Краткие сообщения по физике № 2 1977

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ НА МЕХАНИЗМ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. Н. Кочарян

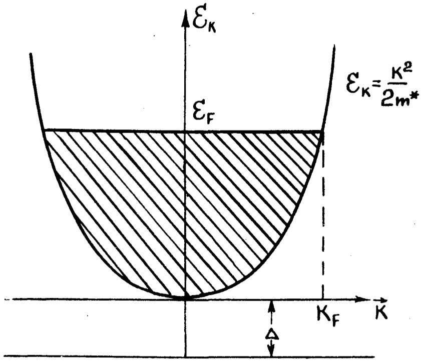
УДК 538.22I

Рассмотрена модель магнитных полупроводников на основе редкоземельных металлов и показано, что влияние легирования сводится к добавке к исходному обмену члена типа Рудермана-Киттеля с перенормированной обменной константой $\tilde{J} = J - 2V^2/(\Delta + \varepsilon_k)$, зависящей от импульса.

Влияние легирования на обменное взаимодействие в магнитных полупрводниках рассматривают обычно следующим образом /I/. Считается, что существует непосредственно обменное взаимодействие между спином локализованных электронов $-2I_{nm}\vec{S}_n\vec{S}_m$, природа которого не конкретизируется, и имеется дополнительный вклад в обмен от электронов проводимости, даваемый выражением Рудермана-Киттеля (РККИ) /2/.

В работе /3/ была рассмотрена модель магнитных полупроводников на основе редкоземельных металлов (РЗМ) и было получено эффективное обменное взаимодействие, вызванное взаимодействием через пустую зону проводимости. Такая модель оказалась хорошим приближением как для объяснения магнитных свойств непроводящих РЗ соединений, так и для понимания самого механизма обмена в них. Поэтому представляет интерес рассмотреть в той же модели возможное влияние легирования на магнитные свойства. В модели /3/ можно было ожидать, что при появлении в зоне проводимости свободных носителей (например, при легировании) не только появится дополнительный вклад в обмен за счет самих электронов проводимости, но может измениться и исходный обмен, так как при легировании часть зоны проводимости блокирована для виртуальных переходов свободными электронами.

Ниже будет рассмотрено обменное взаимодействие при учете легирования и показано, что и в этом случае воспроизводится в общих чертах прежний вывод, то есть влияние электронов проводимости сводится к добавлению к исходному обмену члена, аналогичного РККИ. В этом случае, однако, вместо внутриатомного s-f обмена J войдет комбинация типа $J - 2V^2/(\Delta + \varepsilon_{\vec{k}})$, представляющая собой полный эффективный s-f обмен при учете гибридизации s- и f-состояний.



Р и с. I. Δ- щель, отделяющая локализованный f-уровень от дна зоны проводимости; в зоне проводимости $\varepsilon_k = k^2/2m^*$

Будем исходить из зонной структуры, показанной на рис. I, и рассмотрим ситуацию, когда в зоне проводимости имеется некоторое число электронов N_s, считая при этом, что электроны в зоне находятся в состоянии Ферми-вырождения, с импульсом k_F, определяющимся из условия $N_s = \frac{4\pi}{3} k_F^3$.

Гамильтониан модели имеет вид /3/

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + (-\Delta) \sum_{j,\sigma} b^+_{j\sigma} b_{j\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,\vec{k},\sigma} (V_{jk} a^+_{\vec{k}\sigma} b_{j\sigma} +$$

$$+ \text{э.с.}) - (J/2) \sum_{j,\sigma,\sigma'} a^+_{j\sigma} a_{j\sigma'} b^+_{j\sigma'} b_{j\sigma} = H_0 + \hat{V} + \hat{J}. \qquad (I)$$

Здесь первый член - кинетическая энергия электронов проводимости, второй - энергия локализованных f-электронов в узельном представлении. Третий член в (I) описывает s-f гибридизацию и четвертый - внутриатомный локальный обмен (иначе имеющий вид

$(J/2)\sum_j ((1/2) + 2\vec{\sigma}_j\vec{S}_j)$, где σ_j – спин электрона проводимости и S_j – спин f-электрона). Поскольку волновая функция f-электрона сильно локализована, то гибридизацию также можно считать локальной и имеющий вид $V_{jk} = V\exp(i\vec{k}\vec{R}_j)$ /3,4/.

Без учета гибридизации и внутриатомного обмена при низких температурах основное состояние 2^N-кратно вырождено по спинам f-электронов. Гибридизация совместно с локальным обменом приводят к снятию вырождения по спинам во втором, третьем и четвертом порядках теории возмущений по V и J (V и J представляют в нашей модели слабое возмущение, V, $J \ll \Delta, B$, где $B \approx 1/m^*$ – ширина зоны проводимости). Эффективный гамильтониан обменного взаимодействия, получающийся по теории возмущений из (I), имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = \Big\langle \hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{J}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V} + \hat{J}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{V}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{J} + \hat{J}\frac{1}{E_0-H_0}\hat{J}\Big\rangle. \quad (2)$$

Усреднение здесь идет по основному состоянию системы при отсутствии гибридизации и обмена.

Выражение (2) описывает различные физические процессы, приводящие к обмену. Так, первому слагаемому в (2) соответствует процесс суперобмена, приводящий к антиферромагнетизму /3/, но при учете фермиевского заполнения в зоне. Второй член в (2) – ферромагнитный обмен /3/, модифицированный тем же фактором. Но кроме того в (2) дополнительно появляются процессы, приводящие к механизму обмена с участием электронов проводимости (третий, четвертый и пятый члены в (2)).

Подставляя в (2) явный вид соответствующих операторов и проводя необходимые коммутации операторов $a^+_{k\sigma}$ и $a_{k\sigma}$, с использованием условия $\langle a_{\vec{k}_1\sigma}a^+_{\vec{k}_2\sigma}\rangle = (1 - n_{k_1})\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}$, где $n_k = 1$ при $k<k_F$, $n_k = 0$ при $k>k_F$, получаем

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = \sum_{i\neq j} (J^0_{ij} + J^{\text{cond}}_{ij})\vec{S}_i\vec{S}_j, \quad (3)$$

где

$$J^{o}_{ij} = \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_{\vec{k}_1}} - J\right)\frac{V^2\exp\left[i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}_{ij}\right](1-n_{k1})(1-n_{k2})}{(\Delta+\varepsilon_{\vec{k}1})(\Delta+\varepsilon_{\vec{k}2})}, \quad (4)$$

$$J^{cond}_{ij} = \frac{1}{2N^2}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_{\vec{k}_1}} - J\right)\frac{\exp\left[i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}_{ij}\right](1-n_{k1})n_{k2}}{\varepsilon_{\vec{k}2}-\varepsilon_{\vec{k}1}} \quad (5)$$

и $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_i - \vec{R}_j$. Здесь использован обычный переход от электронных операторов к спиновым $b^+_{i\pm}b_{i\pm} = \frac{1}{2} \pm S^z_i$, $b^+_{i\pm}b_{i\mp} = S^{\pm}_i$. Выражение (4) представляет обменное взаимодействие (см. (4) и (5) в /3/), несколько видоизмененное наличием электронов в зоне, а J^{cond}(5) сходно с обычным обменом РККИ за счет электронов проводимости, где только эффективная константа $\mathcal{J} = J - 2V^2/(\Delta+\varepsilon_{\vec{k}})$ сама зависит от импульса, причем первый член в $\mathcal{J}$ - обычный обмен, а второй имеет вид, возникающий в модели Андерсона /5/ при преобразовании Шриффера-Вольфа /6/.

Воспользовавшись рядом элементарных тождеств, выражения (3)-(5) легко привести к эквивалентному виду:

$$\mathcal{H}_{эфф} = \sum_{i\neq j}(J'^{o}_{ij} + J'^{cond}_{ij})\vec{S}_i\vec{S}_j = \sum_{i\neq j} J^{обм}_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j, \quad (6)$$

где

$$J'^{o}_{ij} = \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_{\vec{k}}} - J\right)\frac{V^2\exp\left[i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}_{ij}\right]}{(\Delta+\varepsilon_{\vec{k}1})(\Delta+\varepsilon_{\vec{k}2})}, \quad (7)$$

$$J'^{cond}_{ij} = \frac{1}{2N^2}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_{\vec{k}2}} - J\right)^2\frac{\exp\left[i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}_{ij}\right]n_{\vec{k}2}}{\varepsilon_{\vec{k}2}-\varepsilon_{\vec{k}1}}. \quad (8)$$

В (7) суммирование уже распространяется по всем импульсам $\vec{k}$ и этот член в точности совпадает с эффективным взаимодействием в отсутствие электронов проводимости /3/. Выражение для J^{cond} (8) также упростилось сравнительно с (5). Итак, при наличии электронов в модели (I) получается одновременно два различных по своей природе механизма обмена: короткодействующий сверхобмен, известный для непроводящих систем, и дальнодействующий обмен РККИ с фриделевскими осцилляциями.

В предельных случаях слабого ($k_F^2/2m^* = \varepsilon_F \ll \Delta$, $k_F R \ll 1$) и [сил]ьного ($k_F R \gg 1$) легирования получаем соответственно

$$\Phi = \frac{V^4 \Omega^2}{2\pi^2 \sqrt{2m^*\Delta}} \frac{\exp(-2\sqrt{2m^*\Delta}R)}{R} - \frac{JV^2\Omega^2}{4\pi^2} \exp(-2\sqrt{m^*\Delta}R) -$$

$$- \frac{m^* k_F^3 \Omega^2}{24\pi^2} \left(\frac{2V^2}{\Delta} - J \right) \frac{1}{R} + O(k_F^5), \quad k_F R \ll 1 \qquad (9)$$

$$\Phi = \frac{m^* k_F^4 \Omega^2}{4\pi^3} \left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_F} - J \right)^2 \left[\frac{2k_F R\cos 2k_F R - \sin 2k_F R}{(2k_F R)^4} \right] +$$

$$+ \frac{k_F^6 \Omega^2}{\pi^3} \left(\frac{2V^2}{\Delta+\varepsilon_F} - J \right) \frac{V^2}{(\Delta+\varepsilon_F)^2} \frac{\sin 2k_F R}{(2k_F R)^4} + O((k_F R)^{-5}), \; k_F R \gg 1$$

[При] получении (9) мы не рассматриваем возможности негайзенберговс[ко]го характера обмена при малой концентрации свободных электро[нов] /7/.

Из (9) видно, что слабое легирование приводит к появлению [фе]рромагнитного слагаемого, пропорционального концентрации N_s. [Су]щественно меняется поведение обменного взаимодействия на боль[ши]х расстояниях, в отличие от /3/ оно имеет преимущественно фер[ром]агнитный характер. С ростом числа носителей растет осцилли[рую]щий член РККИ (8), и на больших расстояниях $R > k_F^{-1}$ он стано[вит]ся преобладающим при $k_F > \sqrt{2m^*\Delta}$. Из (8)-(9) видно, что отли[чи]е от обычного члена РККИ связано как с перенормировкой [J →] $J - 2V^2/(\Delta+\varepsilon_k)$, так и с появлением дополнительного слагаемого [ос]циллирующего типа (второй член в (9)).

В заключение выражаю благодарность Д. И. Хомскому за предло[же]нную задачу и полезные обсуждения.

Поступила в редакцию
8 июня 1976 г.

Литература

1. S. Metfessel. I. B. M. J. Res. Developm., 14, 207 (1970).
2. M. A. Ruderman, C. Kittel. Phys. Rev., 96, 99 (1954).
3. А. Н. Кочарян, Д. И. Хомский. ФТТ, I7, 462 (I975).
4. C. E. T. Goncalves da Silva, L. M. Falicov. J. Phys. C.:Sol. St. Phys. 5, 63 (1972).
5. P. W. Anderson. Phys. Rev., 124, 41 (1961).
6. J. R. Schrieffer, P. A. Wolf. Phys. Rev., 149, 491 (1966).
7. Э. Л. Нагаев. УФН, II7, 40I (I975).