоэдс [10, 11] следует выделить несколько характерных температурных интервалов изменения физических параметров FeSi.

а) Область собственной проводимости FeSi. Согласно выводам [10, 11], режим собственной проводимости моносилицида железа реализуется в интервале температур  $T > 100$  К и отвечает активации носителей через непрямую щель ( $E_g/2 \approx 30$  мэВ), разделяющую хаббардовские полосы, образованные, в основном, 3d-состояниями железа. Поведение концентрации носителей (для примера  $p$ -типа) в области собственной проводимости, найденное по результатам измерений гальваномагнитных характеристик [10], представлено на рис. 14 (кривая 1 в области I). Полученное активационное изменение концентрации собственных носителей заряда в этой области температур может быть использовано для

оценки величины эффективного магнитного момента  $\mu_{eff}$  носителя в верхней  $3d$ -полосе — зоне проводимости — по результатам выполненных нами измерений намагниченности (см. рис. 13а). Действительно, поскольку измерения восприимчивости моносилицида железа, выполненные в [20] в широком интервале температур 77–800 К, позволяют сделать вывод о немагнитном характере  $3d$ -состояний в нижней полосе — валентной зоне (синглет  $S = 0$ ), — магнитные свойства FeSi следует связать с  $3d$ -состояниями зоны проводимости. Апроксимация функции  $\chi(T)$  зависимостью вида

$$\chi(T) = \frac{Ng^2\mu_B^2}{3k_BT} \frac{S(S+1)(2S+1)}{2S+1 + \exp(E_g/k_BT)} \quad (2)$$

(см., например, [20]) дает для параметров  $S$  и  $g$ , характеризующих состояния верхней  $3d$ -полосы в FeSi, значения  $S = 1$  и  $g \approx 2.17$ . При этом выполненный в [20] расчет восприимчивости указанной двухуровневой системы из синглетного и триплетного состояний, разделенных щелью  $E_g \approx 60$ –70 мэВ, позволяет достаточно точно описать поведение кривой  $\chi(T)$  в FeSi при температурах выше комнатной. В результате анализ экспериментальных данных рис. 13а в интервале 120–300 К, проведенный нами в рамках соотношения Кюри–Вейсса вида

$$M = \frac{n_0 \exp(-E_g/2k_BT) \mu_{eff}^2(T)}{3k_BT} H, \quad (3)$$

приводит к значениям  $\mu_{eff}(T)$  на Fe-центрах, меняющимся в диапазоне от  $2\mu_B$  в окрестности комнатной температуры до  $\mu_{eff} \approx \mu_B$  при  $T \approx 140$ –160 К (см. вставку на рис. 13а). Следует подчеркнуть, что величина  $\mu_{eff} \approx \mu_B$  отвечает параметрам свободного носителя с  $s = 1/2$  и  $g = 2$ . Отметим также, что значение  $\mu_{eff} \approx 2\mu_B$  на атом Fe было получено ранее в [21] при измерениях магнитной восприимчивости FeSi в интервале температур выше 700 К и, таким образом, действительно может рассматриваться как характеристика  $3d$ -состояний носителей в зоне проводимости. Кроме того, в тетраэдрическом окружении парамагнитного иона железа в кубической B20 кристаллической структуре FeSi следует ожидать расщепления  $3d$ -зоны на полосы  $e_g$  и  $t_{2g}$ . При этом найденная для FeSi величина  $E_g \approx 60$  мэВ, на наш взгляд, может быть непосредственно связана с минимальной энергией расщепления в кристаллическом поле  $\Delta_{3d}^{min}$ , причем наиболее вероятная структура  $3d$ -полос отвечает четырехвалентному состоянию железа в этом соединении с кремнием и обусловливает термически активированные переходы между состояниями  $e_g$  (немагнитный

синглет) и  $t_{2g}$  (см. схему на вставке к рис. 13б). В такой ситуации паре электрон–дырка, возникающей на Fe-центре в результате термического возбуждения носителя из полностью заполненной полосы  $e_g$ , отвечает спин  $S = 1$  и полученное выше значение  $\mu_{eff} \approx 2\mu_B$  (см. вставку на рис. 13а).

б) *Спин-поляронный транспорт в FeSi при  $T < 100$  К.* С понижением температуры,  $T \leq 100$  К, режим собственной проводимости сменяется транспортом по спин-поляронным состояниям на уровне Ферми [10, 11]. В этом режиме активационному изменению проводимости и коэффициента Холла (область II на рис. 14, энергия активации  $E_p \approx \approx 6$  мэВ [10]) в интервале температур 15–50 К отвечает близкое к постоянному значение термоэдс  $S \approx 900 \pm 20$  мкВ/К [10, 11] (см. также рис. 12б). В такой ситуации наиболее вероятное объяснение особенностей поведения физических параметров FeSi может быть получено в предположении о реализации режима сильных кулоновских (хаббардовских) корреляций в моносилициде железа при промежуточных температурах. При этом зона проводимости и валентная зона, образованные, в основном,  $3d$ -состояниями железа в FeSi, соответствуют верхней и нижней хаббардовским полосам, причем в рамках используемого подхода валентная зона является хаббардовской полосой двукратно занятых состояний (синглет  $S = 0$ , см. схему на вставке к рис. 13б). Для оценки концентрации носителей заряда в условиях сильных хаббардовских корреляций обычно используется формула Хикса [22]:

$$S(T) = -\frac{k_B}{|e|} \ln \left( \frac{1-\nu}{\nu} \right). \quad (4)$$

В соотношении (4) параметр  $\nu$  представляет собой приведенную концентрацию носителей ( $p$ -тип) в нижней хаббардовской полосе  $\nu = p/N_{Fe} \approx 1.3 \cdot 10^{-5}$  и позволяет оценить концентрацию дырок,  $p \approx 6 \cdot 10^{17}$  см $^{-3}$  [11]. В результате спин-поляронные состояния, отвечающие, согласно [23], режиму сильных хаббардовских корреляций, в случае FeSi характеризуются малой ( $\sim 10^{17}$  см $^{-3}$ ) концентрацией носителей в  $e_g$ - и  $t_{2g}$ -полосах (см. вставку на рис. 13б) и могут возникать вследствие быстрых спиновых флуктуаций между  $3d$ -состояниями в зоне проводимости и на Fe-центрах, расположенных в ближайшем окружении носителя заряда. При этом энергия активации низкотемпературного транспорта  $E_p \approx 6$  мэВ (см. рис. 14, кривая 1 в интервале II) должна отвечать глубине ямы спин-поляронных состояний, тогда как реальная

концентрация носителей в хаббардовских полосах оказывается фиксированной на уровне приблизительно  $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  для данного монокристалла FeSi (см. рис. 14, кривая 2).

Следует особо подчеркнуть, что, согласно выводам [17–19], с возникновением спин-поляронных состояний на  $E_F$  связана перенормировка электронного спектра в модели Хаббарда. При этом возникновение при понижении температуры многочастичного резонанса на  $E_F$  (см. вставку на рис. 14) обуславливает «металлизацию» спектра, связанную с переходом к проводимости по узкой зоне, отвечающей появлению носителей заряда большой эффективной массы. По-видимому, отмеченное ранее уменьшение  $\mu_{eff}$  до значений  $\mu_{eff} \approx \mu_B$  (см. вставку на рис. 13a) следует связать с переходом при понижении температуры к транспорту по узкой зоне, расположенной в окрестности  $E_F$ . Для оценки эффектов перенормировки эффективной массы зонных носителей в FeSi воспользуемся в рамках соотношений

$$R_H\sigma = \mu_p - \mu_n, \quad (5)$$

$$\mu_{n,p} = e\tau/m_{n,p}, \quad (6)$$

действительных в области собственной проводимости полупроводника, результатами гальваномагнитных исследований [10]. С учетом найденных в [10] отношения подвижностей  $\mu_n/\mu_p$  (300 К) = 1.5 и зависимости  $\mu_p - \mu_n \approx A/\sqrt{T}$ , справедливой в интервале 150–300 К, из соотношений (5), (6) оценим поведение параметра  $m_n/m_p$  в FeSi. Результаты расчетов отношения  $m_n/m_p = f(T)$  для моносилицида железа в широком температурном интервале 4–300 К представлены на рис. 12б. Хотя параметр  $m_n/m_p$  в интервале температур 50–150 К в FeSi возрастает примерно в 2 раза, указанному изменению отвечает переход от электронных состояний в верхней хаббардовской полосе — зоне проводимости с плотностью  $\sim 13$  сост./эВ·эл.яч. (см., например, [24]) — к состояниям многочастичного резонанса на  $E_F$  (см. вставку на рис. 14). Как видно на рис. 12б, эффективное «утяжеление» электронов при формировании спин-поляронных состояний на уровне Ферми и обуславливает инверсию знака коэффициента Холла при температуре  $T = T_{inv2} \approx 70$  К [10], отвечающей выполнению условия  $m_n \approx m_p$ . Другая, наиболее корректная, оценка увеличения амплитуды многочастичного резонанса на  $E_F$  может быть получена непосредственно из измерений магнитной восприимчивости моносилицида железа (рис. 12a). При этом переход с понижением температуры от экспоненциальной асимптотики  $\chi(T)$  в области  $T \sim 150$ –500 К к

увеличению восприимчивости в интервале  $T < 90$  К с учетом плотности состояний, представленной на вставке к рис. 14, следует связать с усилением паулиевского парамагнитного вклада в  $\chi(T)$ . В приближении узкой прямоугольной зоны на уровне Ферми шириной  $\delta = E_p \approx 6$  мэВ для оценки  $\chi_p(T)$  имеем

$$\chi_p(T) = \frac{1}{2}g^2\mu_B^2N^*(E_F) \int_{-\delta/2}^{\delta/2} \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE. \quad (7)$$

С учетом вклада в перенормировку  $\chi_p(T)$  от интеграла в правой части (7), который определяет изменение с температурой величины  $\chi_p(T)$  в 4–5 раз (подробнее см., например, [25]), для фактора усиления, описывающего непосредственно перенормировку плотности состояний на уровне Ферми, получаем:  $N^*(E_F, T = 4.2 \text{ K})/N^*(E_F, T = 100 \text{ K}) \geq 20$ . Таким образом, формирование с понижением температуры в интервале  $T < 200$  К спиновых поляронов в FeSi в рамках используемого подхода сопровождается возникновением узкого многочастичного резонанса на уровне Ферми, характеризующегося плотностью состояний  $N^*(E_F) \geq 20$  сост./эВ·эл.яч. Следует отметить, что независимый вывод о существенной перенормировке плотности состояний в окрестности щели был сделан также в [26] на основе результатов туннельных экспериментов в FeSi.

В рамках используемого подхода выполним дальнее оценки параметров модели Хаббарда и микроскопических характеристик спиновых поляронов для случая моносилицида железа. Воспользуемся при этом результатами расчетов оптической проводимости FeSi [17] в сопоставлении с оптическими спектрами  $\sigma(\omega)$ , измеренными для моносилицида железа в широком ИК-диапазоне в [27]. Выполненное в [11] сравнение положения и ширины максимума  $\sigma(\omega)$  при  $U/2$  приводит к следующим значениям параметров модели:  $U \approx 270$  мэВ,  $2D \approx 210$  мэВ,  $U/D \approx 2.6$  и  $E_g = U - 2D \approx 60$  мэВ, причем как величина щели  $E_g$  так и параметр  $U/D \approx 2.6 \leq 3$ , определяющий критическое поведение системы, находятся в хорошем согласии с предсказаниями [17]. Далее, применяя критерий, аналогичный стонеровскому  $UN(E_F) > 1$ , для зонной структуры с многочастичным спин-поляронным резонансом на уровне Ферми (вставка на рис. 14), имеем  $UN^*(E_F) > 5$ , и, таким образом, в рамках используемого подхода для FeSi следует ожидать возникновения на основе спин-поляронных состояний ферромагнитных микрообластей в матрице моносилицида железа при низких температурах.

В условиях сильного электрон-фононного взаимодействия в FeSi [27] ширина линий оптических фононов в интервале 180–400 см<sup>-1</sup> может быть использована для оценки времени релаксации носителей в хаббардовских полосах. Используя приведенные в [27] значения ширины линий  $\gamma_i^{ph}$  (198 см<sup>-1</sup>, 318 см<sup>-1</sup>, 338 см<sup>-1</sup>)  $\approx 10$  см<sup>-1</sup>, получим оценку времени релаксации  $\langle\tau_{e-ph}\rangle \approx 1/3\gamma_i^{ph} \approx 1.7 \cdot 10^{-13}$  с и далее, воспользовавшись соотношением (6) и значениями  $\mu_{n,p} \approx 4-6$  см<sup>2</sup>/В·с [10], вычислим эффективную массу носителей в верхней и нижней хаббардовских полосах:  $m_n^*(T \approx 200$  К)  $\approx 50m_0$  и  $m_p^*(T \approx 200$  К)  $\approx 75m_0$ . Подчеркнем, что аналогичное значение  $m^* \approx 50m_0$  было получено в [28] из измерений оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  в FeSi в широком спектральном интервале 50–25000 см<sup>-1</sup>. Тогда для состояний многочастичного резонанса на уровне Ферми (см. вставку на рис. 14) из приведенных значений параметров  $m_n^*$  и  $m_p^*$  и поведения их отношения  $m_n^*/m_p^* = f(T)$  (см. рис. 12б) получим оценку сверху для эффективной массы спиновых поляронов при низких температурах:  $m_{sp}^* \leq 100m_0$ . Подчеркнем, что аналогичные полученным выше значения времени релаксации  $\langle\tau_{e-ph}\rangle$  могут быть найдены при использовании для оценок ширины линии рассеяния поляризованных нейтронов в FeSi:  $\Gamma \approx 1/\langle\tau_{e-ph}\rangle \approx 3-4$  мэВ [29]. Далее, воспользовавшись для радиуса локализации спин-поляронного состояния  $a_p$  известным соотношением [30]

$$a_p = \hbar / \sqrt{2E_p m_{sp}^*} \quad (8)$$

и определенными ранее значениями глубины полярной ямы  $E_p \approx 6$  мэВ и массы спинового полярона  $m_{sp}^* \approx 100m_0$ , имеем  $a_p \approx 5$  Å. С другой стороны, величину  $a_p$  в окрестности перехода металл–изолятатор можно вычислить из соотношения (см., например, [22])

$$a_p \approx a (2\pi U/2D)^{1/5} \approx 1.5a \approx 4.2$$
 Å,  $(9)$

где для параметра  $a$  использовалось значение  $r_{Fe-Fe} \approx 2.75$  Å, отвечающее кратчайшему расстоянию между атомами железа в кристаллической структуре FeSi. Обе независимые оценки радиуса локализации спинового полярона в моносилициде железа довольно хорошо согласуются между собой, что несомненно также свидетельствует в пользу предложенной интерпретации.

6) *Формирование основного состояния в системе спиновых поляронов в FeSi.* С понижением температуры в интервале  $T \leq 15$  К с учетом ферромагнитного характера обменных взаимодействий

вследствие спиновых флуктуаций в FeSi [29] следует ожидать обменного усиления намагниченности за счет поляризации Fe-центров в окрестности каждого носителя заряда в верхней хаббардовской полосе. При этом в случае моносилицида железа при низких температурах можно ожидать формирования «ферромагнитных микрообластей» размером примерно 10 Å, характеризующихся отличным от нуля суммарным магнитным моментом. Концентрация таких магнитных частиц оказывается непосредственно связанный с концентрацией спиновых поляронов в FeSi и для данного монокристалла по порядку величины составляет  $10^{17}$  см<sup>-3</sup>. В такой ситуации легко находит объяснение отмеченное выше количественное несоответствие амплитуды эффектов от нормальной и аномальной (магнитной) составляющих низкотемпературных намагниченности и коэффициента Холла (рис. 1а, б). Действительно, в условиях обменного усиления намагниченности в непосредственной окрестности носителя заряда в верхней хаббардовской полосе следует ожидать возникновения и усиления аномальной составляющей коэффициента Холла, тогда как вклад в интегральную намагниченность образца от «ферромагнитных микрообластей» размером примерно 10 Å и концентрацией приблизительно  $10^{17}$  см<sup>-3</sup> оказывается значительно менее существенным.

Таким образом, с возникновением магнитных микрообластей в матрице моносилицида железа при низких температурах,  $T < T_c \approx 15$  К следует ожидать появления локализованных магнитных моментов в FeSi. Отметим, что во многом похожая ситуация имеет место для миктомагнетиков (спиновых стекол) [14] в суперпарамагнитном состоянии, отвечающем образованию суммарного магнитного момента для каждого кластера из магнитных атомов в немагнитной матрице и реализующемся непосредственно перед переходом в фазу спинового стекла. В то же время природа возникновения суммарного локализованного магнитного момента микрообласти в том и в другом случаях может иметь существенные различия. В случае FeSi, на наш взгляд, именно с формированием локализованных магнитных моментов таких магнитных частиц может быть связано появление дополнительного вклада в намагниченность (излом на кривых  $M(T)$  при  $T \approx 15$  К на рис. 13б). Кроме того, с появлением корреляций в спиновых флуктуациях и изменением характеристик спиновых поляронов в окрестности  $T_c \approx 15$  К следует связать резкое уменьшение постоянных положительных значений коэффициентов Холла и термоэдс [10, 11] (см., например, рис. 12б, в) в указан-

ном интервале температур. В пользу справедливости предположения об образовании ферромагнитных частиц непосредственно из спиновых поляронов может свидетельствовать также совпадение величины энергии активации процессов перемагничивания системы магнитных микрообластей в матрице FeSi,  $T_0 \approx 65.6$  К  $\approx 6$  мэВ, полученной по температурной зависимости параметра  $\Delta R_{pyst}$  (см. вставку на рис. 6), с величиной  $E_p \approx 6$  мэВ (рис. 14).

При гелиевых температурах величина  $\mu_{eff}$  локализованных магнитных моментов в FeSi может быть получена, например, из анализа кривых магнитосопротивления (рис. 10). При использовании соотношения (1) для зависимостей, приведенных на рис. 10, могут быть найдены следующие значения эффективного магнитного момента ферромагнитных микрообластей, образующихся в непосредственной окрестности носителя заряда:  $\mu_{eff}(4.2$  К)  $\approx 5.3\mu_B$  и  $\mu_{eff}(1.73$  К)  $\approx 3.9\mu_B$ . Очевидно, приведенные значения  $\mu_{eff}$  следует рассматривать как предварительные. В то же время полученные величины  $\mu_{eff}$  в сочетании с результатами предварительного анализа, основанного на разделении паулиевского и бриллюэновского низкотемпературных вкладов в намагниченность  $M(H, T)$  (рис. 13б, а также данные [12] и [16]), позволяют сделать вывод о существенно немонотонном изменении эффективного момента магнитных частиц  $\mu_{eff}(T)$  с максимумом в окрестности  $T \approx T_m \approx 7$  К. Нарастание  $\mu_{eff}$  магнитных микрообластей в матрице FeSi до значений  $\sim (6-8)\mu_B$  с понижением температуры от  $T \approx T_c \approx 15$  К сменяется уменьшением эффективного магнитного момента при  $T \leq T_m \approx 7$  К, что, по-видимому, может свидетельствовать о «включении» взаимодействия между магнитными спиновыми поляронами. На наш взгляд, характер изменения параметра  $\mu_{eff}(T)$ , наряду с особенностями низкотемпературного поведения (форма кривой гистерезиса, эффекты памяти, релаксационные явления и др.), свидетельствует в пользу реализации миктомагнитного типа состояния (спинового стекла) в системе локализованных магнитных моментов магнитных микрообластей в матрице FeSi при  $T \leq T_m \approx 7$  К.

В то же время для моносилицида железа следует ожидать значительно более сложного поведения физических параметров, поскольку магнитные микрообласти в этом случае не занимают строго фиксированных положений в матрице FeSi, а, напротив, играют существенную роль в процессах переноса заряда при низких температурах. В такой ситуации, наряду с появлением в FeSi аномалий физи-

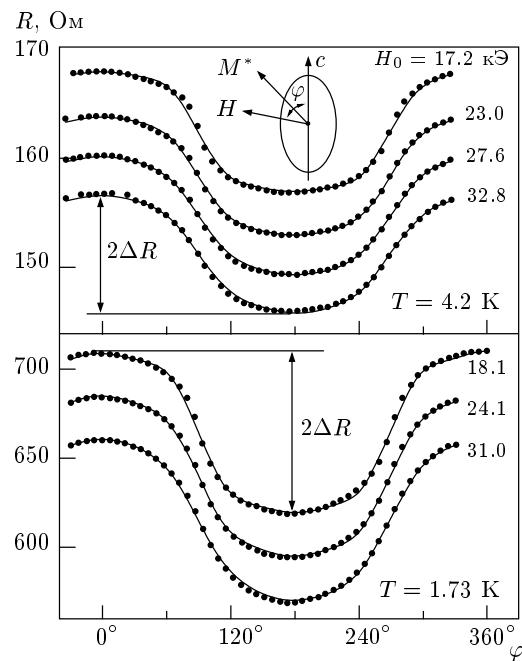
ческих свойств, характерных для миктомагнитных систем, нельзя исключить также возможности формирования новых пространственно-организованных магнитных структур, магнитных ориентационных переходов и др. По нашему мнению, именно с магнитным переходом в структуре магнитных спиновых поляронов следует связать особенности, возникающие в FeSi в магнитном поле  $H \geq 35$  кЭ на угловых зависимостях холловского сопротивления (рис. 2б), а также на полевых и угловых зависимостях магнитосопротивления (рис. 10, 11) при гелиевой температуре.

Таким образом, в рамках предложенной интерпретации низкотемпературные аномалии поведения холловского сопротивления (рис. 1-9) и магнитосопротивления (рис. 10, 11) следует связать с процессами перемагничивания в системе ферромагнитных микрообластей — магнитных спиновых поляронов малой концентрации  $\sim 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, образованных в режиме когерентных хаббардовских корреляций в кристаллической структуре моносилицида железа. При этом для количественного описания эффекта Холла и разделения вкладов в  $R_H(H, T)$  в FeSi, на наш взгляд, адекватной в первом приближении оказывается модель двух групп носителей заряда, в которой, наряду с обычными вкладами в коэффициент Холла от носителей заряда двух типов, учитывается также эффект обменного усиления вклада от электронов. В такой ситуации нормальная составляющая в холловском сопротивлении отвечает дырочно-му и электронному вкладам, линейно зависящим от магнитного поля, тогда как ферромагнитный характер микрообластей, сформированных в окрестности электронов, обусловливает появление аномального вклада, пропорционального локальной намагниченности микрообласти  $M^*$ . В результате для холловского сопротивления при условии  $\omega\tau \ll 1$  имеем

$$Rd \approx -R_H \frac{\sigma_p - \sigma_n}{\sigma} H + 4\pi R_H \left( \frac{\sigma_n}{\sigma} \right)^2 M^*, \quad (10)$$

где  $R_H = -R_{Hn} = R_{Hp} = (pe)^{-1}$ ,  $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$  — суммарная проводимость,  $p, e$  — концентрации соответственно дырок и электронов,  $d$  — толщина образца. Как уже отмечалось, используемое соотношение (10) является приближенным и представляет собой обычную форму записи для нормальной и аномальной составляющих  $R_\Sigma(H, T) = R_H^n H + R_H^a M(H, T)$  с учетом особенностей используемой модели.

Для набора однодоменных эллипсоидальных ферромагнитных частиц в магнитном поле  $H \gg \gg H_a = 2K_u/M^*$ , где  $H_a$  — поле анизотропии,  $K_u$  —



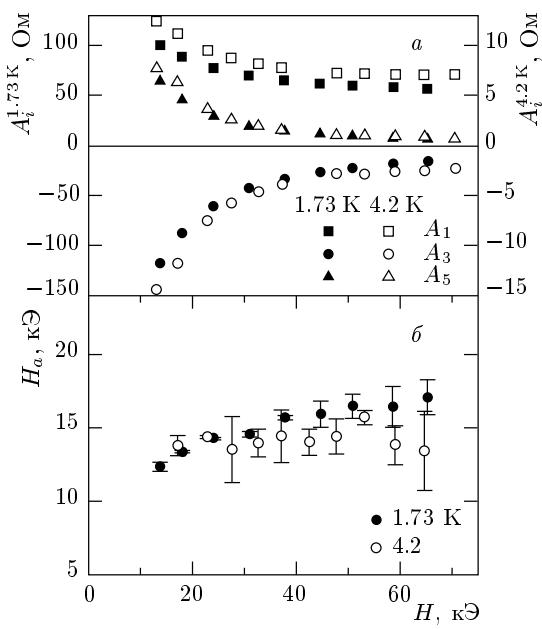
**Рис. 15.** Аппроксимация угловых зависимостей холловского сопротивления  $R(\varphi)$  в FeSi при гелиевых температурах в рамках модели одноосного ферромагнетика (см. соотношение (12)). В верхней части рисунка схематически показано взаимное расположение векторов  $c$ ,  $H$ ,  $M^*$  для эллипсоидальной ферромагнитной частицы

константа магнитной анизотропии, при вращении вектора  $\mathbf{H}$  следует ожидать скачкообразного изменения локальной намагниченности в зависимости от угла поворота  $\varphi$ . В случае, когда ось вращения совпадает с осью  $\mathbf{a}$ , а  $\mathbf{c}$  является осью легкого намагничивания (см. схему на вставке к рис. 15), известные соотношения для направляющих косинусов векторов  $\mathbf{H}$  и  $\mathbf{M}^*$  (см., например, [31]) позволяют переписать выражение (10) в виде

$$R \approx -\frac{R_H}{d} \frac{\sigma_p - \sigma_n}{\sigma} H \cos \varphi + 4\pi \frac{R_H}{d} \left(\frac{\sigma_n}{\sigma}\right)^2 M_0^* \times \\ \times \left[ (1+k+k^2) \cos \varphi - \left(k - \frac{7}{2}k^2\right) \times \right. \\ \left. \times \cos^3 \varphi + \frac{5}{2}k^2 \cos^5 \varphi \right], \quad (11)$$

где  $k = 2K_u/M^*H < 1$ . Структура соотношения (11) позволяет анализировать члены при нечетных степенях  $\cos \varphi$ :

$$R(\varphi) \approx A_1(H, T) \cos \varphi + A_3(H, T) \cos^3 \varphi + \\ + A_5(H, T) \cos^5 \varphi. \quad (12)$$



**Рис. 16.** а) Полевые зависимости коэффициентов  $A_i$  (см. соотношения (12), (13)) при гелиевых температурах в FeSi. б) Определение величины поля анизотропии  $H_a = 2K_u/M_0^*$  в FeSi при гелиевых температурах

На рисунке 15 в качестве примера аппроксимации в рамках соотношения (12) семейства экспериментальных кривых в FeSi (рис. 2, 3) приведены аналитические зависимости  $R(\varphi)$ , найденные для нескольких значений  $H$  в интервале 15–35 кЭ. Коэффициенты  $A_i(H, T)$  аппроксимации (12), полученные в рамках используемой процедуры, показаны на рис. 16а. Далее, сравнивая между собой выражения (11) и (12), находим соотношения для  $A_i(H, T)$ :

$$A_1(H, T) = -\frac{R_H}{d} \frac{\sigma_p - \sigma_n}{\sigma} H + \\ + 4\pi \frac{R_H}{d} \left(\frac{\sigma_n}{\sigma}\right)^2 M_0^* (1+k+k^2), \quad (13) \\ A_3(H, T) = -4\pi \frac{R_H}{d} \left(\frac{\sigma_n}{\sigma}\right)^2 M_0^* \left(k + \frac{7}{2}k^2\right), \\ A_5(H, T) = 4\pi \frac{R_H}{d} \left(\frac{\sigma_n}{\sigma}\right)^2 M_0^* \frac{5}{2}k^2.$$

Как легко видеть, непосредственно по отношению коэффициентов  $A_3$  и  $A_5$  в (13) может быть оценено поле анизотропии  $H_a(H)$  ферромагнитных микробластей в FeSi:

$$H_a(H) = -H \left/ \left( \frac{5}{2} \frac{A_3}{A_5} + \frac{7}{2} \right) \right. \quad (14)$$

Полученное значение  $H_a \approx 15$  кЭ (см. рис. 16б) практи-

тически сохраняется постоянным в широком интервале магнитных полей,  $H \leq 70$  кЭ, при гелиевых температурах 1.7–4.2 К. Поскольку сумма коэффициентов  $A_1$ ,  $A_3$  и  $A_5$  в (13) имеет вид

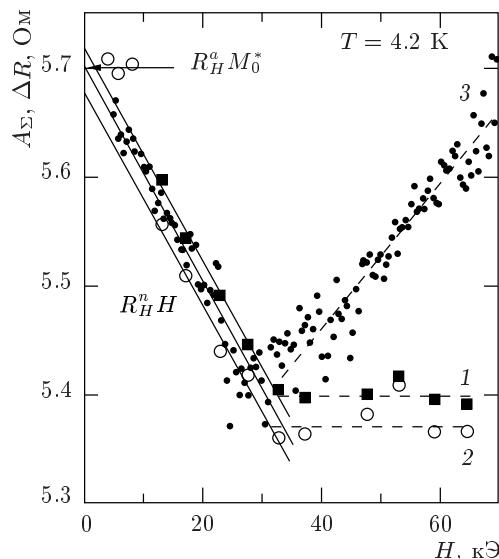
$$A_1 + A_3 + A_5 = 4\pi \frac{R_H}{d} \left( \frac{\sigma_n}{\sigma} \right)^2 M_0^* - \frac{R_H}{d} \frac{\sigma_p - \sigma_n}{\sigma} H, \quad (15)$$

процедура разделения нормальной и аномальной составляющих в холловском сопротивлении в рамках используемой модели сводится к нахождению постоянного члена и коэффициента при линейном члене для зависимости  $A_\Sigma = A_1 + A_3 + A_5 = f(H)$ . Полевая зависимость параметра  $A_\Sigma$  представлена на рис. 17. Для сравнения на том же рисунке представлен результат оценки суммарного вклада в холловское сопротивление, полученный непосредственно по угловым зависимостям  $R(\varphi)$  (кривая 2). При этом параметр  $\Delta R$  представляет собой полуразность вида  $\Delta R = (1/2)(R(0^\circ) - R(180^\circ))$  (см. обозначения на рис. 15). На рисунке 17 приведена также полевая зависимость холловского сопротивления, полученная методом регистрации напряжения с холловских контактов в процессе развертки магнитного поля для двух противоположных ориентаций вектора  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$  (кривая 3 на рис. 17). Легко видеть, что оценки нормального и аномального вкладов в холловское сопротивления FeSi в рамках используемой модели (11)–(15) в интервале  $H \leq 35$  кЭ с хорошей точностью совпадают с величинами  $R_H^n H$  и  $R_H^a M_0^*$ , полученными с применением обычных способов разделения составляющих в  $R_\Sigma(H, T)$ . Приравнивая вклады в (15), оценим с точностью до множителя  $(\sigma_p/\sigma_n)^2 - 1 \sim 1$  величину обменного поля:

$$H_0^* = 4\pi M_0^* \approx H(R_H = 0) \approx 500 \text{ кЭ}.$$

Полученное значение  $H_0^*$  ферромагнитных микрообластей оказывается значительно меньше обменных полей в ферромагнитных металлах. Так, для железа оценки молекулярного поля приводят к значениям  $H_0^*(\text{Fe}) \approx 1.1 \cdot 10^4$  кЭ [32]. В то же время столь значительное уменьшение величины  $H_0^*$  для магнитных микрообластей в FeSi представляется вполне естественным при учете соотношения размеров однодоменных областей и радиуса корреляции спиновых флуктуаций в этих материалах [6].

Отметим в заключение, что предложенный в настоящей работе подход к интерпретации низкотемпературных аномалий физических свойств моносилицида железа в рамках модели Хаббарда, по-видимому, позволяет достичь определенного уровня понимания физических процессов и явлений в этом узкозонном полупроводнике с сильными квазичастичными взаимодействиями. При этом в режиме сильных хаббардовских корреляций спин-поляронное описание оказывается вполне эффективным как для выяснения природы существенного «утяжеления» носителей заряда и перенормировки плотности электронных состояний на уровне Ферми в FeSi, так и при анализе механизмов формирования слабомагнитного основного состояния моносилицида железа при гелиевых температурах. С этой точки зрения переход к когерентному режиму спиновых флуктуаций, связанному с образованием в матрице моносилицида железа магнитных микрообластей размером  $\sim 10 \text{ \AA}$  при понижении температуры в интервале  $T < T_c \approx 15$  К, оказывается в целом подобен суперпарамагнитному поведению магнитных металлических сплавов (спиновых стекол), причем вслед за формированием локализованных магнитных моментов «ферромагнитных микрообластей», по-видимому, наблюдается переход непосредственно в состояние с замороженными моментами при  $T_m \approx 7$  К. Следует особо подчеркнуть, что изучение когерентных эффектов в системе спиновых поляронов низкой плотности ( $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) оказывается возможным



**Рис. 17.** К процедуре разделения нормального и аномального вкладов в коэффициент Холла. Полевые зависимости суммы коэффициентов  $A_1 + A_3 + A_5$  (1) (см. соотношения (12) и (15)) и полной амплитуды  $\Delta R$ , найденной по результатам измерений угловых (2) и полевых (3) зависимостей холловского сопротивления при гелиевой температуре

лишь на монокристаллических образцах FeSi высокого качества. Приведенные выше количественные оценки параметров модели и микроскопических характеристик спиновых поляронов оказываются довольно реалистичными. В то же время для более детального выяснения вопроса о природе основного состояния FeSi требуется проведение низкотемпературных измерений квазиоптических спектров в дальнем ИК-диапазоне ( $\leq 50 \text{ см}^{-1}$ ) в сочетании с прецизионными измерениями магнитных свойств монокристаллического моносилицида железа при гелиевых и промежуточных температурах в сильных магнитных полях до 500 кЭ.

Авторы признательны А. А. Волкову, Б. П. Горшунову и М. Дресселю за полезные обсуждения и А. А. Пронину за помощь в измерениях. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 98-02-17163 и 99-02-16067), программ Министерства науки Российской Федерации «Фундаментальная спектроскопия» и «Физика микроволн», а также международных проектов INTAS 96-451 и Copernicus EBR IC15 CT98 0812.

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. Aeppli and Z. Fisk, *Comments Cond. Mat. Phys.* **16**, 155 (1992).
2. Д. И. Хомский, УФН **29**, 443 (1979).
3. Z. Fisk, J. L. Sarrao, J. D. Thompson et al., *Physica B* **206–207**, 798 (1995).
4. C. M. Varma, *Phys. Rev. B* **50**, 9952 (1994).
5. P. Wachter, *Intermediate valence in heavy fermions*, in *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, Vol. 19, ed. by K. A. Gschneidner, Jr., L. Eyring, G. H. Lander, G. R. Choppin, Elsevier Science B.V. (1994).
6. Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).
7. Н. Е. Случанко, А. А. Волков, В. В. Глушкин и др., ЖЭТФ **115**, 970 (1999).
8. N. E. Sluchanko, V. V. Glushkov, B. P. Gorshunov et al., *Phys. Rev. B* **61**, 9906 (2000).
9. K. A. Kikoin and A. S. Mishchenko, *J. Phys. Cond. Mat.* **7**, 307 (1995).
10. Н. Е. Случанко, В. В. Глушкин, С. В. Демишев и др., *Письма в ЖЭТФ* **68**, 774 (1998).
11. N. E. Sluchanko, V. V. Glushkov, S. V. Demishev et al., *Europhys. Lett.* **51**, 557 (2000).
12. S. Paschen, E. Felder, M. A. Chernikov et al., *Phys. Rev. B* **56**, 12916 (1997).
13. N. E. Sluchanko, V. V. Glushkov, S. V. Demishev et al., *Physica B* **284–288**, 1179 (2000).
14. P. A. Beck, *Progr. Mater. Science* **23**, 1 (1978).
15. J. C. Cooley, M. C. Aronson, A. Lacerda et al., *Phys. Rev. B* **52**, 7322 (1995).
16. E. Arushanov, M. Respaud, J. M. Broto et al., *Phys. Rev. B* **55**, 8056 (1997).
17. M. J. Rozenberg, G. Kotliar, and H. Kajueter, *Phys. Rev. B* **54**, 8452 (1996).
18. Ph. Nozieres, *Euror. Phys. J. B* **6**, 447 (1998).
19. G. Kotliar, *Euror. Phys. J. B* **11**, 27 (1999).
20. V. Jaccarino, G. K. Wertheim, J. H. Wernick et al., *Phys. Rev.* **160**, 476 (1967).
21. S. Takagi, H. Yasuoka, S. Ogawa, and J. H. Wernick, *J. Phys. Soc. Jap.* **50**, 2539 (1981).
22. P. M. Chaikin, *Organic Superconductivity*, ed. by V. Z. Kresin and W. A. Little, Plenum Press, New York (1990).
23. Н. Ф. Мотт, *Переходы металла–изолятор*, Наука, Москва (1979).
24. L. Matteiss and D. Hamann, *Phys. Rev. B* **47**, 13114 (1993).
25. V. V. Moshchalkov, *Physica B* **163**, 59 (1990).
26. M. Fath, J. Aarts, A. A. Menovsky et al., *Phys. Rev. B* **58**, 15483 (1998).
27. A. Damascelli, K. Schulte, D. van der Marel et al., *Phys. Rev. B* **55**, R4863 (1997).
28. Z. Schlesinger, Z. Fisk, Hai-Tao Zhang et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1748 (1993).
29. K. Tajima, Y. Endoh, J. E. Fischer, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **38**, 6954 (1988).
30. В. Л. Бонч-Бруевич, И. П. Зягин, Р. Кайпер и др., *Электронная теория неупорядоченных полупроводников*, Наука, Москва (1981).
31. С. Тикадзути, *Физика ферромагнетизма*, ч. 2, Мир, Москва (1987).
32. С. Тикадзути, *Физика ферромагнетизма*, ч. 1, Мир, Москва (1983).