

## О МАГНИТНЫХ СВОЙСТВАХ ВАКАНСИИ В КВАНТОВОМ ФЕРМИ-КРИСТАЛЛЕ С ПЛОСКОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ

С.В.Иорданский

Показано, что конечная концентрация вакансий на плоской треугольной решетке ферми-атомов приводит к особой ферромагнитной структуре с магнитным моментом, равным  $1/3$  от момента насыщения.

В квантовом ферми-кристалле  $\text{He}_3$  прямой обмен положениями двух атомов сильно затруднен (соответствующий обменный интеграл  $J \sim \sim 1$  мК), в то же время ширина вакансионной зоны порядка  $t \sim 10$  К. Поэтому можно пренебречь прямым обменом и описывать систему при наличии вакансий моделью Хаббарда с бесконечным отталкиванием на одном и том же узле. При малом числе вакансий это будет случай зоны, заполненной несколько меньше, чем на половину. Делокализованные вакансии производят перестановки атомов, вызывая появление обменных сил и связанных с ними магнитных явлений.

Впервые такая задача рассматривалась Нагаокой [1]. Им было показано, что в кристаллах, решетки которых могут быть разбиты на две подрешетки, так что каждый узел одной подрешетки имеет ближайшими соседями (рассматривается приближение ближайших соседей) узлы только другой подрешетки, основное состояние является ферромагнитным с максимально возможным спином всего кристалла  $S_{max} = = 1/2 N$  ( $N$  – число атомов кристалла). Такие решетки мы будем называть делимыми. Свойства вакансии в ОЦК фазе  $\text{He}_3$ , являющейся делимой решеткой, рассматривались в работе [2].

Однако,  $\text{He}$  образует при достаточном давлении ГПУ решетку, не являющуюся делимой. Атомы  $\text{He}_3$  на поверхности различных адсорбентов [3] обычно образуют плоскую треугольную решетку, также неделимую. Поверхностные магнитные свойства  $\text{He}_3$  в последнее время интенсивно изучаются экспериментально [4]. В [5] была высказана гипотеза, что наблюдаемые явления могут быть связаны с вакансиями в поверхностном слое.

В настоящей статье будут рассмотрены магнитные свойства вакансии на треугольной плоской решетке. Сам подход, по-видимому, одинаков для всех неделимых решеток, хотя вычисления могут отличаться своей трудоемкостью.

Выберем базис в пространстве волновых функций, где каждый узел занят не более чем одним атомом, согласно [1]

$$\Psi(i, \alpha_i) = (-1)^i c_{1\sigma_1}^+ \dots c_{i-1\sigma_{i-1}}^+ c_{i+1\sigma_{i+1}}^+ \dots c_{N\sigma_N}^+ |0\rangle,$$

где  $c_j^+ \sigma_j$ ,  $c_j \sigma_j$  – операторы рождения и уничтожения частиц в узле  $j$ , с проекцией спина  $\sigma_j$  на некоторую ось,  $|0\rangle$  – состояние без частиц (ва-

куум)  $i$  — индекс, отмечающий положение вакансии на решетке,  $a_i$  — обобщенный индекс, задающий проекцию спинов во всех узлах кроме занятого. Волновая функция в этом базисе задается коэффициентами  $\Phi(i, a_i)$ , а действие обычного перескокового гамильтониана  $\hat{H}$  определяется формулой

$$\hat{H}\Phi(i, a_i) = t \sum_z \Phi(i+z, a_i^{i+z}) \quad (t > 0),$$

где  $z$  — ближайшие соседи, конфигурация спинов  $a_i^{i+z}$  получается из конфигурации  $a_i$  путем перемещения атома со спином  $a_{i+z}$  в узел  $i$ . Получается задача о перескоках на ближайших соседях по "суперрешетке"  $(i, a_i)$ .

Если мы вычтем из  $\hat{H}$  диагональную матрицу  $z\hat{I}$ , то отыскание энергии  $E_0$  основного состояния эквивалентно нахождению минимума функционала

$$\mathcal{E} = (E_0 - z) = \min \left\{ -t \frac{\sum_{i, a_i} (\Phi(i, a_i) - \Phi(i+z, a_i^{i+z}))^2}{\sum_{i, a_i} \Phi^2(i, a_i)} \right\}.$$

По сравнению с обычным разностным уравнением Шредингера, это выражение соответствует измененному знаку у кинетической энергии, так что меньшая энергия соответствует состояниям с большими градиентами.

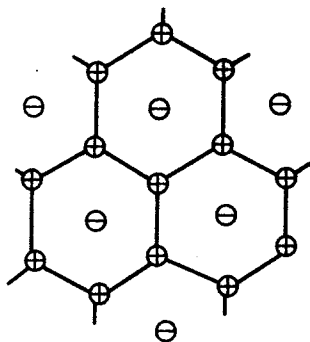
В случае делимых решеток состояние с максимальным градиентом легко построить, если приписать волновой функции значение  $(+1)$  на одной подрешетке и  $(-1)$  — на другой, вне зависимости от спиновой конфигурации, что соответствует ферромагнитному состоянию с максимальным спином. При этом каждая связь на решетке дает одинаковый вклад равный  $-4$ .

В случае независимости от спина у неделимых решеток часть связей работает неэффективно и их вклад больше  $(-4)$ , соответствующее низшее состояние (для максимального спина), получаемое согласно обычной зонной схеме, не соответствует основному, что было проиллюстрировано Нагаокой для ОЦК и ГПУ. Дело в том, что за счет спиновой переменной можно заставить работать часть неэффективных связей и существенно понизить энергию, если сделать так чтобы соседи на простой решетке (без учета спина) перестали быть таковыми на суперрешетке. Выгода достигается даже в случае одного перевернутого спина.

Сделать это во всех точках суперрешетки невозможно и волновая функция концентрируется около тех точек, где это возможно.

Реальное построение пробных функций использует вырождение низшего состояния с максимальным спином. Построим функцию с наибольшим количеством нулей на решетке для низшего состояния с максимальным спином. Направление спина в тех узлах, где функция обращается в нуль, несущественно, и будем считать его противоположным направлению в остальных узлах. Разрешив далее функции  $\Phi(i, a_i)$  быть от-

лично от нуля на конфигурациях, получаемых при попадании вакансии в узлы с первоначально перевернутым спином, мы можем произвести соответствующую минимизацию энергии.



Для треугольной решетки мы приходим к базисной конфигурации, когда атомы со спином плюс (+) находятся по периметру шестиугольников, а атомы со спином минус (-) — в их центре, как показано на рисунке. Волновая функция будет иметь максимум модуля для такой спиновой конфигурации и вакансии, находящейся на месте одного из + атомов. Расчет показывает, что вероятность нахождения вакансии на месте — атома, и одного — атома на периметре шестиугольника составляет менее 1/10 от вероятности оптимальной конфигурации и быстро убывает для более сложных искажений. Расчет дает энергию основного состояния на одну вакансию:

$$E_0 < -4,3t \quad (E_0(S_{max}) = -3t).$$

Таким образом, основное состояние атомов  $He_3$  на треугольной решетке при наличии конечной концентрации вакансий соответствует ненасыщенному ферро-магнетику с магнитным моментом равным 1/3 от насыщения. Сами положения вакансии образуют подрешетку типа сот на треугольной решетке, т. е. нарушается и пространственная симметрия.

Легко видеть, что возбуждения, соответствующие переходу вакансии в более высокое энергетическое состояние должны образовывать зону. Довольно точная оценка эффективной массы может быть получена, если рассматривать движение вакансии только на ферромагнитной "сотовой" подрешетке:

$$E(k) \approx -4,3 + \frac{9}{4} t k^2,$$

где  $a$  — ребро исходной треугольной решетки.

В случае одной вакансии на кристалл или при незаданном их числе, невозможно говорить о переходе всего кристалла в соответствующее магнитное состояние. Энтропийные [2] или энергетические соображения, при конечной величине константы прямого обмена  $J$ , приводят к тому что предложенная структура будет осуществляться в некотором конечном объеме, в котором вакансия локализуется. Соответствующие

вычисления мало чем отличаются от случая квадратной решетки [6] и дают для радиуса локализации

$$R \sim a(t/T)^{1/4} \quad (T \gg J); \quad R \sim a(t/J)^{1/4} \quad (J \gg T).$$

Автор выражает благодарность И.Е.Дзялошинскому и Л.П.Питаевскому за полезное обсуждение.

Институт теоретической физики  
им. Л.Д.Ландау  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
13 февраля 1979 г.

### Литература

- [1] Y.Nagaoka. Phys. Rev. 147, 392, 1966.
  - [2] А.Ф.Андреев. Письма в ЖЭТФ, 24, 608, 1976.
  - [3] M. Nielsen, J.P. McTague, W.Ellenson. J. de Phys., 38, C4-13, oct. 1977.
  - [4] A.I.Ahonen, T.A.Alvesalo, T.Haavosoja, M.C.Veuro. J. de Phys., 39, C6-285, Aug. 1978.
  - [5] R.P.Guer. PRL, 39, 1091, 1977.
  - [6] М.В.Фейгельман. Письма в ЖЭТФ, 27, 491, 1978.
-