Письма в ЖЭТФ, том 19, вып. 3, стр. 168–171 5 февраля 1974 г.

К ТЕОРИИ ЗОННОГО ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

Б.А.Волков, Ю.В.Копаев

Исследуется модель с одноэлектронным спектром, неустойчивым относительно электрон-дырочного спаривания. Найдены условия, при которых имеет место сосуществование синглетного и триплетного электрон-дырочного спаривания, приводящее к ферромагнитному состоянию коллективизированнных электронов проводимости.

Известно, что в приближении простой параболической электронной зоны $\epsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ ферромагнитное состояние за счет кулоновского взаимодействия между электронами проводимости возможно лишь при достаточно сильном взаимодействии [1, 2].

Намагниченность электронного газа, например, в направлении x можно записать в виде:

$$M_x \sim -i \sum_\sigma \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} G_{-\sigma,\sigma}(q, -0), \tag{1}$$

где

$$G_{-\sigma,\sigma} = -i < T a_{-\sigma}(t) a^+_\sigma(0) > .$$

Ниже речь будет идти о веществах с особыми свойствами одноэлектронного спектра, а именно либо о полуметаллах с почти совпадающими поверхностями Ферми электронов и дырок [3], либо о полупроводниках с шириной запрещенной зоны меньше энергии связи экситона [4], либо о металлах с узкими разрешенными зонами, когда приблизительно выполняется условие $\epsilon(\mathbf{p}) = -\epsilon(\mathbf{p}+\mathbf{q})$ [5].

Будет показано, что для таких систем даже при слабом взаимодействии возможен переход в ферромагнитное полупроводниковое состояние. Причем за ферромагнитизм ответственны коллективизированные электроны зоны проводимости легированного полупроводника.

Во всех перечисленных случаях при сколь угодно слабом межэлектронном взаимодействии система неустойчива относительно электрон-дырочного спаривания либо в синглетном состоянии, характеризуемом аномальной функцией Грина $G^{21}_{\sigma\sigma} = -i < T a_{2\sigma} a^+_{1\sigma} >$ и потенциалом связи V_c, либо в триплетном состоянии, характеризуемом аномальной функцией $G^{21}_{-\sigma\sigma} = -i < T a_{2-\sigma} a^+_{1\sigma} >$ потенциалом V_T [6] (здесь индексы 1 и 2 характеризуют либо номера зон [3, 4], либо – два состояния, отличающиеся на вектор $\mathbf{q}$).

Ниже будет показано, что в случае легированного полуметалла [3] или полупроводника [4] либо в случае металла [5] с числом электронов на элементарную ячейку, отличающимся слегка от единицы, возможно сосуществование синглетного и триплетного электрон-дырочных спариваний. Но в этом случае функции $G^{11}_{-\sigma\sigma}$ и $G^{22}_{-\sigma\sigma}$, характеризующие намагниченность согласно (1), также оказываются отличными от нуля при сколь угодно слабом взаимодействии, как это легко видеть из следующего формального уравнения

$$\left(G^{11}_{\sigma\sigma} = G^{11(0)}_{-\sigma\,-\sigma}\, V_T\, G^{12}_{-\sigma\sigma} G^{21}_{\sigma\sigma} + \ldots \right). \qquad (2)$$

Из системы уравнений для функций Грина, аналогичных уравнению (2) можно получить спектр возбуждений:

$$\omega_\pm^2 = \epsilon^2(\mathbf{p}) + (\Delta_c + \Delta_T)^2 \qquad (3)$$

системы уравнений для синглетной Δ_c и триплетной Δ_T диэлектрических щелей.

$$\ln\frac{\tilde{\omega}}{\Delta_T^\circ} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\Delta_c}{\Delta_T} + \frac{\Delta_T}{\Delta_c}\right)\ln\frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\delta\mu^2 - (\Delta_c + \Delta_T)^2} + \delta\mu} + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\Delta_c}{\Delta_T} - \frac{\Delta_T}{\Delta_c}\right)\times$$

$$\times \ln\frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\delta\mu^2 - (\Delta_c - \Delta_T)^2} + \delta\mu} \qquad (4)$$

$$\ln\frac{\tilde{\omega}}{\Delta_c^\circ} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\Delta_c}{\Delta_T} - \frac{\Delta_T}{\Delta_c}\right)\ln\frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\delta\mu^2 - (\Delta_c + \Delta_T)^2} + \delta\mu} + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\Delta_c}{\Delta_T} + \frac{\Delta_T}{\Delta_c}\right)\times$$

$$\times \ln\frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\delta\mu^2 - (\Delta_c - \Delta_T)^2} + \delta\mu},$$

и условие электронейтральности

$$[\delta\mu^2 - (\Delta_T + \Delta_c)^2]^{1/2} + [\delta\mu^2 - (\Delta_T - \Delta_c)^2]^{1/2} = n. \qquad (5)$$

Здесь n – концентрация легирующей примеси, $\delta\mu$ характеризует смещение уровня Ферми из-за легирования относительно середины запрещенной зоны. Ветви ω_+ и ω_- характеризуют состояния со спином вверх и вниз соответственно, т. е. имеет место спиновое расщепление и связанная с ним намагниченность.

Рассмотрим сначала случай нелегированного полуметалла (полупроводника). Найдем на фазовой диаграмме (Δ_c°, Δ_T°) (рис. 1) линию, на которой $\Delta_c = 0$. Здесь Δ_c° (Δ_T°) есть величина синглетной (триплетной) диэлектрической щели в отсутствие триплетной (синглетной). В этом случае из уравнений (4) получим

$$\ln|\Delta_c^\circ/\Delta_T^\circ| = 1, \quad \ln|\Delta_T^\circ/\Delta_T| = 0, \quad \text{т. е. } \Delta_T = \Delta_T^\circ = e^{-1}\Delta_c^\circ. \qquad (6)$$

Аналогично для линии $\Delta_T = 0$ имеем $\Delta_c = \Delta_c^\circ = e^{-1}\Delta^\circ_T$ (рис. 1).

Таким образом область сосуществования Δ_c и Δ_T находится между линиями с наклоном e и e^{-1}. В области сосуществования рост, например величины Δ_c, как легко видно из рис. 1, имеет место при уменьшении потенциала V_c, т. е. Δ°_c, что является нефизическим. И действительно анализ свободной энергии, подобной анализу в случае сосуществования диэлектрического и сверхпроводящего спариваний в нелегированном полуметалле [7], показывает, что область сосуществования не может быть реализована даже как метастабильная.

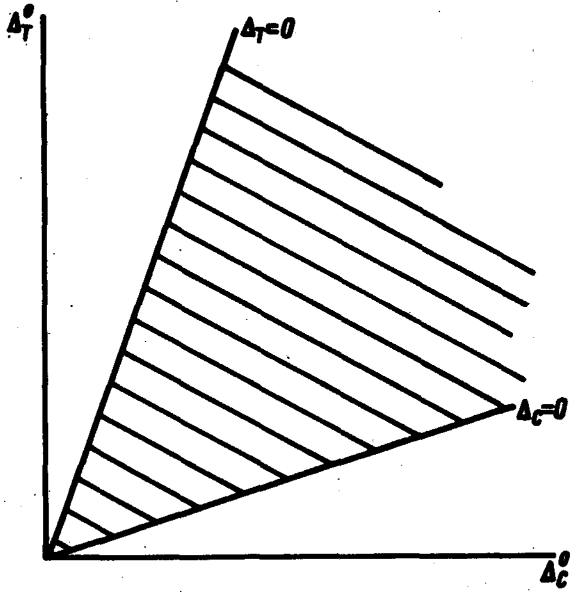

Рис. 1

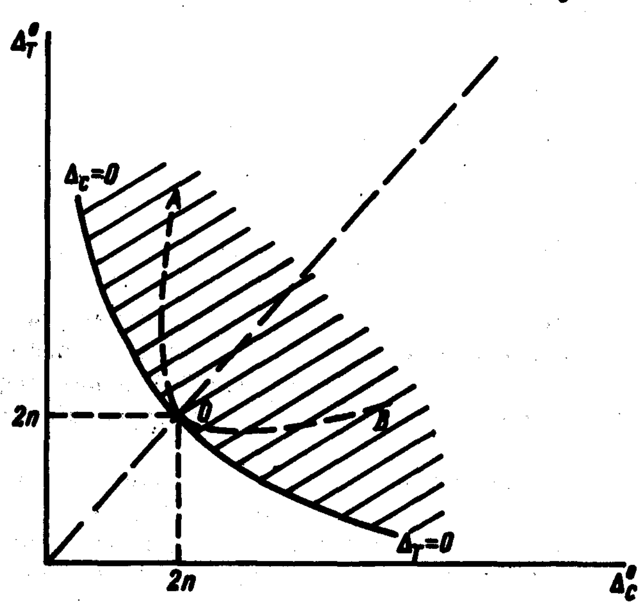

Рис. 2.

Соответствующий анализ для линии $\Delta_c = 0$ в случае легированного полуметалла приводит к следующим уравнениям вместо уравнений (6):

$$\ln|\Delta^\circ_c / \Delta^\circ_T| = 2\Delta^2_T n^{-1} (\sqrt{\Delta^2_T + n^2} + n)^{-1} ,$$

$$(\Delta^\circ_T \Delta^\circ_c)^{1/2} = \sqrt{\Delta^2_T + n^2} + n , \quad (7)$$

т. е. $\Delta_T = (\Delta_T^\circ \Delta_c^\circ - 2n\sqrt{\Delta_T^\circ \Delta_c^\circ})^{1/2}$, а $\Delta_c = 0$ на линии (рис. 2):

$$\ln|\Delta_c^\circ/\Delta^\circ_T| = -2n^{-1}(\sqrt{\Delta_T^\circ \Delta_c^\circ} - 2n). \qquad (8)$$

Аналогичные (7) и (8) выражения с заменой $\Delta_c^\circ \rightleftarrows \Delta_T^\circ$ получаются для линии $\Delta_T = 0$ (участок кривой на рис. 2 ниже биссектрисы; область сосуществования заштрихована).

Таким образом рост величины Δ_c, например, имеет место при увеличении потенциала V_c (или Δ_c°). Анализ выражения для свободной энергии вблизи биссектрисы ($\Delta_c^\circ \approx \Delta_T^\circ$) показывает, что ферромагнитное состояние является энергетически выгодным по сравнению со случаем отдельного решения для $\Delta_c \neq 0$ либо для $\Delta_T \neq 0$. Линия *AOB*, для определения которой требуются численные расчеты, является линией фазового перехода первого рода из ферромагнитного состояния в парамагнитное. Линии же $\Delta_c = 0$ и $\Delta_T = 0$ являются линиями "перегрева" и в области между ними и линией *AOB* ферромагнитное состояние системы является метастабильным.

Намагниченность системы и температура Кюри пропорциональны степени легирования n (при $n/\Delta^\circ << 1$). Для описания возможного ферромагнитного поведения соединений группы A_4B_6 необходимо учитывать эффекты гибридизации [8].

Рассмотренная модель качественно объясняет магнитные свойства полупроводников с узкими запрещенными зонами при их легировании [9] и является альтернативой к теории [10].

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
10 декабря 1973 г.

Литература

[1] F. Bloch. Z. Phys., 57, 545, 1929.

[2] E.C.Stoner. Proc. Roy. Soc., A165, 327, 1938.

[3] Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. ФТТ, 6, 2791, 1964.

[4] А.Н.Козлов, Л.А.Максимов. ЖЭТФ, 48, 1184, 1965.

[5] D.C.Mattis, W. D.Langer, Phys. Rev. Lett., 25, 376, 1970.

[6] B.I.Halperin, T.M.Rice. Solid State Phys., 21, 115, 1968.

[7] А.И.Русинов, До Чан Кат, Ю.В.Копаев. ЖЭТФ, 65, 1984, 1973.

[8] Б.А.Волков, Ю.В.Копаев. ЖЭТФ, 64, 2184, 1973.

[9] Д.Г.Андрианов, Н.Б.Брандт, Э.Р.Иоон, В.И.Фистуль, С.М.Чудинов. Письма в ЖЭТФ, 17, 9, 1973; E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., 1, 249, 1965.

[10] А.А.Абрикосов. ЖЭТФ, 65, 814, 1973.