Письма в ЖЭТФ, том 30, вып. 6, стр. 317 – 320 *20 сентября 1979 г.*

К СТРУКТУРЕ СВЕРХДИАМАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ

Б.А.Волков, Ю.В.Копаев, М.С.Нунупаров, В.В.Тугушев

Указан общий вид градиентно-инвариантного функционала свободной энергии, справедливый как в ферромагнитном, так и в сверхдиамагнитном случаях. На примере систем с электрон-дырочным спариванием показано, что сверхдиамагнитное состояние может реализоваться только как неоднородное. В частности оно может существовать в сегнетоэлектриках электронного типа в области доменных стенок.

1. В настоящей работе показано, что последовательный учет межзонных взаимодействий в системах с электрон-дырочным спариванием приводит к тому, что однородный ток [1] обращается в нуль. С другой стороны, как было показано в работе [2], отклик системы $\chi' = M/B$ на полное магнитное поле "B" (M – намагниченность) обращается в $-\infty$ при температуре T_{Im}, соответствующей зарождению мнимого параметра порядка Δ_{Im}. Следовательно, согласно выражению $H = B/\mu$ при температуре $T = T_{\mathrm{Im}}$ должно спонтанно возникать магнитное поле H даже в отсутствие магнитной индукции B ($\mu = 0$ при $T = T_{\mathrm{Im}}$).

Ферромагнитное же состояние (спонтанное B) возникает, когда отклик χ на H($\chi = M/H$) обращается в $+\infty$, т. е. $\mu = +\infty$ и потому $B = \mu H$ оказывается конечным даже при $H = 0$. Чтобы показать в общем виде возможность орбитального упорядочения как по H (сверхдиамагнетизм), так и по B (ферромагнетизм) мы приведем здесь без вывода функционал свободной энергии, в котором неравновесное значение обобщенного импульса $\mathbf{p}$ играет роль параметра порядка:

$$F(p) = -\frac{1}{2\pi}\mathbf{p}^2 - \mathbf{pA} + n\frac{\mathbf{A}^2}{2}, \qquad \mathrm{rot}\,\mathbf{A} = \mathbf{B}. \tag{1}$$

Здесь π – полный поляризационный оператор системы, для компонент Фурье которого в вершинах стоят операторы обобщенного импульса

$$\hat{p}_q = \frac{1}{2i} \left(\nabla e^{i\mathbf{qr}} + e^{i\mathbf{qr}} \nabla \right), \qquad e = \hbar = c = m = 1$$

h – плотность частиц системы.

Вариация функционала (1) по $\mathbf{A}$ дает ток, а равновесное значение $\mathbf{p} = \mathbf{p}_o$ определяется минимизацией (1) по $\mathbf{p}$.

Учитывая это нетрудно убедиться, что отклик системы на поле $\mathbf{A}$ есть

$$\mathbf{j_q} = -(\pi_\mathbf{q} + n)\mathbf{A_q}. \tag{2}$$

В соответствии с условием калибровочной инвариантности $\pi_q = -n$ для всех продольных $\mathbf{q}$ ($\mathbf{q} \parallel \mathbf{A}$). Поэтому при малых поперечных импульсах $\mathbf{q}_\perp$ оказывается, что $\mathbf{j_q} \sim \chi' \mathbf{q}_\perp^2 \mathbf{A_q}$, и очевидно, что в зависимости от знака суммы $(\pi_\mathbf{q} + n)$ может возникнуть расходимость χ' как в парамагнитную, так и в диамагнитную стороны. Важно заметить, что оба типа расходимости описываются единым калибровочно инвариантным функционалом, а стандартный функционал ферромагнетика $F = a\mathbf{M}^2 - \mathbf{MH}$ является частным случаем функционала (1), в котором выброшен третий (диамагнитный член $n(\mathbf{A}^2/2)$.

2. Особенность задачи об электрон-дырочном спаривании с мнимым параметром порядка состоит в том, что в представлении Блоха необходимо учитывать члены межзонного взаимодействия типа $g_3 a_1^+ a_1 a_1^+ a_2$, хотя и не приводящие к логарифмической особенности, но являющиеся источниками Δ_{Im} при отличном от нуля межзонном матричном элементе P_{12}. В представлении Кона – Латтинжера указанные члены отсутствуют, но зато имеется гибридизация типа $\sum_\mathbf{k} (\mathbf{p}_{12} \times \mathbf{k}) a_{1\mathbf{k}}^+ a_{2\mathbf{k}}$, которую мы будем учитывать одновременно с Δ_{Im}. В результате уравнения для функций Грина $G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ($i, j = 1, 2$ – зонные индексы) принимают вид

$$(\omega - \hat{\epsilon}_1)G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \left(\mathbf{P}\frac{\nabla}{i}\right)G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}''\Delta_{\mathrm{Im}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')G_{21}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') =$$

$$= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

$$(\omega - \hat{\epsilon}_2) G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \left(\mathbf{P}^* \frac{\vec{\nabla}}{i}\right) G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}'' \Delta_{\mathrm{Im}}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') G_{11}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = 0. \tag{3}$$

Если в (3) считать параметр $\Delta_{\mathrm{Im}}(r, r')$ зависящим только от разности $(r - r')$, то спектр одночастичных возбуждений $\widetilde{\epsilon}_{1,2}(k) = \pm\sqrt{(\mathbf{v}_F \mathbf{k})^2 + (\Delta + \mathbf{P}\times\mathbf{k})^2}$, т. е. несимметричен по $\mathbf{k}$ при четном $\Delta_{\mathrm{Im}}(\mathbf{k})$.

Определяя функции G_{ij} из (3) в этом случае и подставляя их в обычное выражение для тока

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = T\sum_n \left\{ \frac{ie}{m} (\vec{\nabla}_{\mathbf{r}'} - \vec{\nabla}_\mathbf{r})[G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \right. +$$

$$+ 2e[\mathbf{P}_{12}G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathbf{P}_{21}G_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]\Big\}_{\mathbf{r}' \to \mathbf{r}} \qquad (4)$$

можно убедиться, что однородный ток обращается в нуль, поскольку межзонный ток [1] точно компенсируется внутризонным; последний возникает в меру указанной выше несимметрии одночастичного спектра.

Отметим в связи с этим, что в работе [3] сделана попытка устранить однородный ток переопределением оператора тока без учета взаимодействия типа $g_3 a_1^+ a_1 a_1^+ a_2$ или гибридизации. При этом фактически было использовано временное уравнение первого порядка в задаче с обменным потенциалом, что является неверным [4, 5]. Кроме того даже при таком допущении дополнительное слагаемое в токе [3] остается конечным только в случае потенциала бесконечного радиуса действия. Подчеркнем, что при таком неверном определении межзонного тока [3] не происходит его компенсации внутризонным, т. е. однородный ток оказывается конечным, что противоречит теореме Блоха.

3. Если в уравнениях (3) удержать зависимость Δ_{Im} от координаты центра тяжести $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ электрон-дырочной пары и разложить их по $\Delta(\mathbf{R})$ и $(\mathbf{P}_{12} \times \hat{\mathbf{k}})$ вблизи T_{Im} [6], то после усреднения по элементарной ячейке получим следующее выражение для величины тока

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}) = \frac{7\xi(3)n}{8(\pi T_{\mathrm{Im}})^2}[P_{12}\vec{\nabla}^2_{\mathbf{R}} - \vec{\nabla}_{\mathbf{R}}(\mathbf{P}\nabla_{\mathbf{R}})]\,\Delta(\mathbf{R}). \qquad (5)$$

Заметим, что выражение (5) удовлетворяет условию поперечности тока $\mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0$. В двухзонной схеме $\mathrm{div}\,\mathbf{j} \sim u_1^* u_2$, обращается в нуль после интегрирования по элементарной ячейке в силу условия ортогональности (u_1, u_2 – блоховские модулирующие множители зон 1 и 2).

Не ограничиваясь конечным числом зон можно получить следующее выражение для $\mathrm{div}\,\mathbf{j}$:

$$\mathrm{div}\,\mathbf{j} = \frac{e}{i}\int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')\,\rho(\mathbf{r}'', \mathbf{r})\,d\mathbf{r}'' + \text{к. с.}, \qquad (6)$$

где

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|)\,\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')$$

$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')$ – полная матрица плотности, включающая все зоны $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|)$ – потенциал обменного взаимодействия. Отсюда, используя эрмитовость матрицы плотности видно, что условие $\mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0$ с учетом всех зон выполняется локально.

4. Как видно из формулы (5), ток в основном (сверхдиамагнитном) состоянии будет отличен от нуля, если минимуму свободной энергии отвечает неоднородный параметр Δ_{Im}. Как известно, независимо от фазы параметра Δ неоднородное состояние реализуется при неполной конгруэнтности поверхностей Ферми зон 1 и 2 [7]. Коэффициент γ_1 разложения свободной энергии F по параметру порядка в члене $\gamma_1(\partial\Delta/\partial\mathbf{R})^2$ или $\gamma_1 q^2\Delta^2$ меняет знак при более высокой температуре, чем коэффициент α в члене $\alpha\Delta^2$. Особенностью состояний с Δ_{Im} является анизотропия коэффициента γ_1. Следует отметить, что истинным

параметром порядка в этом случае является не Δ, а $\mathbf{q}\Delta$, что с учетом выражения (5) и уравнения Максвелла $\mathrm{rot}\,\mathbf{H} = 4\pi\mathbf{j}$ соответствует упорядочению по магнитному полю $\mathbf{H}$.

Отмеченная выше несимметрия одночастичного спектра при замене $\mathbf{k}$ на $-\mathbf{k}$ в случае однородного Δ_{Im} приводит к неоднородному состоянию даже при полностью конгруэнтных поверхностях Ферми. В этом случае $q_{\text{опт}}^2 \sim \Delta_{\mathrm{Im}}$, т. е. $j \sim \Delta_{\mathrm{Im}}^2$.

5. Утверждение о том, что в меру межзонных взаимодействий происходит фиксация фазы параметра порядка, справедливо лишь в однородном случае. Из-за того, что в свободной энергии существует инвариант типа

$$\mathbf{P}_{12}\Delta_{\mathrm{Im}}(\Delta_{\mathrm{Re}}\,\mathrm{grad}\,\Delta_{\mathrm{Im}} - \Delta_{\mathrm{Im}}\,\mathrm{grad}\,\Delta_{\mathrm{Re}}) \tag{7}$$

фаза параметра Δ является функцией координат. Такое состояние может быть основным в сегнетоэлектриках электронного типа [8], в которых поляризация пропорциональна Δ_{Re}. Максимальное значение тока будет приходиться на область доменной стенки, в которой фаза плавно проходит через $\pi/2$.

Из всего сказанного следует, что структура сверхдиамагнитного состояния весьма чувствительна к характеристикам высокотемпературной симметричной фазы.

Авторы искренне благодарны В.Л.Гинзбургу, Л.В.Келдышу и Д.А.Киржницу за полезные дискуссии.

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

Поступила в редакцию
13 июня 1979 г.

Литература

[1] Б.А.Волков, Ю.В.Копаев. Письма в ЖЭТФ, 27, 10, 1978.

[2] Б.А.Волков, Ю.В.Копаев, В.В.Тугушев. Письма в ЖЭТФ, 27, 615, 1978.

[3] Э.Г.Батыев. Письма в ЖЭТФ, 29, 381, 1979.

[4] P.A.M.Dirac. Proc. Cambridge Phil. Soc., 26, 376, 1930.

[5] Л.П.Горьков, Г.М.Элиашберг. ЖЭТФ, 54, 612, 1968.

[6] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., 1962.

[7] T.M.Rice. Phys. Rev., 28, 3619, 1970.

[8] В.Ф.Елесин, Ю.В.Копаев. Письма в ЖЭТФ, 24, 78, 1976.