УДК 538.953

ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В УСЛОВИЯХ САМОРАЗОГРЕВА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ (НА ПРИМЕРЕ МОНОСИЛИЦИДА ЖЕЛЕЗА)

Андреева А.Г., Волков А.Г., Повзнер А.А., Шумихина К.А., Веревочников А.В.

ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, e-mail: a_g_andre@mail.ru

В работе на основе спин-флуктуационной теории с использованием обобщенной модели *sp*, *d*-электронов узкозонных полупроводников теоретически исследованы неравновесные электронные фазовые переходы в магнитных полупроводниках (на примере моносилицида железа). Полученная система уравнений позволяет корректно описать поведение магнитных полупроводниковых соединений, находящихся в условиях саморазогрева под действием сильных электрических полей. С учетом влияния эффекта саморазогрева на спиновые флуктуации, исследована зависимость плотности электронных состояний *sp*, *d*-электронов от приложенного к образцу напряжения при разных температурах. Показано, что выделение тепла, вследствие протекания тока, обусловливает рост амплитуды спиновых флуктуаций и расщепление ими электронных спектров, что в свою очередь ведет к схлопыванию энергетической щели и металлизации образца при значительно более низких температурах окружающей среды.

Ключевые слова: магнитные полупроводники, спиновые флуктуации, плотность электронных состояний, переход полупроводник – металл

DENSITY OF ELECTRONIC STATES OF MAGNETIC SEMICONDUCTORS UNDER SELF-HEATING AT THE INFLUENCE OF EXTERNAL ELECTRIC FIELDS (EXEMPLIFIED WITH IRON MONOSILICIDE)

Andreeva A.G., Volkov A.G., Povzner A.A., Shumikhina K.A., Verevochnikov A.V.

Ural Federal University named after First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, e-mail: a_g_andre@mail.ru

Nonequilibrium electron transitions in magnetic semiconductors exemplified with iron monosilicide were investigated in the work with using spin-fluctuation theory. The generalized model of sp, d- electrons of the narrow-band semiconductors was used. The coupled equations, which provide a possibility of describing the behavior of magnetic semiconductors under self-heating at the influence of strong electric fields, were obtained. We investigated the influence of a self-heating effect on the spin fluctuations and electronic density of sp, d- electrons states of magnetic semiconductors. The dependence of the internal sample temperature on applied voltage was analysed. It is shown that the heat released by current flow gives rise to a growth in amplitude of spin fluctuations and the attendant splitting of electronic spectra, which brings to the gap closure. It was established that the metallization sample should be at lower ambient temperatures. The nonequilibrium electronic transformations considered in this work are the theoretical base for development of devises providing the protection of electronic circuits from electromagnetic pulses.

Keywords: spin fluctuations, magnetic semiconductor, the density of electronic states, transitions semiconductor-metal

Известно, что в формировании электронных свойств магнитных полупроводников важную роль играют флуктуации спиновой плотности [2–5]. С помощью спин-флуктуационной теории полупроводников и полуметаллических соединений переходных металлов авторы [2] показали, что исходный электронный спектр расщепляется флуктуирующими обменными полями, при этом рост с температурой амплитуды спиновых флуктуаций в рассматриваемой системе электронов приводит к подавлению щели не только в *d*-, но и в *sp*-зонах.

Однако предложенный подход позволяет описать только равновесные электронные превращения в магнитных полупроводниках [2, 6, 7], которые отличаются плавным температурным возрастанием электропроводности, сопровождаемым формированием промежуточного состояния с исчезающе малым значением ТКС, а в сильных электрических полях электронный фазовый переход полупроводник–металл носит неравновесный характер.

В данной работе развитая ранее спин-флуктуационная теория дополняется учетом влияния на флуктуации спиновой плотности внешних электрических полей (за счет явления саморазогрева). При этом учитывается, что внутренняя температура полупроводника T', находящегося в условиях саморазогрева, зависит от плотности тока j и приложенной разности потенциалов $\Delta\varphi$, и определяется из условия динамического равновесия

$$j\Delta\phi = \frac{2}{h}\lambda(T'-T); \qquad (1)$$

здесь T – температура окружающей среды, отличная от внутренней температуры образца T', λ – коэффициент теплопроводно-

сти полупроводника, постоянный по всей толщине образца *h*.

Используя условие электронейтральности, показано, что плотность состояний как *sp*-, так и *d*-электронов претерпевает спин-флуктуационные перенормировки и в отсутствие ферромагнитного упорядочения имеет вид

$$g^{(l)}(\varepsilon)=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=\pm1} g_0^{(l)}\left(\varepsilon+\alpha\,\xi_l(T,\Delta\phi)\right), \quad (2)$$

где $g_0^{(l)}(\varepsilon)$ – плотность состояний невзаимодействующих *sp*-($l=s$) или *d*-($l=d$) электронов, $\xi_l(T, \Delta\varphi)$ – величина спин-флуктуационного расщепления энергетического спектра *sp*- или *d*-электронов, зависящая (в условиях саморазогрева) от температуры (T) и приложенной разности потенциалов ($\Delta\varphi$).

С учетом полученных в [2] результатов для $\xi_l(T')$ и условия (1) имеем, что амплитуда спиновых флуктуаций становится зависящей от приложенного напряжения и плотности тока, текущего по образцу:

$$\xi_s(T,\Delta\phi)=\left(\frac{J^2}{U}\right)b\left(T+j\Delta\phi\frac{h}{2\lambda}\right)D_0^{-1/2}(D_0^{-1}+a)^{-1/2}; \quad (3)$$

$$\xi_d(T,\Delta\phi)=Ub\left(T+j\Delta\phi\frac{h}{2\lambda}\right)D_0^{-1/2}(D_0^{-1}+a)^{-1/2}, \quad (4)$$

где U – параметр внутриатомного кулоновского отталкивания *d*-электронов, J – параметры *sp*, *d*-обменного взаимодействия, D_0 – фактор обменного усиления однородной магнитной восприимчивости *d*-электронов, a и b – коэффициенты, определяющиеся из нейтронографических данных или из данных магнитных измерений [2].

Последнее приводит к трансформации электронного спектра при изменении Δj и j, а также к зависимостям от напряжения и плотности тока других физических величин (в частности фактора обменного усиления однородной магнитной восприимчивости *d*-электронов – D_0, химического потенциала – μ, плотности электронных состояний, ширины запрещенной зоны – *Eg* и т.д.). При этом в отличие от обычных полупроводников, влияние напряжения и плотности тока на свойства магнитных полупроводников оказывается значительно усиленным из-за большой величины фактора обменного усиления.

Саморазогрев образца ведет не только к тривиальному увеличению термически активированных носителей тока, но и перестройке всего электронного спектра и, как следствие, к еще более сильному изменению плотности тока. Для самосогласованного описания зависимости плотности электронных состояний *sp*,*d*-электронов от приложенного к образцу напряжения почти магнитных полупроводников система уравнений (1)–(4) дополняется уравнениями для плотности тока и теплопроводности

$$\vec{j}=\sum\nolimits_{l,\alpha}\vec{j}_{l,\alpha};$$

$$\vec{j}_{l,\alpha}=e\int \vec{v}_{\vec{k},l}f(\varepsilon_{\vec{k},l}-\alpha\xi_l\left(T,\Delta\phi\right)-\mu-e\Delta\phi v_{\vec{k},l}\tau_{\vec{k},l}/L\right)d\vec{k}; \quad (5)$$

здесь $\vec{j}_{l,\alpha}$ – плотности тока каждой из групп *sp*-($l=s$) или *d*-($l=d$) электронов, $\varepsilon_{\vec{k},l}$ – энергия электронов с квазиимпульсом $\vec{k}$; $v_{\vec{k},l}$ – проекция скорости электронов на направление электрического поля, $\alpha=\pm1$, $\tau_{k,l}\sim k^{2r-1}\left(\frac{\partial\varepsilon_{\vec{k},l}}{\partial\vec{k}}\right)^2$ – время релаксации; $f_F(\varepsilon-\mu)$ – функция Ферми-Дирака; μ – химический потенциал, определяющийся из условия электронейтральности; r – параметр, равный 3/2 в случае рассеяния электронов на фононах;

$$\lambda=\lambda_{\text{фон}}+\lambda_d, \quad (6)$$

где $\lambda=\lambda_{\text{фон}}$ – фононный вклад в теплопроводность; λ_d – вклад *d*-электронов, определяющийся согласно закону Видемана-Франса как произведение теплоемкости на проводимость, а выражение для проводимости возьмем из работы [1]. Таким образом, теплопроводность *d*-электронов может быть записана в виде

$$\lambda_d=T'C_{0e}\sum_{l,\alpha}4e^{-2}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_l(\varepsilon)(-\partial f_F(\varepsilon-\alpha\xi_l(T,\Delta\phi)-\mu)/\partial\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{3}; \quad (7)$$

$$\phi_l(\varepsilon_{\vec{k},l})=\tau_l(\varepsilon)\vec{k}\,(\varepsilon)\,\partial\vec{k}\,(\varepsilon)\,/\partial\varepsilon_{\vec{k},l};$$

здесь $f_F(\varepsilon - \mu)$ – функция Ферми-Дирака; μ – химический потенциал, определяющийся из условия электронейтральности; C_{0e} – одноэлектронная теплоемкость, перенормированная флуктуациями

$$C_{0e}(\xi_l, T') = \sum_{\alpha,} \int_{l-\infty}^{\infty} g_l(\varepsilon + \alpha\xi_l) \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \mu) \left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T'} + \frac{\partial \mu}{\partial T'} + \left[\alpha + \frac{\partial \mu}{\partial \xi_l} \right] \frac{\partial \xi_l}{\partial T'} \right\} d\varepsilon. \quad (8)$$

Система уравнений (1)–(8) позволяет корректно описать плотность электронных состояний магнитных полупроводниковых соединений, находящихся в условиях саморазогрева под действием сильных электрических полей. Эффект саморазогрева будет дополнительно усиливаться сужением энергетической щели в спектре таких полупроводников. Однако аналитическое решение этой системы уравнений в общем случае невозможно. Поэтому данная система была решена численно на примере FeSi. При вычислении плотности электронных состояний использовались значения спин-флуктуационных параметров $a = 0$ и $b = 10/U$, значение sp,d-обмена– $J = 0{,}1U$, найденные в [2] из анализа нейтронографических данных.

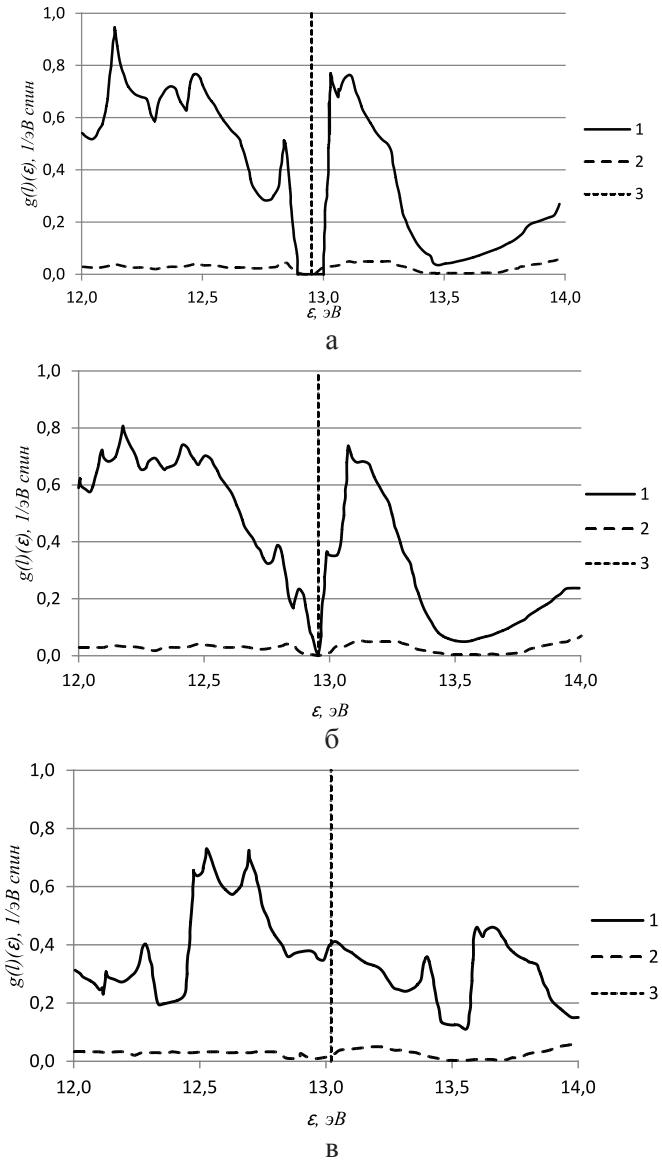

Рис. 1. Плотность электронных состояний FeSi:
1 – соответствует d-электронам; 2 – sp-электронам; 3 – положение химического потенциала.
Температура окружающей среды T = 50 K: а – Δφ = 0В, саморазогрев отсутствует;
б – Δφ = 0,18В; в – Δφ = 0,23В

В работе [2] показано, что рост температуры исследуемого соединения приводит к наблюдаемому на эксперименте при $T' \sim 100$ К электронному фазовому переходу из полупроводникового в металлическое состояние, который обусловлен ростом тепловых спиновых флуктуаций, ведущих к «схлопыванию» энергетической щели в спектре *d*-электронов и смещению химического потенциала в область делокализованных состояний. В свою очередь химический потенциал (из-за несимметричности *d*-зон) начинает смещаться влево по шкале энергий и при $T' \approx 200$ *K* попадает в валентную зону *sp*-электронов, вследствие чего состояние последних также становится металлическим. Таким образом, при внутренних температурах образца ниже 100 К проводимость моносилицида железа формируется только за счет активационного механизма, в интервале от 100 и до 200 К – металлического и активационного одновременно, а выше 200 К – только металлического [2].

Анализ результатов численных расчетов плотности электронных состояний *sp*,*d*-электронов показывает, что под действием внешних электрических полей металлизация образца происходит при значительно более низких температурах окружающей среды.

Графики плотности электронных состояний FeSi, находящегося в условиях саморазогрева под действием электрических полей, приведены на рис. 1 и 2. В отсутствии внешнего электрического поля при температуре окружающей среды $T = 50$ *K* в спектре как *d*-, так и *sp*-электронов имеется энергетическая щель (рис. 1, а) и реализуется активационная проводимость, что согласуется с экспериментом и работой [2, 7]. Рост напряжения, приложенного к образцу, приводит к постепенному сужению энергетической щели в спектре *d*-электронов. Из рис. 1, б видно, что при температуре окружающей среды $T = 50$ *K* энергетическая щель исчезает уже при значении приложенного напряжения $\Delta\varphi \approx 0{,}18$ В. Дальнейший рост напряжения приводит к схлопыванию энергетической щели и в спектре *sp*-электронов – при $\Delta\varphi \approx 0{,}23$ В, а также перестройке всего электронного спектра (рис. 1, в).

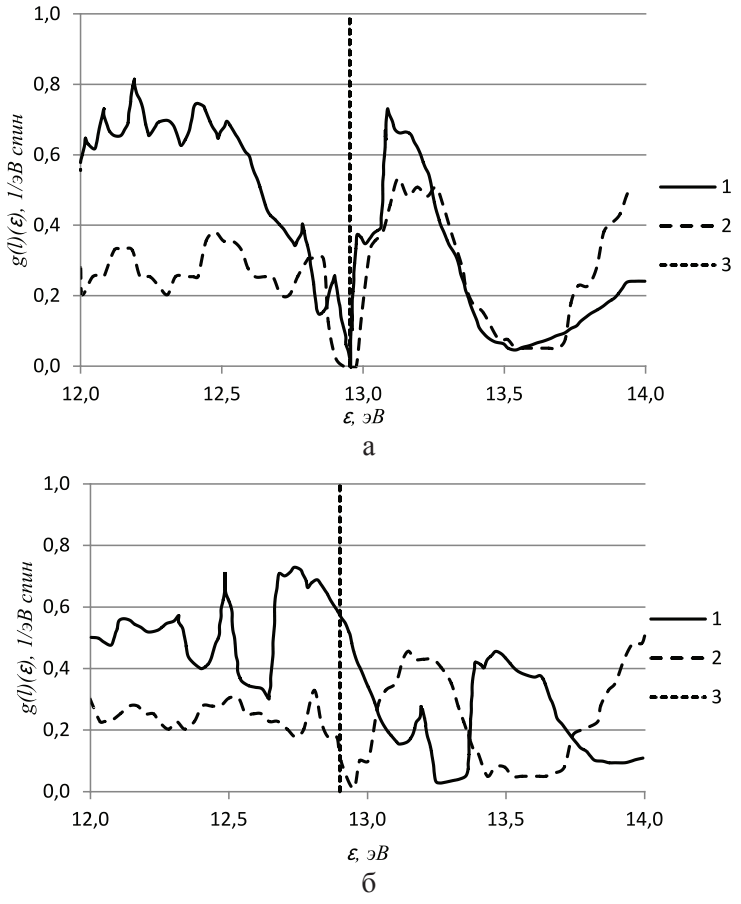

Рис. 2. Плотность электронных состояний FeSi:
1 – соответствует d-электронам; 2 – sp-электронам, умноженная на 10; 3 – положение химического потенциала. Температура окружающей среды T = 100 K:
а – Δφ = 0B, саморазогрев отсутствует; б – Δφ = 0,14B

Рис. 2 демонстрирует плотность электронных состояний FeSi, находящегося в условиях саморазогрева под действием электрических полей при температуре окружающей среды $T = 100\ K$. Как известно, при этой температуре состояние *d*-электронов сразу является металлическим (рис. 2, а), щель в *sp*-спектре не исчезает. С увеличением внешнего электрического поля, вследствие саморазогрева образца, химический потенциал начинает смещаться влево по шкале энергий и при $\Delta\varphi \approx 0{,}14$ В попадает в валентную зону *sp*-электронов (рис. 2,б), что ведет к тому, что состояние *sp*-электронов металлизируется. При этом энергетическая щель в спектре *sp*-электронов не исчезает, хотя и продолжает сужаться. Дальнейшее увеличение напряжения до $\Delta\varphi \approx 0{,}16$ В приводит к схлопыванию энергетической щели и в спектре *sp*-электронов. Полученные при этом плотности состояний *d*- и *sp*-электронов имеют такой же вид, как на рис. 1,в, что объясняется совпадением внутренних температур образца (при $T = 50$ K, $\Delta\varphi \approx 0{,}23$ В и $T = 100$ K, $\Delta\varphi \approx 0{,}16$ В).

Таким образом, на основе спин-флуктуационной теории развит подход, позволяющий описать влияние саморазогрева под действием сильных электрических полей на плотность электронных состояний магнитных полупроводников на примере FeSi. Показано, что выделение тепла, вследствие протекания тока, обусловливает рост амплитуды спиновых флуктуаций и расщепление ими электронных спектров, что в свою очередь ведет к схлопыванию энергетической щели.

Список литературы

1. Аношина О.В., Волков А.Г., Повзнер А.А., Ромашова Л.Ф. Концентрационное электронное превращение в слабых зонных магнетиках «FexCo1-xSi и FexMn1-xSi» // Известия вузов. Физика. – 2002. – № 12. – С. 48–54.

2. Волков А.Г., Повзнер А.А., Крюк В.В., Баянкин П.В. Спиновые флуктуации и особенности электронных переходов полупроводник-металл в почти ферромагнитных соединениях переходных металлов // Физика твердого тела. – 1999. – т. 41, вып. 10. – С. 1972.

3. Гельд П.В., Повзнер А.А., Волков А.Г. К теории магнитных и теплофизических свойств моносилицида железа // ДАН СССР. – 1985. – т. 283, № 2. – С. 358–360.

4. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. – М.: Мир, 1988. – 288 с.

5. Повзнер А.А., Волков А.Г., Баянкин П.В. Спиновые флуктуации и электронные переходы полупроводник-металл в моносилицидах железа // Физика твердого тела. – 1998. – т.40, № 8. – С. 1437–1441.

6. Jaccarino V., Wetheim G.K., Wernik J.H., Walker L.R., Arajs C. Paramagnetic escited state of FeSi // Phys.Rev. – 1967. –Vol. 160, № 3. – P. 476–482.

7. Schlesinger Z., Fisk Z., Zhang H.T., Maple M.B., DiTusa J.F., Aeppli G. Unconventional charge gap formation in FeSi // Phys. Rev. Lett. – 1993. – Vol. 71, № 11. – P. 1748–1751.

References

1. Anoshina O.V., Volkov, A.G., Povzner, A.A., Romasheva L.F. Conversion of Fe xCo 1-xSi and Fe xMn 1-xSi weak band magnetic materials caused by the electron concentration // Russian Physics Journal. 2002. Vol. 45, no. 12. pp. 1195–1202.

2. Volkov A.G., Povzner A.A., Kryuk V.V., Bayankin P.V. Spin fluctuations and peculiarities of semiconductor-metal electronic transitions in almost ferromagnetic compounds of transition metals// Physics of the Solid State. 1999. Vol.41, no. 10. pp. 1644–1648.

3. Gel'd P.V., Povzner A.A., Volkov A.G. The theory of magnetic and thermal properties of iron monosilicide // Dok. Akad. Nauk SSSR. 1985. Vol. 283, no. 2, pp. 358.

4. Moriya T. Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism. Mir, Moscow, 1985. 288 p.

5. Povzner A.A., Volkov A.G., Bayankin P.V. Spin fluctuations and electronic semiconductor-metal transitions in iron monosilicide // Physics of the Solid State. 1998. Vol. 40, no. 8, pp. 1305–1309.

6. Jaccarino V., Wetheim G.K., Wernik J.H., Walker L.R., Arajs C. Paramagnetic escited state of FeSi // Phys. Rev. 1967. Vol.160, no. 3. pp. 476–482.

7. Schlesinger Z., Fisk Z., Zhang H.T., Maple M.B., DiTusa J.F., Aeppli G. Unconventional charge gap formation in FeSi // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol.71, no. 11, pp. 1748–1751.

Рецензенты:

Чикова О.А., д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой технологии, ФГБОУ ВПО «Уральский государственный педагогический университет», г. Екатеринбург;

Сидоренко Ф.А., д.ф.-м.н., профессор кафедры физики, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург.

Работа поступила в редакцию 06.03.2014.