Письма в ЖЭТФ, том 49, вып. 10, стр. 557–559 *25 мая 1989 г.*

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ПАРАМАГНЕТИЗМА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

С.А.Бразовский, И.А.Лукьянчук, Р.Р.Рамазашвили мл.

Исследован характер вырождения зонных и локализованных электронных состояний в антиферромагнетике и их поведение в магнитном поле. Найдены особенности g-фактора: на краю магнитной зоны Бриллюэна поперечное поле не снимает вырождение, в то же время локализованные состояния на дефектах оказываются вообще не вырожденными.

Измерения магнитной восприимчивости являются одним из основных методов первичной характеризации электронных свойств материалов. Информация о плотности состояний на уровне Ферми N_F извлекается из восприимчивости Паули χ_P, а концентрация ν локализованных состояний из закона Кюри:

$$\chi_P = g^2 N_F \qquad \chi_C = g^2 \nu / T. \tag{1}$$

Здесь T – температура, g – фактор зеемановского расщепления $\pm\ gH$ (магнетон Бора равен 1). Для слабого спин-орбитального взаимодействия естественно предполагается, что $g = g_0 \approx 2$.

В настоящем сообщении мы показываем, что спиновый парамагнетизм имеет ряд особенностей, если электроны изучаются в антиферромагнитно (АФМ) упорядоченном кристалле. Рассматриваемые эффекты должны проявляться в ряде магнитных полупроводников [1, 2], в том числе: ВТСП соединения типа La_2CuO_4 или $YBa_2Cu_3O_6$ в диэлектрической фазе, квазиодномерные материалы с волной спиновой плотности (ВСП) и другие системы с собственным АФМ состоянием зонных электронов [3]. Мы сформулируем ряд модельно независимых утверждений, которые могут быть строго выведены теоретико-групповым анализом [4], либо получены в модели слабой связи для ВСП.

Рассмотрим сначала *зонные состояния* для возбуждений или для небольших электронных (дырочных) карманов над диэлектрической (хаббардовской) щелью, вызванной АФМ упорядочением. Можно показать, что g-фактор расщепляется на две компоненты $g_\parallel$, $g_\perp$ для разных направлений поля $\mathbf{H} = (H_\parallel, H_\perp)$ относительно вектора АФМ упорядочения $\mathbf{s}$. При этом компоненты g_i всегда различны и вообще говоря зависят от положения волнового вектора $\mathbf{k}$ в зоне Бриллюэна. Функция $g_\parallel(\mathbf{k})$ не имеет вообще говоря особенностей и в модели слабой связи $g_\parallel(\mathbf{k}) = g_0$. Однако $g_\perp(\mathbf{k})$ проявляет характерное свойство: $g_\perp(\mathbf{k}) = 0$ на множестве $\{\mathbf{k}\}$, удовлетворяющих условию: вектора $\mathbf{k}$ и $(\mathbf{k}+\mathbf{Q})$ эквивалентны в симметрии немагнитной решетки. Здесь $\mathbf{Q}$ – вектор магнитного упорядочения; для АФМ типа удвоения периода квадратной решетки $\mathbf{Q} = (\pi, \pm\pi)$. Таким образом $g_\perp(\mathbf{k})$ обращается в нуль на границе магнитной зоны Бриллюэна (МЗБ), т. е. для электронных и дырочных состояний вблизи края щели, открытой образованием АФМ. При отклонении от точки общего положения на границе МЗБ на волновой вектор δk_x или δk_y мы имеем $g_\perp \propto \delta k \xi_0$, а в особых точках с сингулярностью Ван Хова имеем $g_\perp \propto \delta k_x \delta k_y \xi_0^2$, где ξ_0 – длина когерентности для АФМ состояния.

Изложенные результаты элементарно выводятся в модели слабой связи (см., например, [3]) путем диагонализации очевидного гамильтониана

$$\begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) + \mathbf{H}\vec{\sigma} & \Delta\, \mathbf{s}\vec{\sigma} \\ \Delta\, \mathbf{s}\vec{\sigma} & \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + \mathbf{H}\vec{\sigma} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $\epsilon(\mathbf{k})$ – спектр в металлической фазе, 2Δ – щель в спектре для АФМ фазы. Мы получаем уравнение на спектр ϵ :

$$(\epsilon - \eta(\mathbf{k}) - \mathbf{H}_{\parallel}\sigma)^2 - (\xi(\mathbf{k}) - \mathbf{H}_{\perp}\vec{\sigma})^2 - \Delta^2 = 0 \qquad (3)$$

$$\eta(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}[\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q})], \qquad \xi(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}[\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q})] \qquad (4)$$

$$\mathbf{H}_{\parallel} = \mathbf{s}(\mathbf{Hs}), \qquad \mathbf{H}_{\perp} = \mathbf{H} - \mathbf{H}_{\parallel} .$$

На границе МЗБ всегда $\xi(\mathbf{k}) \equiv 0$ а в условиях точного нестинга, в том числе и для одномерных систем, также выполняется $\eta(\mathbf{k}) \equiv 0$. Мы видим, что сформулированные выше утверждения могут выполняться помимо границы спиновой зоны также и в точках случайного вырождения $\xi(\mathbf{k}) = 0$.

Особенно простой вид формулы (3), (4) приобретают для одномерной системы вблизи края спектра

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \Delta + \mathbf{H}_{\parallel}\vec{\sigma} + \frac{1}{2\Delta}(v_F\,\mathbf{q} + \mathbf{H}_{\perp}\vec{\sigma})^2 . \qquad (5)$$

Мы видим, что $\mathbf{H}_{\perp}$ расщепляет спектр не по энергии, как обычный зеемановский член, а по импульсам, сдвигая минимум зоны в точки $\pm H_{\perp}/v_F$. Иначе говоря, поперечное магнитное поле эквивалентно нарушению инверсии. Для неодномерных систем с нестингом величина q в (5) понимается как отклонение от нормали к границе МЗБ.

Сильное подавление статического парамагнетизма будет заметно при больших отклонениях направления $\mathbf{H}$ от $\mathbf{s}$. Однако уже при малых отклонениях должно наблюдаться аномальное уширение и затем потеря сигнала ЭПР вследствие дисперсии резонансной частоты по импульсам электронов. Это будет происходить как в металлическом, так и в термоактивационном режиме концентраций. Отметим также взаимосвязь статических орбитальных и резонансных спиновых эффектов вследствие изменения g-фактора вдоль изоэнергетической траектории спектра (5).

Примесные состояния. Рассмотрим теперь локализованные состояния электронов на дефектах АФМ решетки. Имея в виду плоскость CuO_2 в ВТСП соединениях, можно рассмотреть случаи межузельного (I) и одноузельного (II) дефектов, соответствующих замещению кислорода и меди. В узельном представлении для модели (2) система описывается гамильтонианом

$$\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} t(\mathbf{n},\mathbf{m})\, c^{+}_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{m}} + \sum_{\mathbf{n}} [\Delta(\mathbf{n})\, e^{i\,\mathbf{Q}\mathbf{n}}\, c^{+}_{\mathbf{n}}\, \mathbf{s}\vec{\sigma}\, c_{\mathbf{n}} + h.\,c.\,] \qquad (6)$$

$$t(\mathbf{n},\mathbf{m}) = t\,(\mathbf{n}-\mathbf{m}) + \tau(\mathbf{n},\mathbf{m}).\ \ \mathbf{n} = (n_x, n_y), \qquad \Delta(\mathbf{n}) = \Delta + \delta(\mathbf{n}),$$

где $t(\mathbf{l})$ – фурье образ от $\epsilon(\mathbf{k})$ в (2), а τ и δ описывают дефекты типа I и II. Оказывается, что в случае I связанные состояния не образуются. В случае II связанные состояния появляются при нестинге или в окрестности седловых точек. Элементарные расчеты показывают, что глубина связанного состояния ω определяется из условия

$$A\,\frac{\Delta}{\epsilon_F}\,\left[\frac{\Delta}{\omega}\right]^{1/2} \propto 1/\lambda, \qquad A \propto \ln\frac{\epsilon_F^2}{\Delta\omega} .$$

Выражение для A в формуле (6) относится к системе с седловой точкой в $\epsilon(\mathbf{k})$. В общем случае $A \approx \mathrm{const} \propto 1$. Величина λ определяет силу дефекта: $\delta(\mathbf{n}) = -\lambda\delta_{\mathbf{n},0}$. В настоящем контексте существенно, что вырождение локализованных состояний снимается уже без магнитного поля. Их уровни $\pm(\Delta - \omega)$ расположены симметрично в щели $(-\Delta, +\Delta)$, причем каждый соответствует только одной проекции на ось $\mathbf{s}$. Отсутствие вырождения объясняется тем, что в присутствии дефекта II система теряет симметрии относительно преобразований RT и RI (R – обращение времени, T – трансляция, I – инверсия), обеспечивавших аналог крамерсовского вырождения для чистой системы и для дефекта типа I. Следовательно, эти состояния не будут вообще давать вклада в магнитную восприимчивость. Наблюдение закона Кюри χ_C в (1) будет характеризовать концентрации только тех дефектов, которые не связаны с АФМ подсистемой.

Литература

1. *Метфессель З., Маттис Д.* Магнитные полупроводники. М.: Мир, 1972.
2. *Нагаев Э.Л.* Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979.
3. *Куликов Н.И., Тугушев В.В.* УФН, 1984, **144**, 646.
4. *Бразовский С.А., Лукьянчук И.А.* ЖЭТФ, 1989, 96, в печати.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
4 апреля 1989 г.