

Совпадение максимумов m_c^* с целочисленными значениями ν указывает на возможную связь этого явления с экранировкой. Возникает предположение, что эффективность экранировки непосредственно влияет на величину разностей энергий подзон, однако, этот вопрос в рамках существующей теории энергетического спектра гетероперехода не разработан [11]. Мы не можем также исключить непосредственного влияния эффективности экранировки на положение резонанса, но эта связь не объяснена даже для более простого случая нормальной поля [4]. Заметим, что амплитуда максимумов m_c^* (n_s) в нашем случае превосходит изменения m_c^* при $\theta=0$, и эти особенности не имеют аналогов в зависимости m_c^* (n_s) в нормальном магнитном поле. Объяснение осцилляций циклотронной массы в наклонном поле требует дальнейших исследований.

Авторы выражают благодарность Э. П. Шлитерису (ИРЭ АН СССР), предоставившему необходимую информацию о конструкции субмиллиметрового лазера, С. В. Иорданскому, И. В. Кукушкину, С. В. Мешкову, В. Б. Тимофееву, Д. Е. Хмельницкому за полезные обсуждения результатов эксперимента.

Список литературы

- [1] Heitmann D., Ziesmann M., Chang L. L. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 10. P. 7463—7466.
- [2] Seidenbusch W., Gonnik E., Weimann G. // Phys. Rev. 1987. V. B36. N 17. P. 9155—9159.
- [3] Batke E., Stormer H. L., Gossard A. C., English J. H. // Phys. Rev. 1988. V. B37. N 6. P. 3093—3096.
- [4] Ensslin K., Heitmann D., Sigg H., Ploog K. // Phys. Rev. 1987. V. B36. N 15. P. 8177—8180.
- [5] Stern F., Howard W. E. // Phys. Rev. 1967. V. 163. N 2. P. 816—819.
- [6] Schlesinger Z., Hwang J. C. M., Allen S. J. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 26. P. 2098—2101.
- [7] Brummel M. A., Hopkins M. A., Nicholas R. J., Portal J. C., Cheng K. Y., Cho A. Y. // J. Phys. C. 1986. V. 19. N 5. P. L107—L112.
- [8] Rikken G. L. J. A., Sigg H., Langerak C. J. G. M., Myron H. W., Perenboom J. A. A. J., Weimann G. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 8. P. 5590—5597.
- [9] Wieck A. D., Bollweg K., Merkt V., Weinmann G., Schlapp W. // Phys. Rev. 1988. V. B38. N 14. P. 10158—10161.
- [10] Stern F. // Phys. Rev. 1972. V. B5. N 12. P. 4891—4899.
- [11] Stern F., Das Sarma S. // Phys. Rev. 1984. V. B30. N 2. P. 840—848.

Институт физики твердого тела АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
26 июля 1989 г.

ЗАРЯДОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ СМЕШАННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ КЛАСТЕРЫ

С. И. Клокишнер, А. В. Коряченко,
Б. С. Цукерблат

1. В работах [1-3] показано, что в молекулярных кристаллах, содержащих в качестве структурной единицы обменные кластеры смешанной валентности (СВ), возможно явление стабилизации зарядово-упорядоченной (дипольной) фазы с одновременным подавлением туннелирования лишнего электрона внутри каждого кластера. Рассмотрены простейшие трехэлектронные системы ионов переходных металлов типа d^1-d^2 . Поскольку условия возникновения фазовых переходов, их особенности, а также магнит-

ные свойства кристаллов зависят от спектра туннельно-спиновых состояний кластера, актуальным представляется обобщение теории на более сложные многоэлектронные кластеры переходных металлов. Далее рассмотрены кристаллы, состоящие из кластеров типа d^2-d^3 . Примерами таких систем служат димеры ванадия V (II)—V (III) в трирутите [4].

2. Гамильтониан кристалла в обозначениях [2] имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_n \mathbf{H}_n - \frac{1}{2} \sum_{n,m} K(n-m) d_n^x d_m^x, \quad (1)$$

где \mathbf{H}_n — гамильтониан изолированного кластера, второй член в (1) описывает диполь-дипольное взаимодействие кластеров. Предполагается, что орбитальные моменты каждого иона погашены и спектр нижайших состояний кластера $d_a^2-d_b^3$ ($s_a=1$, $s_b=3/2$) с локализованными электронами состоит из трех обменных мультиплетов $^2, ^4, ^6A$, расщепленных резонансным взаимодействием на состояния разной четности $^{2S+1}A_{1g}$ (A_{2u}) (спин кластера $S=1/2, 3/2, 5/2$) [5]. Энергии стационарных состояний $^{2S+1}A_{1g}$ (A_{2u}) описываются формулой

$$\varepsilon[S, \Gamma_g(\Gamma'_u)] = \mathcal{J}[S(S+1) - s_a(s_a+1) - s_b(s_b+1)] \binom{+}{(-)} (-1)^{S-1/2} \frac{S+1/2}{3} p, \quad (2)$$

где \mathcal{J} и p — параметры многоэлектронного гайзенберговского обменного взаимодействия и переноса соответственно [5]. В базисе состояний $^{2S+1}A_{1g}$ (A_{2u}) матрицы \mathbf{H}_n и d_n^x состоят из двумерных блоков, нумеруемых значением спина S кластера и его проекции M :

$$\mathbf{H}_n = \mathcal{J}(S-1/2)(S+3/2) \mathbf{I}^n + (-1)^{S-1/2} \frac{S+1/2}{3} p \sigma_z^n, \quad d_n^x = d_0 \sigma_x^n, \quad (3)$$

где \mathbf{I} — единичная матрица, σ_x, σ_z — матрицы Паули, d_0 — дипольный момент кластера с локализованным электроном [1-3]. В приближении молекулярного поля уровня энергии кластера имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(S, T) &= \mathcal{J}(S-1/2)(S+3/2) \pm W(S, T), \\ W(S, T) &= \left[\left(\frac{S+1/2}{3} \right)^2 p^2 + (L\bar{d}(T)d_0)^2 \right]^{1/2}, \quad L = \sum_m K(n-m), \end{aligned} \quad (4)$$

здесь $\bar{d}(T)$ — среднестатистическое значение дипольного момента, выступающее в роли параметра порядка. Соответствующие волновые функции описываются формулами

$$\begin{aligned} \Psi_{1,2}(S, M) &= \left\{ \frac{1}{2} [1 \pm A(S, T)] \right\}^{1/2} |^{2S+1}A_{1g}, M\rangle \pm \left\{ \frac{1}{2} [1 \mp A(S, T)] \right\}^{1/2} |^{2S+1}A_{2u}, M\rangle, \\ A(S, T) &= (-1)^{S-1/2} (S+1/2) p/3W(S, T). \end{aligned} \quad (5)$$

3. Рассмотрим в дальнейшем упорядочение только ферроэлектрического типа $L > 0$. Параметр порядка $\bar{d}(T)$ удовлетворяет трансцендентному уравнению $\bar{d}(T) = \text{Sp}[\exp(-\mathcal{H}/kT) \mathbf{d}] / \text{Sp}[\exp(-\mathcal{H}/kT)]$. Температурная зависимость параметра порядка определяется взаимным расположением обменно-резонансных состояний $^{2S+1}A_{1g}$ (A_{2u}) и величиной межкластерного взаимодействия. Поведение системы характеризуется двумя безразмерными параметрами: $x = \mathcal{J}/|p|$, $y = |p|/Ld_0$. На рис. 1 представлены качественно различные типы температурной зависимости параметра порядка при $\mathcal{J} > 0$ (антиферромагнитный обмен): a — случай монотонного убывания $\bar{d}(T)$ с температурой (рис. 1, 1), низкотемпературный предел $\bar{d}(0) < d_0$ вследствие неполной локализации электрона в зарядово-упорядоченной фазе из-за туннелирования; b — случай двух фазовых переходов, когда параметр порядка отличен от нуля в ограниченной области температур (рис. 1, 2), причем система разупорядочена не только при вы-

соких температурах $T \geq T_{c2}$, но и при низких $T \leq T_{c1}$, физическая причина наличия двух фазовых переходов (область соответствующих параметров здесь не приводится) та же, что и для простой системы, рассмотренной в работе [2]; ϵ — немонотонная температурная зависимость параметра порядка, когда он сначала растет, а затем падает при увеличении температуры (рис. 1, 3); ζ — немонотонная зависимость с двумя максимумами (рис. 1, 4); δ — случай трех фазовых переходов, когда зарядово-упорядоченное состояние кристалла имеет место в интервалах $0 \leq T \leq T_{c1}$, $T_{c2} < T < T_{c3}$ (рис. 1, 5). При температурах $T_{c1} \leq T \leq T_{c2}$, $T \geq T_{c3}$ кристалл находится в парафазе. Качественное объяснение этого результата состоит в следующем. При $x=0.08$ и $p < 0$ основным является уровень ${}^4A_{2g}$, за ним следуют уровни ${}^6A_{1g}$ и ${}^2A_{1g}$ (2). Поскольку $y \sim 1.5$, зарядово-упорядоченное состояние, возникающее за счет подавления тун-

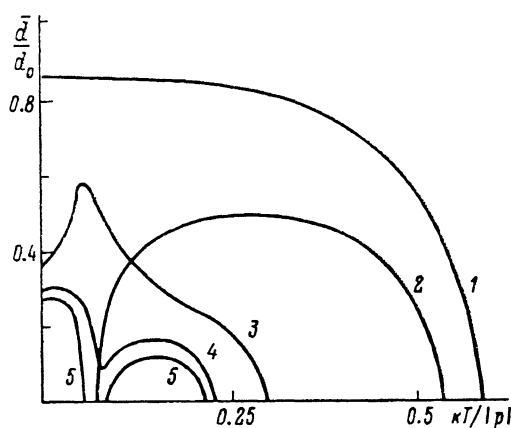


Рис. 1. Температурная зависимость параметра порядка при $\zeta > 0$.

x : 1 — 0, 2 — 0.05, 3—5 — 0.08; y : 1 — 1.6, 2 — 1.1, 3 — 1.4, 4 — 1.444, 5 — 1.45.

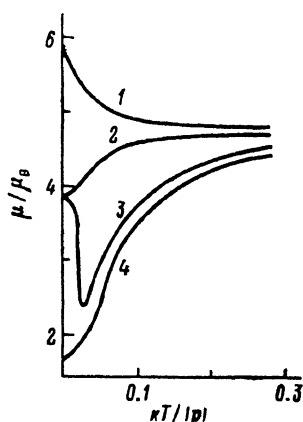


Рис. 2. Температурная зависимость магнитного момента $\mu(T)$ при $\zeta > 0$.

x : 1 — 0.05, 2, 4 — 0.08, 3 — 0.1; y : 1, 4 — 1.0, 2 — 1.444, 3 — 1.65.

нельного расщепления уровней со спином $S=3/2$, имеет место при низких температурах $kT \ll |p|$. При повышении температуры заселяется уровень ${}^6A_{1g}$. Однако диполь-дипольное взаимодействие при $y \sim 1.5$ мало по сравнению с туннельным расщеплением уровней со спином $S=5/2$ и не может его подавить. Поэтому кристалл находится в парафазе до тех пор, пока с ростом температуры число кластеров в состоянии ${}^2A_{1g}$ не достигает критического предела и электрон не локализуется в системе с туннельным параметром $2p/3$. Заселение уровня ${}^2A_{2u}$ при дальнейшем повышении температуры приводит снова к переходу в неупорядоченное состояние.

4. Температурная зависимость молекулярного поля обуславливает нетривиальное поведение магнитного момента. Существенной особенностью рассматриваемых систем является возможность появления различных низкотемпературных пределов магнитного момента вследствие изменения порядка уровней, обусловленного средним молекулярным полем. На рис. 2 представлены зависимости магнитного момента $\mu(T)$ для случаев, когда основными в молекулярном поле при $T=0$ являются уровни с $S=5/2$ (кривая 1), $S=3/2$ (кривые 2, 3) и $S=1/2$ (кривая 4).

Кластеры V (II)—V (III) реализуются в решетке трирутила, где они разделены ионами Li^+ и образуют квазиодномерную структуру [4]. Эксперимент указывает на внутримолекулярное ферромагнитное взаимодействие, которое может свидетельствовать о сильном двойном обмене. На основе анализа экспериментальных данных сделан вывод о диспропорционировании заряда, т. е. о существовании зарядово-упорядоченного состояния (решетки Вигнера).

- [1] Клокишнер С. И., Цукерблат Б. С. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. № 1. С. 25—28.
 [2] Клокишнер С. И., Цукерблат Б. С. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2679—2686.
 [3] Klokishner S. I., Tsukerblat B. S. // Chem. Phys. 1988. V. 125. N 1. P. 11—19.
 [4] Metzger R. M., Heimer N. E., Kuo C. S., Williamson R. E., Woo W. O. // J. Inorg. Chem. 1983. V. 22. N 7. P. 1060—1064.
 [5] Белинский М. И., Цукерблат Б. С., Боцан И. Г., Белинская И. С. // ТЭХ. 1987. Т. 23. № 2. С. 148—157.

Кишиневский государственный университет
 им. В. И. Ленина
 Кишинев

Поступило в Редакцию
 5 мая 1989 г.
 В окончательной редакции
 2 августа 1989 г.

УДК 538.22

Физика твердого тела, том 32, в. 1, 1990
 Solid State Physics, vol. 32, N 1, 1990

МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОПОДРЕШЕТОЧНОЙ СПИНОВОЙ ЦЕПОЧКИ

А. А. Звягин

В последнее время вырос интерес к многоподрешеточным спиновым системам, особенно низкоразмерным. Теоретически поведение этих магнетиков описывают в приближениях либо молекулярного поля [1], либо малых колебаний относительно классического положения равновесия [2]. Представляет, однако, интерес теоретическое описание таких многоподрешеточных магнетиков, не использующее приближений.

В настоящей работе точно квантово-механически изучены статические свойства M -подрешеточной X — Y спиновой ($s=1/2$) цепочки. Гамильтониан рассматриваемой системы спинов имеет вид

$$H = \sum_n \left\{ 2 \sum_{m=1}^{M-1} [J_m (s_{n,m}^x s_{n,m+1}^x + s_{n,m}^y s_{n,m+1}^y)] + \right. \\ \left. + 2J_M (s_{n,M}^x s_{n+1,1}^x + s_{n,M}^y s_{n+1,1}^y) - \mu h \sum_{m=1}^M s_{n,m}^z \right\}, \quad (1)$$

где J_m ($m=1, \dots, M$) — константы взаимодействия спинов, $s_{n,m}^x, y, z$ — операторы проекций спина в n -й ячейке, принадлежащего m -й подрешетке, h — магнитное поле, μ — магнетон. В этой модели подрешетки различаются вследствие разных величин констант взаимодействия между спинами, принадлежащими разным подрешеткам. Перейдем от спиновых операторов к фермиевским с помощью преобразования

$$s_{n,1}^+ = \prod_{l < n} \prod_{i=1}^M \sigma_{l,i} a_{n,1}, \quad s_{n,j}^+ = \prod_{l < n} \prod_{i=1}^M \sigma_{l,i} \sigma_{n,1} \dots \sigma_{n,j-1} a_{n,j}, \\ j = 1, 2, \dots, M; \quad \sigma_{n,k} 2s_{n,k}^z = 1 - 2a_{n,k}^+ a_{n,k}; \quad s_{n,k}^- = (s_{n,k}^+)^{\dagger}; \quad k = 1, 2, \dots, M. \quad (2)$$

Переходя в гамильтониане (1) к Фурье-компонентам этих фермионов, имеем

$$H = (NM\mu h/2) - \sum_k \left\{ \sum_{m=1}^{M-1} [\mu h a_{k,m}^+ a_{k,m} + J_m (a_{k,m}^+ a_{k,m+1} + \text{в. с.}) + \right. \\ \left. + J_M (a_{k,M}^+ a_{k,1} \exp(ik) + \text{в. с.})] + \mu h a_{k,M}^+ a_{k,M} \right\}. \quad (3)$$