

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ И АНОМАЛЬНЫЙ МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Э.Л. Назаров

При рассмотрении состояния электрона проводимости в антиферромагнитном кристалле принято считать (см. [1]), что он не нарушает магнитного упорядочения кристалла. Ниже будет показано, что во многих случаях энергетически более выгодным является такое состояние системы, при котором электрон образует вокруг себя область с ферромагнитным упорядочением и движется вместе с ней по кристаллу. По аналогии с поляроном в ионных кристаллах [2] такую квазичастицу естественно называть магнитным поляроном.

Состояние системы электрон проводимости – антиферромагнитный кристалл в рамках $s-d$ – модели определяется, в основном, тремя параметрами: 1 – интегралом A обменного взаимодействия электрона проводимости с d -электронами ближайшего к нему магнитного атома; 2 – блоховским интегралом B , которому пропорциональна ширина зоны электрона проводимости в отсутствие обмена с d -электронами; 3 – обменным интегралом I для соседних магнитных атомов. Существенно, что последний из этих параметров мал по сравнению с двумя первыми: A и B – порядка $0,1-1$ эв, а I – $0,01$ или даже $0,001$ эв.

Если считать, что антиферромагнитное упорядочение сохраняется неизменным, то энергия s -электрона в пренебрежении нулевыми колебаниями магнитных моментов подрешеток дается выражением

$$E_{eo} = E_A - \sqrt{z^2 B_k^2 + \frac{1}{4} S^2 A^2}, \quad (1)$$

$$B_k = 2B [\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a],$$

где E_A – "атомная" энергия s -электрона, S – спин магнитного атома, z – число ближайших соседей, a – постоянная решетки.

Как известно, трансляционное движение электрона по кристаллу приводит к понижению энергии его основного состояния. Из выражения (1) видно, что при $z|B| \ll |S|A$ антиферромагнитное упорядочение препятствует трансляционному движению электрона проводимости по кристаллу. В противоположном же предельном случае оно приводит к существенному уменьшению роли $s-d$ -обмена. Но если допустить, что электрон проводимости создает вокруг себя область ферромагнитного упорядочения, то оказывается возможным получить выигрыш в энергии электрона за счет его трансляционного движения в этой области или обмена в ней с магнитными атомами. Этот выигрыш компенсирует проигрыш в энергии из-за разрушения антиферромагнитного упорядочения. Радиус ферромагнитной потенциальной ямы находится из условия минимума полной энергии системы.

Ограничимся здесь рассмотрением покоящегося магнитного полярона. Энергия системы находится из вариационного принципа. При $A > 0$ пробная функция системы выбирается следующим образом: 1 – поляризация спина электрона проводимости фиксирована (он параллелен моменту ферромагнитной ямы), 2 – состояние магнитной подсистемы не зависит от положения электрона проводимости. При $r = R$ идеальное антиферромагнитное упорядочение ($r > R$) скачком переходит в идеальное ферромагнитное упорядочение ($r < R$). 3 – электронная часть пробной функции строится как линейная комбинация s -орбит, соответствующих различным магнитным атомам. Ее коэффициенты $\psi(g)$ (g – номер магнитного атома), определяются из уравнения

$$\left[E_A - \frac{A}{2} \langle S_B^z \rangle - E \right] \psi(g) + B \sum_h^1 \psi(g+h) = 0. \quad (2)$$

Штрих над знаком суммы в (2) означает суммирование по ближайшим соседям, $\langle \dots \rangle$ – символ усреднения.

Удобно функцию $\psi(g)$, определенную на всех узлах решетки, представить как спинор, компонента которого ψ_i ($i = 1, 2$) определена лишь на тех узлах, которые в идеальном антиферромагнетике образовывали бы i -ую магнитную подрешетку. Радиус магнитного полярона в типичных случаях составляет несколько постоянных решетки. Поэтому целесообразно перейти к приближению сплошной среды, разложив последний член (2) в ряд Тейлора около точки g и рассматривая координаты узлов как непрерывные переменные. С учетом сказанного выше о состоянии магнитной подсистемы получается следующая система уравнений:

$$\left\{ E_A - \frac{AS}{2} - E \right\} \psi_1(r) + B[z + a^2 \Delta] \psi_2(r) = 0, \quad (3)$$

$$B[z + a^2 \Delta] \psi_1(r) + \left\{ E_A + \frac{AS}{2} [1 - 2\theta(R-r)] - E \right\} \psi_2(r) = 0,$$

$$\theta(x) = 1 \text{ при } x > 0 \text{ и нулю при } x < 0.$$

Решение системы (3) приводит к следующему выражению для энергии

$$E = E_n + \frac{4\pi}{3} \frac{R^3}{a^3} |I| S^2 z, \quad (4)$$

$$E_n = E_A - \frac{AS}{2} - |B| [z - k^2 a^2],$$

где параметр k определяется из уравнения

$$k^2 a^2 = (z - k^2 a^2) \left[\sqrt{1 + \frac{AS}{|B| (z - k^2 a^2)}} - 1 \right] \sin^2 kR \quad (5)$$

$$\left(\frac{\pi}{2} \leq kR \leq \pi \right).$$

Согласно (4) и (5), энергия захваченного магнитной поляризацией электрона E_n как функция R принимает значения от максимального, совпадающего с дном зоны проводимости свободного электрона в идеальном антиферромагнетике (1), до минимального, равного

$$E_A - \frac{AS}{2} - z|B|.$$

При значениях параметров, при которых минимум полной энергии магнитного полярона достигается в области справедливости континуальной теории, R имеет порядок $a(B/|I|S^2z)^{1/5}$.

Необходимо отметить, что при малых S и R следует учитывать флуктуации спина электрога проводимости вне ферромагнитной области. Соответствующий расчет будет приведен в специальной публикации.

Проведенное выше рассмотрение можно распространить на случай $A < 0$ заменой A на $|A|$, если $|A/B|$ достаточно мало. В противоположном случае спин s -электрона нельзя считать фиксированным, и волновая функция учитывает колебания спинов d -электронов в ферромагнитной яме из-за их обмена с s -электроном. Тогда получается:

$$E_n \approx E_A - \frac{1}{2} |A| (S + 1) - |B| \left(\frac{2S}{1 + 2S} \right) \left[z - \frac{\pi^2 a^2}{R^2} \right]. \quad (6)$$

Как видно из (6), второй вариант пробной функции, обеспечивая, в отличие от первого, полный выигрыш в энергии s - d -обмена, приводит вместе с тем к некоторому проигрышу в энергии трансляционного движения.

Характерной особенностью магнитного полярона является его аномально большой магнитный момент, который может превышать 100 магнетонов Бора. Этот момент должен особенно сильно сказываться на значении продольной магнитной восприимчивости антиферромагнетика. Аномальным моментом должен обладать и электрон, захваченный примесным центром, однако его значение меньше, чем у свободного магнитного полярона. Термическая ионизация примесных центров должна поэтому вести к росту χ , до тех пор, пока магнитные поляроны не начнут диссоциировать. При высоких концентрациях легирующей примеси повышение температуры в принципе может привести к переходу кристалла в ферромагнитное состояние с одновременным резким возрастанием электропроводности.

Автор выражает признательность Л.В. Келдышу и Р.А. Сурису за обсуждение поставленной в работе проблемы.

Поступило в редакцию
23 марта 1967 г.

Литература

- [1] Ю.П. Ирхин, Е.А. Туров. ФММ, 4, 9, 1957.
- [2] С.И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов, ГИТТЛ, М.-Л., 1951; С.В. Тябликов. ЖЭТФ, 21, 377, 1951.