Письма в ЖЭТФ, том 17, вып. 5, стр. 262 – 265 5 марта 1973 г.

О ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С УЗКИМИ ЗОНАМИ

М. А. Кривоглаз

В настоящей работе показано, что в ферро- и парамагнитных полупроводниках с $A >> \Delta E >> zIS^2$ (ΔE – ширина зоны, $-2AS^{-1}\mathbf{s}\mathbf{S}_n$

и $-2IS_nS_n$, – обменные энергии взаимодействия электрона с n-м атомом и соседних атомов, z – координационное число, S – спин атома) термодинамически выгодными могут быть автолокализованные состояния.

В настоящей работе будет показано, что в ферромагнитных и парамагнитных полупроводниках с $A \gg \Delta E \gg zJS^2$(ΔE – ширина зоны проводимости, $-2AS^{-1}\mathbf{s}\mathbf{S}_n$ и $-2JS_n S_n$, – обменные энергии взаимодействия электрона с n-м атомом и соседних атомов друг с другом, z – координационное число, S – спин атома) термодинамически выгодными могут быть автолокализованные флуктуонные состояния, то есть связанные состояния носителя тока и флуктуации намагниченности.

Такие состояния большого радиуса ранее были исследованы в противоположном случае $\Delta E \gg A \gg zJS^2$ [1 – 4]. В случае же $A \gg \Delta E$ согласно [5 – 7] сильное взаимодействие приводит к образованию связанных состояний электрона и спина атома. Возникающие спин-электронные комплексы движутся в кристалле как единые квазичастицы с несколько измененной массой. При $T \neq 0$ согласно [5] они остаются в состояниях зонного типа, а взаимодействие со спиновыми отклонениями приводит лишь к повышению дна зоны на δE и к рассеянию. Эти результаты действительно справедливы в области низких температур. Однако, начиная с некоторой температуры T_1^* термодинамически выгоднее автолокализация квазичастицы у области сравнительно больших размеров с сильно пониженным спиновым беспорядком. Уменьшение ее энергии на величину $\sim\delta E$ может превзойти повышение свободной энергии при образовании неоднородности намагниченности и тогда автолокализованные состояния будут стационарными. В отличие от случая $A \ll \Delta E$ теперь при образовании флуктуона локализуется не электрон, а спин-электронный комплекс.

Для исследования возможности существования флуктуонов в спин-волновой области учтем, что при $2S \gg 1$ сдвиг края зоны, обусловленный спиновыми отклонениями, равен [5] $\delta E = Cd^2(2SN)^{-1}\sum_{\mathbf{k}} k^2 n_{\mathbf{k}}$, где $C = \Delta E(T=0)(2z)^{-1}$, N – число ячеек, d – длина ребра кубической ячейки, $n_{\mathbf{k}}$ – числа заполнения спиновых волн. При достаточно плавном изменении намагниченности можно ввести распределения чисел $n_{\mathbf{k}}$ в малых элементах объема, зависящие от $\mathbf{r}$, и рассматривать δE как потенциальную энергию квазичастицы. В адиабатическом приближении ее энергия E_e включается как слагаемое в энергию спиновых возбуждений. Поэтому локальный спектр спиновых волн $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = [2JS + C(2S)^{-1}v|\psi(\mathbf{r})|^2]d^2k^2$ (v – объем ячейки) определяется не только прямым, но и косвенным взаимодействием. Вычисляя обычным образом плотность свободной энергии ϕ для этого спектра, найдем изменение термодинамического потенциала $\Delta\Phi = \min I[\psi]$ при переходе квазичастицы со дна зоны в автолокализованное состояние с волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$:

$$I[\psi] = \frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2 d\mathbf{r} - \frac{Cd^2}{2S}\frac{v}{8\pi^3}\int k^2 n_{\mathbf{k}}(\infty)\,d\mathbf{k} +$$

$$+ \frac{kT}{8\pi^3} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} \left\{ \ln\left[1 - \exp\left(-\frac{\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{kT}\right)\right] - \ln\left[1 - \exp\left(-\frac{\omega_{\mathbf{k}}(\infty)}{kT}\right)\right]\right\}. \tag{1}$$

Определяя $\min I[\psi]$ прямым вариационным методом с пробной функцией $\psi_a(\mathbf{r}) = (2a/\pi)^{3/4}\exp(-ar^2)$, сведем задачу к вычислению минимума функции $I(a)$, где

$$I(a) = \frac{\xi(5/2)}{\sqrt{2}\,\pi^2} C\nu^{2/3} S^{3/2} \left[K a^{2/3} + \left(\frac{T}{\theta}\right)^{5/2} \left(\frac{f(a)}{a} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right)\right];$$

$$a = \frac{C\nu^{2/3}}{k\theta} v \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{3/2}; \quad \nu = \frac{d^3}{v}; \quad \theta = \frac{4JS\nu^{2/3}}{k}; \quad K = \frac{3\pi^3}{\sqrt{2}\,\xi(5/2)S^{3/2}} \mu^{2/3};$$

$$\mu = \frac{k\theta}{C\nu^{2/3}}; \qquad f(a) = \int_0^a \left(\ln\frac{a}{x}\right)^{3/2} (1+x)^{-5/2} dx. \tag{2}$$

При достаточно малых $K(\theta/T)^{5/2}$ функция $I(a)$ наряду с минимумом при $a = 0$ (т. е. при $a = 0$), соответствующим зонным состояниям, имеет также второй минимум при $a = a_0$, соответствующий автолокализованным состояниям. Для $T > T_1^*$ $\Delta\mathcal{F} = I(a_0) < 0$ и флуктуонные состояния термодинамически выгоднее зонных. Из численных расчетов следует, что $T_1^* \approx 7S^{-3/5}\mu^{4/15}\theta$, т. е. флуктуоны могут образовываться в спин-волновой области лишь при очень малых $\mu \lesssim 10^{-4}$ для ферромагнетиков с очень низкой температурой Кюри $T_C < 1°K$. Это связано с малым изменением намагниченности и δE при $T << T_C$. При $T \sim T_1^*$ эффективное число атомов в флуктуоне $n = v^{-1}|\psi(0)|^{-2} \sim \mu^{-1} >> 1$ и $-E_e \sim \mu^{-1/3}k\theta >> k\theta$, что оправдывает макроскопическое и адиабатическое приближения.

Вне спин-волновой области ферромагнетика и в парамагнетике сдвиг δE растет и флуктуоны могут возникать при значительно больших $T_C \sim 10 - 100°K$. Для исследования образования флуктуонов в идеальных парамагнетиках примем упрощенную макроскопическую модель. Будем считать, что вне сферы радиуса r_0 состояние спинов таково же, как в отсутствие электрона, и $\phi = \phi_{id} = -kTv^{-1}\ln(2S+1)$, а потенциальная энергия квазичастицы равна $\delta E = \kappa C$, где $1 < \kappa < z$. Внутри же сферы состояние спинов соответствует ферромагнетику с приведенным выше локальным спектром $\omega_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (при $J = 0$). Значение r_0 определяется из условия, чтобы максимальная частота $\omega_{\mathbf{k}\,m}(r_0) = zCS^{-1}v\psi^2(r_0) = \kappa_1 kT$ в несколько раз превышала kT ($\kappa_1 \gtrsim 2$).

Определяя минимум получающегося функционала $I[\psi]$ при помощи пробной функции $\psi_a(r)$ и вводя вместо a новую переменную $b = C(2SkT)^{-1}v(2a/\pi)^{3/2}$, найдем, что при $\ell = \ln(2zb/\kappa_1) >> 1$

$$\Delta\mathcal{F} = \min I(b)\,; \quad I(b)C^{-1} = \frac{3\pi}{2}\left(\frac{2\nu SkT}{C}b\right)^{2/3} - \kappa + \frac{2}{3\sqrt{\pi}}\,\frac{\ln(2S+1)}{S}\,\ell^{3/2}\,\frac{1}{b}\,. \qquad (3)$$

Согласно (3) в парамагнетиках $\Delta\mathcal{F} < 0$ и флуктуоны термодинамически выгодны при $T < T^*$, где по порядку $kT^* \sim 0{,}03[\nu\ln(2S+1)]^{-1}\ell^{3/2}\kappa^{5/2}C$. Например, при $2S = 3$, $2z/\kappa_1 = 6$, $\nu = 1$, $\kappa = 3$, $kT^* \sim 0{,}1C$, т.е. при $\Delta E \sim 1$ *эв* $T^* \sim 100\,°$К. Величина $n \sim (\pi/\ell)^{9/10}(C/kT)^{3/5}$ и n достаточно велико при $T << T^*$, но вблизи T^* $n \sim 10$ и использованное макроскопическое приближение дает лишь весьма грубую оценку.

Такую же модель можно применить для качественного описания флуктуонов в ферромагнетиках вне спин-волновой области. Надо лишь учесть, что здесь δE определяется интерполяционной формулой $\delta E = \kappa'(T)C = \kappa_0'(1-\eta)^p C$ (η – относительная намагниченность, $1 < p < 5/3$) и заменить в (3) κ на $\kappa'(T)$ и $\ln(2S+1)$ на $-\nu\phi(kT)^{-1}$. Тогда для нижней температуры перехода в флуктуонные состояния получим оценку $T_1^* \sim 0{,}03T(\nu\nu\,|\phi|)^{-1}\ell^{-3/2}\kappa_0'^{5/2}(1-\eta)^{5p/3}C$. При $\eta < 1/3$ $kT_1^* \sim$ $\sim kT_C \sim 0{,}1 - 0{,}01\,C$.

Таким образом, при $A >> \Delta E$ и достаточно больших $\Delta E/kT_C$ в определенном интервале температур $T_1^* < T < T^*$, охватывающем точку Кюри, как и при $A << \Delta E$, термодинамически выгодны флуктуонные состояния. Их характеристики, однако, существенно не такие, как в случае широких зон, в частности они не зависят от величины A.

Институт металлофизики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
9 января 1973 г.

Литература

[1] М.А.Кривоглаз, ФТТ, 11, 2230, 1969.

[2] М.А.Кривоглаз, А.А.Трущенко. ФТТ, 11, 3119, 1969.

[3] А.М.Дыхне, М.А.Кривоглаз. ФТТ, 12, 1705, 1970.

[4] T.Kasuya, A.Yanase, T.Takeda. Solid State Comm., 8, 1543, 1970.

[5] Э.Л.Нагаев. ЖЭТФ, 56, 1013, 1969; ФММ, 29, 905, 1970.

[6] Ю.А.Изюмов, М.В.Медведев. ЖЭТФ, 59, 553, 1970.

[7] S.Klama, M.I.Klinger. Acta Phys. Polonica, A40, 619, 1971.