

- [3] Хеерман Д. // Компьютерное моделирование в теоретической физике. М.: Наука, 1989. 190 с.
- [4] Полухин В. А., Ватолин Н. А. // Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985. 325 с.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
10 апреля 1991 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 10, 1991
Solid State Physics, vol. 33, № 10, 1991

МАГНИТНЫЕ АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В АМОРФНЫХ КРЕМНИИ И ГЕРМАНИИ

Э. Л. Нагаев

Анализ экспериментальных данных по электрическим и оптическим свойствам a -Si и a -Ge приводит на первый взгляд к удивительному выводу: хотя эти материалы слабые магнетики, их свойства качественно во многом сходны с магнитными полупроводниками. У кристаллических Si и Ge такое сходство отсутствует. Сказанное прежде всего относится к изотропному отрицательному магнетосопротивлению, наблюдаемому практически во всех магнитных полупроводниках [1]. Такое магнетосопротивление наблюдается и в a -Ge и в a -Si [2, 3], хотя оно как минимум на два порядка ниже, чем в магнитных полупроводниках. В кристаллических Ge и Si магнетосопротивление анизотропно и положительно. В [4] у аморфных полупроводников было обнаружено изотропное фотомagnetосопротивление, знак которого противоположен знаку темнового магнетосопротивления. В [5] наблюдалось очень сильное влияние магнитного поля на люминесценцию a -Si: чрезвычайно слабое поле 30 Гс усилило ее на вполне ощутимую величину $\sim 1\%$.

Такое поведение a -Si и a -Ge можно объяснить, если допустить, что внутри этих материалов имеются области, обладающие свойствами сильных магнетиков. Этими областями могут быть поверхности пор, неизбежно присутствующих в аморфных материалах. У атомов на поверхности пор s - p -связи, направленные внутрь поры по нормали к поверхности, болтающиеся. Однако болтающиеся орбитали, принадлежащие соседним атомам с поверхности поры, перекрываются друг другом в какой-то степени. В результате этого между такими атомами возникают обменные взаимодействия с характерной энергией, малой по сравнению с энергией химической s - p -связи. Таким образом, поверхность поры с болтающимися связями становится сильным магнетиком, в котором должно происходить упорядочение спинов неспаренных s - p -электронов. Экспериментальные данные, которые бы свидетельствовали о ферромагнетизме поверхности пор, отсутствуют. Поэтому естественно допустить в качестве альтернативы, что из-за нерегулярности формы поры ее поверхность представляет собой дефектный антиферромагнетик или спиновое стекло. Существование магнитного порядка при конечных температурах гарантируется в такой двумерной системе конечностью числа ее атомов.

Тип магнитного упорядочения поры может радикально измениться, если на поверхности поры появится дополнительный электрон. Он может перейти из валентной зоны, тогда пора выступает как акцептор, или из зоны проводимости, тогда пора выступает как донор. Этот электрон может сделать ферромагнитной либо всю пору, либо ее часть, в которой он и локализуется. Последнее означало бы ферронную автолокализацию электрона в созданной им самим ферромагнитной микрообласти, впервые рассмотренной в [6] (о ферронах см. подробнее в [1]).

Именно в этом случае может наблюдаться изотропное отрицательное магнетосопротивление. Магнитное поле должно приводить к существенному понижению акцепторного уровня, порождаемого порой, которое связано с тем, что в магнитном поле уменьшается энергия феррона. Это понижение должно привести к росту концентрации дырок в валентной зоне, т. е. падению сопротивления, с ростом поля. При высоких температурах, когда все акцепторы ионизованы, понижение сопротивления из-за роста числа дырок должно исчезать, как это и наблюдалось в [2, 3].

Что же касается полевой зависимости люминесценции, то ее можно связать с тем, что поле ориентирует магнитные моменты пор, захвативших фотозлектрон. Так как эти моменты велики по сравнению с атомными, их направление должно быть чувствительно к слабым полям.

Количественное рассмотрение ферронных состояний производится с учетом того, что захваченный порой электрон движется по атомам поверхности поры, занимая в них те же $s-p$ -орбиты, что и электроны на болтающихся связях, но с противоположным спином. В этих условиях переход лишнего электрона с атома на атом происходит без изменения магнитного порядка, лишь если он ферромагнитный. Тогда электрон движется свободно по полупроводнику. Если же он, например, антиферромагнитный, то свободное движение электрона невозможно. Электрон должен совершать движение типа осциллятора относительно некоторого центра, при нахождении электрона на котором антиферромагнитное состояние не нарушено. Отход электрона от центра сопровождается разрушением антиферромагнитного упорядочения, т. е. повышением энергии магнитного упорядочения. Это и ведет к появлению квазиупругой силы, стремящейся вернуть электрон в центр. Идея такого состояния, названного квазиосциллятором, была выдвинута еще в [7] и подробно описана в [1]. (В современных работах других авторов, развивающих идеи [7], используется термин «струна»). Однако ферронное состояние может оказаться энергетически выгоднее квазиосциллятора даже в отсутствие магнитного поля и, безусловно, становится выгоднее его в достаточно сильном поле.

Это подтверждается модельным расчетом, проведенным для антиферромагнитной простой квадратной решетки. Для энергии квазиосциллятора ε_q удается получить только общий характер зависимости энергии от поля и ее оценку снизу. Они находятся, если от уравнения, описывающего движение квазиосциллятора по различным траекториям, перейти к эффективному волновому уравнению подобно тому, как это делается в [8]. Нижняя оценка ε_q^L энергии квазиосциллятора находится из волнового уравнения

$$\left\{ \mathcal{H}_{Ai} - \frac{1}{2mr} \frac{d}{dr} \right\} \varphi = \varepsilon_q^L \varphi \quad (\hbar = 1),$$

$$\mathcal{H}_{Ai} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + fr, \quad f = |\mathcal{J}| \sin^2 \beta, \quad \cos \beta = \frac{\hbar}{2|\mathcal{J}|}, \quad (1)$$

где m — эффективная масса электрона, \mathcal{J} — интеграл обмена между соседними атомами, β — угол между моментом подрешетки и внешним магнитным полем \hbar (в энергетических единицах). Согласно (1), с учетом того, что $\varphi(\infty) = 0$, можно написать

$$\varepsilon_q^L = \int \varphi \mathcal{H}_{Ai} \varphi d^2r + \frac{\pi}{2m} \varphi^2(0) > \int \Psi \mathcal{H}_{Ai} \Psi d^2r \equiv \varepsilon_q,$$

где Ψ — собственная функция гамильтониана \mathcal{H}_{Ai} , ε_q — его минимальное собственное значение. Найденное при условии $\varphi'(0) = \Psi'(0) = 0$, гарантирующем максимум волновой функции основного состояния при $r=0$, оно дается выражением

$$\varepsilon_q > \varepsilon_q^L > \varepsilon_q = 3.6 |\mathcal{J}|^{1/2} |B|^{1/2} \sin^{1/2} \beta, \quad \frac{1}{2m} = |B| a^2, \quad (2)$$

где B — блоховский интеграл, a — межатомное расстояние.

Энергия ферронного состояния находится стандартным вариационным методом, изложенным в [1]. Для феррона большого радиуса получается следующая оценка:

$$\varepsilon_f < \varepsilon_f^> = 17 |J|^{1/2} |B|^{1/2} \sin^2 \beta. \quad (3)$$

Параметрически ε_q (2) и ε_f (3) отличаются друг от друга формально множителем $(J/B)^{1/2}$, который даже при отношении блоховского интеграла B к обменному $J \sim 10^2$ оказывается ~ 1 . Одного порядка и численные коэффициенты в (2) и (3). Поэтому даже при $\hbar=0$ феррон может быть энергетически выгоднее квазиосциллятора. Если же это не так, то при увеличении \hbar должен происходить переход из квазиосцилляторного в ферронное состояние из-за более сильного понижения энергии последнего.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Нагаев Э. Л. Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979. С. 431.
- [2] Mell H. // J. Non-Cryst. Sol. 1970. V. 4. P. 304—309.
- [3] Kubelik I. // Czech. J. Phys. 1973. V. B23. P. 115—120.
- [4] Mell H. // Phys. Stat. Sol. b. 1978. V. 88. P. 531—537.
- [5] Street A. // Solid State Electron. 1978. V. 21. P. 1461—1468.
- [6] Нагаев Э. Л. // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 6. С. 484—486.
- [7] Булаевский Л. Н., Нагаев Э. Л., Хомский Д. И. // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. С. 1562—1567.
- [8] Фейнман Р., Хиббс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. С. 382.

Научно-производственное
объединение «КВАНТ»
Москва

Поступило в Редакцию
17 апреля 1991 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 10, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 10, 1991

ОБ АНОМАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$

М. В. Красинькова, Б. Я. Мойжес

1. Недавно были опубликованы [1] результаты измерений теплопроводности κ_{\parallel} монокристаллов $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ с разным содержанием сверхстехиометрического кислорода δ . Обычно сверхстехиометрические атомы, как и другие точечные дефекты, уменьшают теплопроводность решетки вследствие дополнительного рассеяния фононов [2]. Парадоксально, что у $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ теплопроводность при увеличении δ , наоборот, растет и растет существенно — в 2—3 раза [1].

Получается, что при введении сверхстехиометрического кислорода как бы не только создаются центры рассеяния фононов, но еще и залечиваются какие-то другие центры рассеяния, имеющиеся в стехиометрическом кристалле, причем последний эффект является решительно преобладающим. Обсуждению этого вопроса и посвящена настоящая заметка.

2. Начнем со стехиометрического La_2CuO_4 . Для этого соединения характерна очень низкая теплопроводность ($\kappa_{\parallel} = 1.2$ Вт/мК) по сравнению, например, [3] с $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ ($\kappa_{\parallel} = 8 \div 10$ Вт/мК) или другими окислами (у кристаллического кварца $\kappa = 10$ Вт/мК при 300 К [4]). Отметим также, что теплопроводность La_2CuO_4 почти не зависит от температуры [1] в довольно большом интервале $T = 100 \div 300$ К. Столь низкие абсолютные величины κ и столь слабая зависимость $\kappa(T)$ характерны скорее для аморфных неупорядоченных материалов, чем для кристаллов [4]. Оценим среднюю длину свободного пробега фононов L исходя из формулы

$$\kappa = \frac{1}{3} C \bar{v} L. \quad (1)$$