

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ ПЕРЕХОДА ВЫРОЖДЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В ИЗОЛИРУЮЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

Э.Л.Нагаев, Э.Б.Соколова

Переход вырожденного EuO из проводящего в изолирующее состояние объяснен спариванием электронов двухзарядного донора (вакансии кислорода).

В ферромагнитных полупроводниках EuO с избытком Eu было обнаружено чрезвычайно интересное явление. В определенном интервале концентраций носителей n образцы, которые при $T \rightarrow 0$ ведут себя обыч-

ным для вырожденных полупроводников образом, при повышении температуры резко переходят в изолирующее состояние с повышением сопротивления на 13 – 15 порядков величины [1, 2]. Теория эффекта, корректно передающая его зависимость от n , была развита в [3 – 5] (см. обзор [6]). В этих работах рассматривалась система однозарядных доноров с концентрацией, превышающей то предельное значение, начиная с которого при $T = 0$ происходит коллективизация электронов доноров, и образуется примесная зона. Энергия электрона тем ниже, чем выше степень ферромагнитного упорядочения в области, где он находится с максимальной вероятностью. Поэтому при повышении температуры возникает тенденция к локализации коллективизированных электронов каждого на своем доноре: локальный магнитный порядок разрушается медленнее, чем дальний.

Между тем, вакансии кислорода, определяющие электрические свойства $\text{EuO} + \text{Eu}$, – это двухзарядные доноры, и теория [3 – 5] может быть обобщена на них лишь при определенных условиях. Тот факт, что переход металл – изолятор в EuO , легированном донорной однозарядной примесью Gd , не обнаружен экспериментально [7], делает необходимым исследование других механизмов такого перехода, специфичных для двухзарядных доноров. (Теории, развитые ранее в [8, 9] на основе модели двухзарядного донора, приводят к независимости эффекта от n , что противоречит опыту).

Ниже предложен механизм перехода изолятор – металл, связанный с изменением характера основного состояния двухзарядного донора при изменении локальной намагниченности. Если описывать донор гелиоподобной моделью, то в немагнитном кристалле его основным состоянием всегда было бы $(1s)^2$ со спинами обоих электронов, антипараллельными друг другу. Однако в ферромагнитном кристалле более выгодным может оказаться состояние $(1s)(2s)$, так как энергия E_{12} , затраченная на перевод одного из электронов из $(1s)$ - в $(2s)$ -состояние, может быть скомпенсирована энергией их обменного взаимодействия с магнитными атомами. Если спины обоих электронов параллельны локальному магнитному моменту области, в которой находятся электроны, эта энергия равна AM , где A – интеграл s - f -обмена, M – момент области в расчете на атом (в $(1s)^2$ -состоянии энергия обмена равна нулю).

При $T = 0$ локальная намагниченность M равна спину магнитного атома S , но с ростом температуры она убывает. Поэтому, если при $T = 0$ уровень $(1s)(2s)$ лежит ниже $(1s)^2$, при некоторой температуре T_i может произойти инверсия термов, и при высоких температурах доноры окажутся в состоянии $(1s)^2$.

При достаточно больших концентрациях доноров n из-за перекрытия электронных орбит соседних донорных атомов происходит коллективизация их электронов. Условием этого служит неравенство $n^{1/3}r > C$, где r – радиус орбиты, C – число порядка единицы (критерий Мотта). Его значительно легче выполнить для $(2s)$ -электронов, чем для $(1s)$ -электронов, так как радиус орбиты первых больше, чем вторых (вдвое в гелиоподобной модели). Если критерий Мотта выполнен для $1s$ -электронов ($n^{1/3}r_1 > C$), то система находится в проводящем состоянии при всех

температурах. Если же концентрация лежит в пределах $n^{1/3}r_2 > C > n^{1/3}r_1$, то при высоких температурах система находится в изолирующем состоянии. Однако после достижения температуры инверсии термов T_i критерий Мотта начинает выполняться, и система переходит в проводящее состояние. Наконец, если критерий Мотта не выполнен даже для $2s$ -состояний ($n^{1/3}r_2 < C$), система остается изолятором при всех температурах.

Следует подчеркнуть, что локальный момент M может очень сильно отличаться от средней намагниченности кристалла. Так, при $T \rightarrow \infty$ величина M есть не что иное, как флуктуирующий момент области радиуса $r \sim r_1, r_2$, и потому, в соответствии с известным результатом статистики, имеет порядок $S(a/r)^{3/2}$, где a — постоянная решетки. То обстоятельство, что локальный момент не имеет фиксированного направления в пространстве, на энергии электронов не отражается, так как их спины в состоянии $(1s)(2s)$ всегда подстраиваются параллельно ему. Если $AS(a/r)^{3/2}$ превышает E_{12} , донор остается в состоянии $(1s)(2s)$ вплоть до самых высоких температур. В этом случае переход металл — изолятор по описанному выше механизму невозможен, но зато он возможен по тому же механизму, что и для однозарядных доноров (см. [3 — 6]).

Для расчета температурной зависимости энергии состояния донора типа $(1s)(2s)$ гамильтониан донора представляется в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - A \sum \psi_\nu^*(g) \psi_\mu(g) (S_g s)_{\sigma\sigma'} a_{\nu\sigma'}^* a_{\mu\sigma}, \quad (1)$$

где гамильтониан \mathcal{H}_0 включает в себя все, кроме обмена, S_g и s — спины магнитного атома с номером g и электрона проводимости соответственно, $a_{\mu\sigma}^*$ и $a_{\mu\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в орбитальном состоянии μ с проекцией спина σ , $\psi_\mu(g)$ — орбитальная часть одноэлектронной волновой функции в узельном представлении. Обмен между электронами донора из-за его слабости не учитывается.

Волновая функция строится в виде линейной комбинации четырех состояний $a_{2s}^*, \sigma a_{1s}^*, \sigma' |0\rangle$, где $|0\rangle$ — вакуумная функция. Тогда в главном приближении по s - f -обмену для зависящей от спинов магнитных атомов части энергии получается:

$$E_{sf} \{S\} = - \frac{A}{2} \left\{ \sqrt{\sum \psi_{1s}^2(g) \psi_{1s}^2(f) (S_g S_f)} + \sqrt{\sum \psi_{2s}^2(g) \psi_{2s}^2(f) (S_g S_f)} \right\}. \quad (2)$$

Величина E_{sf} включается в магнитный гамильтониан системы. Благодаря ей он становится негеизенберговским. До сих пор из негеизенберговских магнитных гамильтонианов, описывающих изотропное взаимодействие, в литературе рассматривались только биквадратичный и четырехспиновый. Квазилинейный гамильтониан (2) — новый.

Так как донорный уровень рассматриваемого типа — глубокий [2], можно считать, что электрон $(1s)$ практически локализован на $z_1 = 6$ ближайших к вакансии кислорода ионах Eu^{++} , а электрон $2s$ — на $z_2 = 8$ следующих по близости. Тогда усредненный по температуре обменный

сдвиг (2) представляется в виде

$$\bar{E}_{sf} = -\frac{A}{2} \left(\frac{\bar{J}_1}{z_1} + \frac{\bar{J}_2}{z_2} \right), \quad (3)$$

где \bar{J}_i – суммарный момент i -й координационной сферы, усредненный по температуре. Если косвенный обмен через электроны в окрестности донора сильнее непосредственного обмена между магнитными атомами, то при $T \gtrsim T_c$ усреднение производится с использованием статсуммы Z_i :

$$Z_i = \sum_{M=0}^{z_i S} (2M+1) F_i(M) \exp \left\{ \frac{AM}{2z_i T} \right\}, \quad (4)$$

где $F_i(M)$ – число способов, которым можно получить суммарное значение момента M , складывая z_i моментов величины S .

Из (3), (4) получается, что при $T \rightarrow \infty$, когда корреляции между спинами отсутствуют, \bar{E}_{sf} составляет 40% от ее значения при $T = 0$, равного AS ($S = 7/2$), т. е. в согласии с приведенными выше оценками имеет порядок AS/\sqrt{Z} . Косвенный обмен через электроны донора существенно повышает степень локального порядка: при $AS = 0,5 \text{ эв}$, $T = 0,01 \text{ эв}$ (т. е. вблизи точки Кюри T_c EuO), $\bar{E}_{sf} \approx 0,9 AS$. Таким образом, энергии \bar{E}_{sf} и E_{12} при всех температурах – одного порядка. Поэтому оба описанных выше механизма перехода металл – изолятор в EuO представляются возможными. Чтобы сделать выбор между ними, нужны дополнительные эксперименты.

Поступила в редакцию
29 сентября 1976 г.

Литература

- [1] M. Oliver, J.Kafalas, J.Dimmock, T.Reed. Phys. Rev. Lett., 24, 1064, 1970.
- [2] Y.Shapira, S.Foner, T.Reed. Phys. Rev. B8, 2299, 1973.
- [3] Э.Л.Нагаев, А.П.Григин, Phys. Lett., A38, 469, 1972.
- [4] А.П.Григин, Э.Л.Нагаев. Phys. Stat. Sol., B61, 65, 1974.
- [5] P.Leroux-Hugon. Phys. Rev. Lett., 29, 939, 1972.
- [6] Э.Л.Нагаев. УФН, 117, 437, 1975.
- [7] J.Schoenes, P.Wachter. Phys. Rev., B9, 3097, 1974.
- [8] S.von Molnar, T.Kasuya., Proc. of the 10-th Intern. Conference on the Physics of Semiconductors Cambridge Mass., 233, 1970.
- [9] J.Torrance, M.Shafer, T. Mc Guire. Phys. Rev. Lett., 29, 1168, 1972.