Письма в ЖЭТФ, том 42, вып. 10, стр. 399 – 402 *25 ноября 1985 г.*

О МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ПРИРОДЕ ТОРОИДНОГО ДИАМАГНЕТИЗМА

А.А.Горбацевич

Показано, что диамагнетизм тороидного токового состояния обусловлен "жесткостью" волновых функций, формирующих тороидный момент. "Жесткость" возникает в результате образования связанных состояний в электронном спектре неоднородной фазы и приводит к подавлению парамагнитной составляющей отклика

1. Знак магнитной восприимчивости магнетиков строго определен только для спиновых систем, где он всегда положителен (парамагнитен) [1]. В орбитальных магнетиках ситуация неоднозначна [2]. Особый интерес в этом плане привлекает тороидное токовое состояние (ТТС) [3,4]. В рамках процедуры минимизации функционала Гинзбурга – Ландау (Г – Л) отклик ТТС на однородное магнитное поле равен нулю [5] в соответствие с результатом для классического тороидного момента [6]. В работах [7,8] были предложены феноменологические схемы расчета, дающие ненулевое диамагнитное значение магнитной восприимчивости неоднородной фазы ТТС. В настоящей работе решается вопрос о микроскопической природе диамагнетизма ТТС. С этой целью в рамках точно решаемой модели для неоднородного основного состояния вычислен коллективный вклад в магнитную восприимчивость вблизи температуры перехода в ТТС, где результаты расчета могут быть сопоставлены с процедурой минимизации функционала (Г – Л).

2. Рассмотрим модель экситонного диэлектрика с совпадающими экстремумами электронной и дырочной зон, описывающую переход в ТТС [3]. Гамильтониан модели в приближении среднего поля в базисе Латтинжера – Кона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\epsilon_1(\hat{\mathbf{k}}) + \epsilon_2(\hat{\mathbf{k}}) + \mu\right) I + \frac{1}{2}\left(\epsilon_1(\hat{\mathbf{k}}) - \epsilon_2(\hat{\mathbf{k}})\right)\sigma_z + \left(\frac{1}{m}\mathbf{P}\hat{\mathbf{k}} + \Delta(\mathbf{r})\right)\sigma_y \tag{1}$$

здесь $\epsilon_{1,2}(\mathbf{k})$ – закон дисперсии электронов (дырок), $\hat{\mathbf{k}} = \frac{\nabla}{i} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – вектор потенциал магнитного поля $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$, μ – сдвиг уровня Ферми из-за легирования, $i\mathbf{P} = i\mathbf{P}^* = i\langle 1|\vec{\nabla}|2\rangle$ – межзонный матричный элемент оператора импульса, σ_α – матрицы Паули, $\Delta(\mathbf{r})$ – синглетная мнимая компонента параметра порядка, определяющая плотность тороидного момента $\mathbf{T} \sim \mathbf{P}\Delta$ (плотность макроскопического тока $\mathbf{j} = \mathrm{rot\,rot}\,\mathbf{T}$). Функционал свободной энергии (число частиц n фиксировано) системы (1) записывается следующим образом:

$$F = -2\theta \sum_{\mathbf{k}} \ln\left(2\,\mathrm{ch}(E(\mathbf{k})/2\theta)\right) + \int d\mathbf{r}\, \frac{\Delta(\mathbf{r})^2}{|g|} \tag{2}$$

здесь θ – температура, g – константа кулоновского электрон-дырочного взаимодействия. Спектр $E(\mathbf{k})$ и волновые функции $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ в (2) определяются уравнениями ($\epsilon_1 = -\epsilon_2 = \epsilon$):

$$\left(i\epsilon(\hat{\mathbf{k}}) + \frac{1}{m}\mathbf{P}\mathbf{k} + \Delta(\mathbf{r})\right)u = -i(E-\mu)v \qquad \left(-i\,\epsilon(\hat{\mathbf{k}}) + \frac{1}{m}\mathbf{P}\hat{\mathbf{k}} + \Delta(\mathbf{r})\right)v = i(E-\mu)u\,. \tag{3}$$

Минимизируя (2) по $\Delta(\mathbf{r})$, получим уравнение самосогласования:

$$\Delta(\mathbf{r}) = \frac{i}{2}|g| \sum_k \mathrm{th}\,\frac{E(\mathbf{k})-\mu}{2\theta}\left(u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})v^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - u^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right). \tag{4}$$

Положим $\mathbf{A} = 0$, $\mathbf{P} = 0$ и рассмотрим одномерный закон дисперсии $\epsilon = i V_F \nabla_x$. Тем самым задача сводится к точно решаемой [9,10]. Поперечную дисперсию можно учесть по теории возмущения по $\frac{1}{m}\mathbf{P}\mathbf{k}$ (считаем $\mathbf{P} \perp X$). Избыточные носители заряда ($n \neq 0$, $\mu \neq 0$) приводят к неоднородности основного состояния. Энергетический спектр содержит две запрещенные зоны $(-E_+, -E_-)$ и (E_-, E_+), а потенциал $\Delta_0(x)$, волновые функции и плотность состояний имеют вид [9,10]:

$$\Delta_0(x) = -\Delta_1 Sn\left(x\frac{\Delta_1}{V_F\kappa},\ \kappa\right),\quad \Delta_1 = E_+ - E_-,\quad \kappa = \frac{E_+ - E_-}{E_+ + E_-},\quad q(x) = \Delta_0^2(x) - V_F\nabla\Delta_0(x)$$

$$v_E^0(x) = \left(\frac{q(x)+b}{L(\langle q\rangle + b)}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{V_F}\int_0^x \frac{2\sqrt{R}\,dy}{q(y)+b}\right\},\quad \langle\ldots\rangle = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\ldots dx \tag{5}$$

$$b = 2E^2 - E_+^2 - E_-^2\,,\quad R = E^2(E^2 - E_+^2)(E^2 - E_-^2)\,,\quad \rho(E) = \frac{1}{L}\frac{dN}{dE} = \left|\frac{(\langle q\rangle + b)E}{\pi\sqrt{R}}\right|$$

L – длина системы вдоль X, выражение для u_E^0 получаем из (5) заменой $\Delta_0(x) \to -\Delta_0(x)$. Выберем (5) в качестве нулевого приближения и определим индуцированную полем компоненту параметра порядка $\delta(x)$ $(\Delta(x) = \Delta_0(x) + \delta(x))$. В первом порядке по $\frac{e}{m}PA(x)$ ($\mathbf{P} \parallel \mathbf{A}$, $\mathbf{P} \perp \mathbf{B}$) для поправки к волновой функции имеем:

$$v_E'(x) = \eta v_E^0(x) + \int g(x, x')\,(2\Delta_0(x') - V_F\nabla)\left(\frac{e}{m}PA(x') + \delta_1(x')\right)v_E^0(x')dx' \qquad (6)$$

здесь $g(x, x')$ – функция Грина уравнения (3), η – константа, обеспечивающая сохранение нормировки. Подставив (6) в линеаризованное по магнитному полю уравнение (4), самосогласованно определим $\delta_1(x)$. Аналогично вычисляется $\delta_2(x)$. Решить уравнение (4) аналитически для произвольного периода $\Delta_0(x)$ не удается. Однако сделать заключение о характере магнитного отклика можно. Для свободной энергии во втором порядке по магнитному полю находим:

$$F - F(B=0) = L\int_{E>0} dE\,\frac{\rho(E)}{\langle q\rangle + b(E)}\left[\langle\delta_1^2(x)(E_+^2 + E_-^2 - q(x))\rangle - 4\,\frac{(\langle\Delta_0(x)\delta_1(x)\rangle)^2}{\langle q\rangle + b(E)}\,E^3\frac{d}{dE} + \right.$$

$$\left. + \int dE'\,\frac{\rho(E')}{\langle q\rangle + b(E')}\,\frac{|\langle E\,|(2\Delta_0(x) - V_F\nabla)\delta_1(x)\,|E'\rangle|^2}{E'^2 - E^2}\right]\frac{1}{E}\left(\mathrm{th}\,\frac{E-\mu}{2\theta} + \mathrm{th}\,\frac{E+\mu}{2\theta}\right). \qquad (7)$$

Интегрирование в (7) выполняется по разрешенным зонам. Все слагаемые в (7) строго больше нуля $(max\,q(x) = E_+^2 - E_-^2)$, т.е. диамагнитны. Если солитонная решетка $\Delta_0(x)$ достаточно разрежена, то индуцированный параметр порядка можно вычислять для каждого солитона независимо. При этом в (1), (6), (7) следует перейти к пределу $\kappa \to 1$, $\Delta_0(x) \to -\Delta_0\,\mathrm{th}\,\frac{x\Delta_0}{V_F}$, $v_E^0 \to \frac{1}{\sqrt{L}}\,e^{\frac{ix\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}}{V_F}}$, что на фазовой диаграмме соответствует области в окрестности линии перехода из соизмеримой $(\Delta_0(x) = \mathrm{const})$ в солитонную фазу. В результате вблизи температуры перехода в ТТС θ_c получим:

$$\begin{gathered}\delta_1(x) = -\delta_1(-x)\,; \qquad max\,\delta_1(x) \approx \frac{e}{m}PB\xi_\theta \\ x \to 0:\ \delta_1(x) = o(x)\,;\ x \gg \xi_\theta:\ \delta_1(x) \approx 2\,\frac{e}{m}PBxe^{-2x/\xi_\theta}\end{gathered} \qquad (8)$$

здесь $\xi_\theta = \xi_0\,\frac{\theta_c}{\Delta_0}$ – температурно зависящая корреляционная длина, характерный масштаб неоднородности спонтанного параметра порядка $\Delta_0(x)$ $(\Delta_0 \sim \sqrt{\theta_c(\theta_c - \theta)})$ $\xi_0 = V_F/\theta_c$. Восприимчивость $\chi = -(\partial^2 F/\partial B^2)$ в этом пределе определяется формулой:

$$\chi = \nu f\chi_L(P\xi_0)^2 \qquad (9)$$

и появляется скачком в точке перехода (χ_L – диамагнитная восприимчивость Ландау невзаимодействующего электронного газа, $f \sim 1$ – формфактор, $\nu = \xi_\theta/l \sim (\kappa\ln(1-\kappa^2))^{-1}$, $2l$ – период солитонной решетки. В силу экспоненциальной зависимости энергии взаимодействия солитонов от расстояния между ними, солитонную решетку можно считать разреженной уже при $\nu \lesssim 0{,}5$. Скачок восприимчивости (9) в точке перехода связан с корневой особенностью по температуре в амплитуде $\delta_1(x)$ (8).

4. Остановимся на физической интерпретации полученного результата. Как и в любой системе, в магнитном отклике ТТС можно выделить диамагнитную и парамагнитную составляющие. Поскольку магнитное упорядочение в ТТС носит орбитальный характер (т.е. отлична от нуля средняя по времени локальная плотность тока, сформированная упорядоченным движением коллективизированных электронов), то отклик на магнитное поле ТТС естественно интерпретировать на языке деформации токовых контуров. При этом парамагнитная составляющая отклика описывается изменением площади проекции контура на направление магнитного поля, а диамагнитная – изменением плотности тока в контуре. В присутствии макроскопической неоднородности оказывается возможным подавление парамагнитной составляющей за счет пиннинга токовых контуров на неоднородностях, без изменения диамагнитной составляющей. Выше было показано, что в качестве микроскопической причины пиннинга выступает образование связанных состояний в электронном спектре.

С формальной точки зрения диамагнитная реакция ТТС, согласно (7), вызвана появлением в магнитном поле индуцированной компоненты параметра порядка $\delta_1(x)$. Последнее обусловлено наличием в уравнении самосогласования линейного по $B = \mathrm{const}$ источника, происходящего от члена $\frac{e}{m}PA(x)\Delta_0(x)$ в (6). Между тем, действуя по процедуре Горькова вывода разложения Г – Л в рамках теории возмущений по потенциалу $\Delta_0(x)$, в уравнении самосогласования мы получили бы произведение матричных элементов по плоским волнам отдельно от $\Delta_0(x)$ и отдельно от $\frac{e}{m}PA(x)$, равное нулю для $B = \mathrm{const}$. Причиной качественного различия результатов теории возмущений и точного решения является образование связанных состояний, формирующих центральную зону $(-E_-, E_-)$ в (5). При этом волновые функции u и v приобретают фазовые сдвиги, которые не могут быть описаны в рамках теории возмущений. Фактическим параметром разложения по вектор-потенциалу становится член $\frac{e}{m}PA(x)\Delta_0(x)$, приводящий к появлению источника в уравнении самосогласования при $B = \mathrm{const}$. Изменение структуры волновых функций в присутствии связанных состояний можно охарактеризовать как возникновение "жесткости". Таким образом диамагнетизм ТТС, обусловленный "жесткой" структурой волновых функций, – сугубо квантовое явление. Величина магнитного отклика ТТС задается радиусом связанного состояния, который в свою очередь определяется корреляционной длиной. Отметим, что для рассмотренной выше микромодели феноменологические уравнения [7,8] дают качественно правильный ответ для $\delta_1(x)$.

Выбор одномерного затравочного спектра ϵ был продиктован исключительно простотой описания волновых функций неоднородной системы в этом случае. Все полученные в работе физические выводы справедливы и для спектра общего вида при условии образования локализованных на неоднородности состояний.

Автор благодарен Б.А.Волкову, В.Л.Гинзбургу, Л.В.Келдышу и Ю.В.Копаеву за многочисленные полезные обсуждения.

Литература

1. *Андреев А.Ф., Марченко В.И.* УФН, 1980, 130, 39.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982, §48.
3. *Волков Б.А., Горбацевич А.А., Копаев Ю.В., Тугушев В.В.* ЖЭТФ, 1981, 81, 729.
4. *Ginsburg V.L., Gorbatsevich A.A., Kopaev Yu.V., Volkov B.A.* Solid State Comm., 1984, 50, 339.
5. *Волков Б.А., Горбацевич А.А., Копаев Ю.В., Тугушев В.В.* ЖЭТФ, 1981, 81, 1904.
6. *Дубовик В.М., Тосунян Л.А.* ЭЧАЯ, 1983, 14, 1193.
7. *Волков Б.А., Горбацевич А.А., Копаев Ю.В.* ЖЭТФ, 1984, 86, 1870.
8. *Артамонов Ю.А., Горбацевич А.А., Копаев Ю.В.* Письма в ЖЭТФ, 1984, 40, 290.
9. *Дубровин Б.А., Новиков С.П., Матвеев В.Б.* УМН, 1976, 31, 55.
10. *Бразовский С.А., Гордюнин С.А., Кирова Н.Н.* Письма в ЖЭТФ, 1980, 31, 486.

Московский
институт электронной техники

Поступила в редакцию
27 сентября 1985 г.