

НОВЫЙ ТИП АВТОЛОКАЛИЗОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НОСИТЕЛЯ ЗАРЯДА В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Э.Л.Нагаев

Научно-производственное предприятие "Квант"

129626, Москва

Поступила в редакцию 23 апреля 1992 г.

В антиферромагнитных полупроводниках с высокими точками Нееля, но с близкими друг к другу энергиями различных антиферромагнитных структур, возможна автолокализация носителя заряда в микрообласти со скошенным антиферромагнитным упорядочением иного типа, чем в остальной части кристалла.

В связи с проблемой высокотемпературной сверхпроводимости вновь резко повысился интерес к автолокализованным состояниям носителей заряда в антиферромагнитных (АФМ) полупроводниках. До сих пор были предложены такие состояния трех различных типов: 1. Де Женн¹ предложил модель, в которой носитель захватывается одним-единственным магнитным атомом, спин которого отклонен от момента подрешетки, которой он принадлежит. 2. В² была предложена модель феррона. В ней носитель создает ферромагнитную микрообласть внутри АФМ кристалла и стабилизирует ее своей локализацией внутри нее. 3. В³ была предложена модель квазиосциллятора, получившего в современной литературе название магнитной струны. В ней электрон или дырка осциллирует относительно некоторого положения равновесия в кристалле, создавая вдоль траектории своего движения антифазное АФМ упорядочение и уничтожая его при обратном движении.

Как показано в⁴, модель де Женна при реалистических параметрах реализоваться заведомо не может. Струна может осуществляться только в системах со спином магнитных атомов $S = 1/2$ и очень узкими энергетическими зонами носителей. Ферроны возможны в кристаллах с низкими точками Нееля T_N , где они и наблюдались экспериментально (см. ⁴). При высоких T_N они невозможны.

Ниже будет показано, что существует еще один тип автолокализованного состояния носителя в АФМ полупроводнике, которое может реализоваться при высоких T_N и таких значениях других параметров, когда феррон или струна невозможны. Однако требуется, чтобы энергия стабильной АФМ структуры была достаточно близка к энергии нестабильной АФМ структуры, энергия же носителя в нестабильной структуре должна быть ниже, чем в стабильной. Тогда внутри стабильной АФМ фазы может образоваться микрообласть нормально нестабильной АФМ фазы, стабилизируемая автолокализацией внутри нее носителя. Дополнительное понижение энергии такого автолокализованного состояния происходит из-за скаса моментов подрешеток внутри области локализации носителя, хотя намагниченность такой квазичастицы гораздо ниже, чем феррона. Ниже она будет называться афмоном.

В рамках $s-d$ -модели энергия носителя при скошенном АФМ упорядочении с вектором структуры \vec{Q} и углом 2φ между моментами подрешеток дается выражением⁴

$$\vec{E}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \{ E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{Q}} - [(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{Q}} - AS \cos \varphi)^2 + A^2 S^2 \sin^2 \varphi]^{1/2} \}, \quad (1)$$

$$E_{\vec{k}} = 2B \sum_i^d \cos k_i a, \quad m = (2|B|a^2)^{-1}, \quad (\hbar = 1) \quad (2)$$

где a – постоянная простой квадратной ($d=2$) или простой кубической ($d=3$) решетки, A – интеграл $s-d$ -обмена. Для конкретных оценок затравочная энергия носителя (2) берется в приближении ближайших соседей. Выражение (1) справедливо, когда спины магнитных атомов величины S можно рассматривать как фиксированные, что допустимо не только при $S \rightarrow \infty$, но и при $|A|S \ll W = 12|B|$.

Согласно (1, 2) минимальная энергия носителя в шахматной структуре (все $Q_i = \pi/a$) выше, чем в слоистой (только $Q_1 = \pi/a$, остальные $Q_i = 0$). Если положить для оценки $W = |A|S = 3\text{эВ}$, что соответствует эффективной массе носителя, близкой к истинной электронной, то разность этих энергий в отсутствие скоса ($2\varphi = \pi$) составляет весьма значительную величину 0,29 эВ при $d=2$ и 0,46 эВ при $d=3$.

Чтобы оценить разность энергий на атом D_{LN} слоистой и шахматной структур, при которой возможен афмон, достаточно воспользоваться результатами ⁴ для $d=3$ и ⁵ для $d=2$. Согласно им гетерофазная автолокализация носителя заряда внутри области измененной фазы, являющейся потенциальной ямой глубиной $U \ll W$, возможна при затратах энергии на создание этой фазы D , удовлетворяющих неравенству

$$D/W \leq D_c/W = 0,2(4-d)(U/W)^{1+d/2}. \quad (3)$$

Для феррона $U \approx AS/2$, для афмона согласно (1, 2) при $AS \ll W$ $U_{LN} = (d+1)A^2S^2/8W$. Согласно (3) отношение критических значений D_{LN}^c для афмона и D_{FN}^c для феррона при $AS/2W = 1/3$ достигает 0,25 при $d=2$ и 0,35 при $d=3$. Таким образом, требование близости энергий для структур Ландау и Нееля на практике отнюдь не является жестким. Оно ослабляется еще более, если учесть понижение энергии афмона за счет скоса моментов подрешеток слоистой фазы.

Для учета этого скоса ниже будет использована вариационная методика. Будет считаться, что носитель заряда локализован в квадрате ($d=2$) или в кубе ($d=3$) со стороны L , и что на границах области его волновая функция обращается в нуль. Тогда с учетом (1,2) оптимальные параметры афмона должны быть найдены минимизацией по L и φ следующего выражения для энергии квазичастицы:

$$E_A = d\pi^2/2mL^2 - \frac{AS}{2} \cos \varphi - (3A^2S^2/4W)[\sin^2 \varphi - 1/d] + (L/a)^d D_{LN}(\varphi), \quad (4)$$

$$D_{LN} = \{-(2d-1)J_1 + 2J_2(d-1) - [J_1 + 2(d-1)J_2] \cos 2\varphi + 4(d-2)J_3(1 - \cos 2\varphi)\}S^2.$$

Здесь J_i – интегралы $d-d$ -обмена между i -ыми по дальности соседями соответственно, причем по условию стабильности структуры Нееля $J_1 < 2J_2$, $J_1 > 4J_3$.

При малых $l = S^2(2J_2 - J_1)$ для намагниченности афмона получается следующее выражение:

$$\cos \varphi = K_d l^{d/d+2}, \quad (5)$$

$$K_2 = 2^{1/2} \{ (16J_1S^2/AS)^2 (\pi^2/a^2m) - 4|J_1|S^2 \}^{-1/2},$$

$$K_3 = (AS/8|3J_1 + 4J_3|S^2(4ma^2/\pi^2)^{3/5}.$$

Согласно (5) намагниченность афмона на атом стремится к нулю при приближении к границе фаз $l=0$. Это есть следствие расходимости при $l \rightarrow 0$ размера L : $L \sim l^{-1/4}$ в двумерном и $L \sim l^{-1/5}$ в трехмерном случае. Соответственно, стремится к нулю молекулярное поле носителя тока, действующее на d -спины. Однако полный момент антиферриона остается конечным на границе фаз.

Интересно отметить, что существование решения в двумерном случае, то есть вещественность намагниченности (5), гарантируется неравенством, противоположным (3) для феррона. Таким образом, афмон может реализоваться только тогда, когда невозможен феррон. В трехмерном случае этого утверждать заранее нельзя.

Автолокализация носителя заряда возможна и при геликоидальном упорядочении в кристалле. В области локализации значение вектора геликоида должно быть уменьшенным, так как это понижает и энергию носителя. Детальный расчет будет представлен в другом месте.

-
1. P.de Gennes, Phys. Rev. **118**, 141 (1960).
 2. Э.Л.Нагаев, Письма в ЖЭТФ **6**, 484 (1967).
 3. Л.Н.Булаевский, Э.Л.Нагаев, Д.И.Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968); Э.Л.Нагаев, ЖЭТФ **58**, 1269 (1970).
 4. Э.Л.Нагаев, Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979; E.L.Nagaev, Phys. of magnetic semicond. М.: Mir, 1983.
 5. Э.Л.Нагаев, А.И.Подельщиков, ФТТ **23**, 859 (1981).