

КВАЗИДВУМЕРНОСТЬ КАК ПРИЧИНА РАЗРУШЕНИЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ПОРЯДКА НОСИТЕЛЯМИ ТОКА В МАТЕРИАЛАХ ТИПА ВТСП

© Э.Л.Нагаев

Институт физики высоких давлений Российской академии наук,
142092 Троицк, Московская обл., Россия
(Поступила в Редакцию 6 октября 1995 г.)

Причиной магнитного разупорядочения антиферромагнитных вырожденных полупроводников типа ВТСП, описываемых $s-d$ -моделью, может быть их квазидвумерность. Если концентрация носителей заряда недостаточна для разупорядочения всего кристалла, может произойти разделение кристалла на разупорядоченную и антиферромагнитную фазы со сосредоточением всех носителей в первой из них

Экспериментальные данные указывают на исчезновение антиферромагнитного (АФМ) упорядочения при легировании материалов, являющихся базисными для ВТСП (см. [1]). Предложено несколько теорий для объяснения несовместимости сверхпроводимости и АФМ дальнего порядка в ВТСП. Так, в [2] это связывается с дефектностью кристалла, в [3,4] получается расчетом для идеального кристалла, описываемого $t-J$ -моделью. Результаты [3,4] можно было бы объяснить тем, что состояния носителей в $t-J$ -модели соответствуют магнитным струнам (квазиосцилляторам), в которых АФМ-упорядочение локально частично разрушено [5]. Однако результаты [3] и [4] во многом противоречат друг другу, а адекватность $t-J$ -модели для ВТСП вызывает сомнения (см. [1]). Это делает необходимым дальнейшее исследование вопроса о магнитном разупорядочении ВТСП.

Далее предложен новый механизм разрушения АФМ-упорядочения носителями тока в идеальном проводнике, описываемом $s-d$ -моделью, адекватность которой для ВТСП обоснована в [1]. Абсолютный минимум энергии носителя достигается при ферромагнитном (ФМ) упорядочении [1]. При других же магнитных структурах энергия тем ниже, чем сильнее длинноволновые фурье-компоненты представлены в них, т. е. чем ближе они к ФМ. В случае когда спины полностью разупорядочены, относительный вес длинноволновых компонент в квазидвумерном случае настолько велик, что s -электронный массовый оператор в борновском приближении логарифмически расходится. В то же время, например, в шахматной АФМ-структуре длинноволновые компоненты полностью отсутствуют, и потому энергия s -электрона в ней должна быть выше, чем в отсутствие порядка.

В принципе то же соотношение между энергиями должно иметь место и в изотропных кристаллах, но там разность энергий существенно меньше (расходимость массового оператора в борновском приближении отсутствует). Тем не менее, судя по эксперименту, и здесь энергия s -электрона в разупорядоченном состоянии может быть намного ниже, чем в АФМ (в CoO , MnO и $\alpha\text{-MnS}$ на $0.2\text{--}0.3\text{eV}$ [6]).

Если плотность s -электронов в вырожденном полупроводнике типа ВТСП достаточно велика, то даже при $T = 0$ может оказаться энергетически выгодным разрушение АФМ-порядка, устанавливаемого $d-d$ -обменом: затраты энергии $d-d$ -обмена на разрушение АФМ-порядка будут скомпенсированы выигрышем в энергии s -электронов. Однако при этом следует еще убедиться в том, что не окажется еще более энергетически выгодным установление какой-либо иной структуры, например ФМ. Но затраты энергии $d-d$ -обмена, необходимые для разрушения АФМ-упорядочения, существенно ниже, чем для создания ФМ-упорядочения. Поэтому вполне реалистична ситуация, когда разрушение магнитного упорядочения в вырожденном полупроводнике более энергетически выгодно, чем установление ФМ- или иного порядка.

Разупорядоченное состояние, в отличие от ФМ совместимо с возможностью синглетного спаривания носителей. Однако типичные энергии обменных взаимодействий в ВТСП велики по сравнению с энергией спаривания, и потому сама сверхпроводимость вряд ли заметно влияет на магнитное разупорядочение. Но оно может стать более эффективным, если учесть еще дефектность кристалла. Тогда механизмы этого явления, предложенные в [2] и здесь, усиливают друг друга.

Если плотность носителей недостаточна для разрушения магнитного порядка во всем кристалле, они могут сосредоточиться в какой-либо части кристалла и там разрушить его. Остальная часть кристалла остается АФМ и изолирующей. Это новый тип электронного разделения фаз (разделение вырожденного АФМ-кристалла на АФМ- и ФМ-фазы было предсказано еще задолго до открытия ВТСП [7-9]).

Рассмотрение основано на стандартном гамильтониане $s-d$ -модели (см., например, [9]). Считается, что решетка кристалла простая квадратная с постоянной a и что $AS \ll W \equiv 8t$, где A — интеграл $s-d$ -обмена, S — величина d -спина, t — s -электронный интеграл перескопа между ближайшими соседями. В случае если намагниченность у кристалла отсутствует, в однопетлевом приближении, сводящемся для трехмерных систем к борновскому, ренормированная энергия носителя $E_{\mathbf{k}}$ дается выражением

$$E_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}^0 + (A^2/4N^2) \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{f}} \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{g}} \mathbf{S}_{\mathbf{f}} \rangle \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{g} - \mathbf{f})] / (E_{\mathbf{k}}^0 - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - i0), \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_{\mathbf{g}}$ — спин атома \mathbf{g} , угловые скобки означают термодинамическое усреднение. Через $E_{\mathbf{k}}^0$ обозначена затравочная энергия s -электрона,

$$E_{\mathbf{q}}^0 = -2t[\cos q_x a + \cos q_y a]. \quad (2)$$

В случаях полного спинового разупорядочения и шахматной АФМ-структуры с вектором $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ при $T = 0$ корреляционные функции даются соответственно выражениями

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{g}} \mathbf{S}_{\mathbf{f}} \rangle = S(S + 1) \delta_{\mathbf{g}\mathbf{f}}, \quad (3)$$

$$\langle S_g S_f \rangle = S^2 \exp[i\mathbf{Q}(\mathbf{g} - \mathbf{f})] + S\delta_{\mathbf{g}\mathbf{f}}. \quad (4)$$

Из (1)-(3) получается следующее выражение для сдвига дна s -зоны ($\mathbf{k} = 0$), индуцированного s - d -обменом, в разупорядоченном состоянии:

$$\delta E_0^D = E_0^D - E_0^0 = -2tx, \quad (5)$$

где x определяется из уравнения

$$x/\ln(16/x) = A^2 S(S+1)/32t^2.$$

Для АФМ-состояния соответствующее выражение имеет вид

$$\delta E_0^N = E_0^N - E_0^0 = -2tC^N - 2ty^N, \quad (6)$$

где y^N удовлетворяет уравнению

$$y^N \simeq (2C^N/S) \ln[16/(C^N + y^N)], \quad C^N = (AS/8t)^2.$$

Численный расчет показывает, что энергия s -электрона в разупорядоченном состоянии существенно ниже, чем в АФМ: отношение $\delta E_0^D/\delta E_0^N$ близко к 1.5 при $S = 1/2$. При $S \rightarrow \infty$ оно стремится к 6.4.

Если взять из [6] $|\delta E_0^D - \delta E_0^N| = 0.3 \text{ eV}$, то при относительной концентрации носителей, равной 0.1, разрушение АФМ-порядка носителями энергетически выгодно, если энергия D d - d -обмена на атом меньше 0.03 eV, т. е. этот процесс может происходить даже в достаточно высокотемпературных антиферромагнетиках.

Обсудим теперь разделение кристалла на АФМ- и разупорядоченную фазы при меньших концентрациях носителей. Будет рассматриваться только случай, когда в каждой разупорядоченной области находится по одному носителю (аналог [7]). Считается, что область имеет форму круга с радиусом $R \gg a$. В отличие от [7] здесь флуктуации d -спинов вызывают флуктуации электронного уровня внутри разупорядоченной области и глубина U потенциальной ямы, каковой является для s -электрона разупорядоченная область, зависит от R . Тогда R определяется из условия минимума средней энергии, складывающейся из кинетической и потенциальной энергий электрона и затрат d - d -энергии на разупорядочение области радиуса R ,

$$E = x_1^2 ta^2/R^2 - U(R) + \pi D(R/a)^2, \quad (7)$$

где x_n — n -й корень функции Бесселя $I_0(x)$. Выражения для $U(R)$ приводятся в двух предельных случаях: большого или малого расстояния между s -электронными уровнями в потенциальной яме. В первом из них учитывается только основное дважды вырожденное орбитальное состояние с противоположными проекциями s -электронного спина s , между которыми вызывает переходы s - d -обмен со структурой $A(S_g S_f)$

$$U = (Aa/2R)[S(S+1)/\pi]^{1/2} - \delta E_0^N, \quad (8)$$

где δE_0^N дается (6). Во втором случае

$$U = [A^2 S(S+1)/4N] \Sigma'(E_g - E_q)^{-1} - \delta E_0^N, \quad (9)$$

где g означает основное состояние системы, а штрих указывает на то, что суммирование начинается со следующего за ним уровня. При больших S в главном приближении по $1/S$ из (6), (9) следует

$$U = [A^2 S^2 m a^2 / 8\pi] \left\{ \ln[4\pi R^2 / (a^2 x^2)] - 1 \right\}, \quad x^2 = x_2^2 - x_1^2. \quad (10)$$

В этом случае из (7) получается выражение для равновесного радиуса

$$R = \left\{ C a / [4\pi D] + C^2 / [16\pi^2 D^2] + x_1^2 a^2 / [2\pi D m]^{1/2} \right\}^{1/2},$$

$$C = A^2 S^2 m a^2 / 8\pi. \quad (11)$$

Для относительной дисперсии δ глубины электронного уровня в том же приближении получается

$$\delta = \left\{ 2(6\pi)^{1/2} x \ln(\pi R / x a) \right\}^{-1}, \quad (12)$$

чем и оправдывается пренебрежение флуктуациями уровня при $R \gg a$. Для случая $S = 1/2$ возможны только численные расчеты автолокализованного состояния носителя.

Аналогично может быть рассмотрено разрушение магнитного порядка в дефектных кристаллах неионизованными донорами или акцепторами. Для этого достаточно включить в (7) электростатический потенциал взаимодействия s -электрона с примесным центром и далее использовать (8), (9) в той же схеме, что применялась в [7] при расчете ФМ-порядка в окрестности донора в АФМ-кристалле.

Работа выполнена при финансовой поддержке Международного научного фонда (гранты № MUB000 и MUB300) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 94-02-03332-а).

Список литературы

- [1] E.L. Nagaev. From Magnetic Semiconductors to High- T_c Superconductors. Cambridge University Press (1996).
- [2] A. Aharony, R. Birgeneau, A. Coniglio, M. Kastner, H. Stanley. Phys. Rev. Lett. **60**, 1330 (1988).
- [3] T. Lee, Shiping Feng. Phys. Rev. **B38**, 11809 (1988).
- [4] A. Auerbach, B. Larson. Phys. Rev. **B43**, 7800 (1991).
- [5] Л.Н. Булаевский, Э.Л. Нагаев, Д.И. Хомский. ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).
- [6] H. Chou, H. Fan. Phys. Rev. **B10**, 901 (1974).
- [7] Э.Л. Нагаев. Письма в ЖЭТФ **6**, 484 (1967); Э.Л. Нагаев. ЖЭТФ **54**, 228 (1968).
- [8] Э.Л. Нагаев. Письма в ЖЭТФ **16**, 558 (1972); В.А. Кашин, Э.Л. Нагаев. ЖЭТФ **66**, 2105 (1974).
- [9] Э.Л. Нагаев. УФН **165**, 529 (1995).