Отметим, что критическое поле $H_к$ свинца в массивном состоянии составляет $0.05T$ [8]. В нашем случае островковое распределение свинца в вандерваальсовских щелях InSe приводит к возрастанию $H_к$ в 40 раз ($H_к \simeq 2T$). Большие величины $H_к$ характерны и для слоистых халькогенидов переходных металлов, которые связаны с их двумерным распределением в решетке, обусловливающим формирование узких d-зон с большими эффективными массами и малыми фермиевскими скоростями [9].

Об островковом распределении свинца свидетельствует тот факт, что в системе $\langle$Pb, Li$\rangle$ InSe свинец влияет в основном на $\sigma_{\parallel c}$ интеркалата, слабо влияя на $\sigma_{\perp c}$. Действительно, для резкого увеличения $\sigma_{\perp c}$ необходимо наличие сплошной «металлической» пленки интеркалянта, в то время как для резкого увеличения $\sigma_{\parallel c}$ достаточно лишь локализованных (островковых) скоплений «металлического» интеркалянта в достаточно большом количестве слоев [7].

Таким образом, проведенные исследования указывают на то, что электронный газ в InSe при низких температурах носит двумерный характер.

Впервые экспериментально установлено, что интеркаляция слоистых полупроводников сверхпроводящими металлами повышает размерность электронного газа при $T < T_c$, переводя его из двумерного в трехмерное состояние.

Литература

[1] *Kress-Rogers E., Nicholas R. J., Chevey A.* J. Phys. C, 1983, vol. 16, N 12, p. 2439—2447.

[2] *Kress-Rogers E., Hopper G. F., Nicholas R. J., Hayes W., Portal J. C., Chevey A.* J. Phys. C., 1983, vol. 16, N 21, p. 4285—4295.

[3] *Брандт Н. Б., Кульбачинский В. А., Ковалюк З. Д., Лашкарев Г. В.* ФТП, 1987, т. 21, № 6, с. 1001—1004.

[4] *Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е.* ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 2, с. 768—783.

[5] *Григорчак И. И., Ковалюк З. Д., Юрценюк С. П.* Изв. АН СССР, Неорган. матер., 1981, т. 17, № 3, с. 412—415.

[6] *Ковалюк З. Д., Пырля М. Н., Середюк А. И., Товстюк К. Д.* Изв. АН СССР, Неорган. матер., 1985, т. 21, № 10, с. 1652—1655.

[7] *Ковалюк З. Д., Середюк А. И., Товстюк К. Д.* ФТП, 1982, т. 16, № 11, с. 2061—2063.

[8] *Roberts B. W.* Superconductive materials and their properties. Report № 63-RL-3252 M., 1963, New York. 98 p.

[9] Сверхпроводимость в тройных системах / Под ред. М. Майнла и Э. Фишера. М.: Мир, 1985. 392 с.

Институт проблем материаловедения АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
3 декабря 1987 г.

УДК 538.1

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

ОБ ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ МАГНИТНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА В РАМКАХ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКИ АНДЕРСОНА

А. Ф. Барабанов, А. Ф. Михеенков

Будем рассматривать магнитный полупроводник с локализованными f-электронами в рамках одномерной невырожденной регулярной модели Андерсона [1, 2], пренебрегая прямым обменом между f-моментами. Такая модель, если отвлечься от одномерности, в первую очередь описывает антиферромагнитные полупроводники (АФМП) типа EuSe, EuTe с пренебрежимо малым перекрытием соседних f-оболочек [3]. Поскольку вопрос о структуре основного состояния решетки Андерсона, в том числе и в рассматриваемом одномерном диэлектрическом варианте, в настоящее время остается открытым, представляется интересным исследовать его вариационным методом.

Для описания сверхобмена в модели Андерсона достаточно учесть гибридизационное взаимодействие f-электронов с незаполненной s-зоной проводимости без привлечения валентной зоны. Хорошо известно, что такой обмен имеет АФМ характер [4, 5]. Учтем также внутриузельное s—f-обменное взаимодействие ФМ типа. Гамильтониан системы для дальнейшего удобно записать в блочном виде

$$\left.\begin{aligned} &\hat{H}=\sum_m \hat{h}_m+\sum_m \hat{t}_{m\beta,\, m+1\alpha}, \quad \hat{h}_m=\hat{h}_{m\alpha}+\hat{h}_{m\beta}+\hat{t}_{m\alpha,\, m\beta}, \\ &\hat{h}_{m\alpha}=\varepsilon\sum_\sigma \hat{n}^s_{m\alpha\sigma}+e\sum_\sigma \hat{n}^f_{m\alpha\sigma}+U\hat{n}^f_{m\alpha\sigma}\hat{n}^f_{m\alpha\bar\sigma}+g\sum_\sigma(\hat{f}^+_{m\alpha\sigma}\hat{c}_{m\alpha\sigma}+\text{э. с.})- \\ &-J\sum_\sigma \hat{n}^s_{m\alpha\sigma}\hat{n}^f_{m\alpha\sigma}, \quad \hat{t}_{m_1\alpha,\, m_1\beta}=t\sum_\sigma(\hat{c}^+_{m_1\alpha\sigma}\hat{c}_{m_2\beta\sigma}+\text{э. с.}). \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

В (1) цепочка узлов разбита на блоки m, содержащие по 2 узла (α — левый, β — правый); $\hat{h}_m$ — внутриблочный гамильтониан; $\hat{t}_{m_1\alpha,\, m_2\beta}$ описывает перескоки s-электронов; J, U — внутриузельные константы ФМ s—f-обмена и кулоновского f—f-отталкивания; ниже $U=\infty$, т. е. учитываются только состояния с 0, 1 f-электронами на узле; $\hat{n}^{s,f}$ — операторы числа s, f-электронов на узле; ε — центр зоны проводимости; e — положение f-уровня; $\Delta=\varepsilon-e>0$; g — параметр гибридизации. При $g=0$ основное состояние — диэлектрическое с одним f-электроном на узел.

Будем искать $\langle\hat{H}\rangle$ с помощью многочастичной вариационной функции $|\Psi\rangle$, которая учитывает для каждого блока: основное состояние $|2_m\rangle$ с двумя и все состояния $|1_{mi}\rangle$ с одним и $|3_{mj}\rangle$ с тремя электронами

$$\left.\begin{aligned} &|\Psi\rangle=\hat{P}_N\prod_m \hat{A}_m|0\rangle, \quad \hat{A}_m=1+\hat{Z}^{(2)}_m+\sum_{i,\,j}\sum_{n=m\pm1}\delta^{mn}_{ij}\hat{Z}^{(1)}_{mi}\hat{Z}^{(3)}_{nj}, \\ &\hat{Z}^{(2)}_m|0\rangle=|2_m\rangle, \quad \hat{Z}^{(1)}_{mi}|0\rangle=|1_{mi}\rangle, \quad \hat{Z}^{(3)}_{nj}|0\rangle=|3_{nj}\rangle, \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

здесь m, n нумеруют блоки, $|0\rangle$ — вакуум, δ^{mn}_{ij} — вариационные параметры, $\hat{P}_N$ — проекционный оператор на подпространство с числом электронов, равным числу узлов N. Блочная форма пробной функции позволяет хорошо описать ближний порядок, а члены $\sim\delta_{ij}$ описывают движение f-электронов вдоль цепочки через зону проводимости. Для одномерной модели Хаббарда функция вида (2) дает хорошее согласие с точным решением [6]. Предложенная в [7] графическая процедура позволяет получить следующее выражение для $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$

$$\varepsilon \doteq \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\frac{\varepsilon^{(2)}+2x\sum\limits_{ij}(\varepsilon^{(1)}_i+\varepsilon^{(3)}_j)\,\delta^2{}_j-4tx\sum\limits_{ij}\delta_{ij}\langle 2|\hat{c}^+_{\beta\uparrow}|1_i\rangle\langle 2|\hat{c}_{\alpha\uparrow}|3_j\rangle}{1+4x\sum\limits_{ij}\delta^2_{ij}}, \tag{3}$$

где x удовлетворяет уравнению $1=x+2x^2\sum\limits_{ij}\delta^2_{ij}$; $\delta_{ij}=\delta^{mm+1}_{ij}$; $\varepsilon^{(2)}$, $\varepsilon^{(1)}_i$, $\varepsilon^{(3)}_j$ — энергии состояний $|2\rangle$, $|1_i\rangle$, $|3_j\rangle$. Эти состояния строятся в явном виде путем диагонализации гамильтониана блока $\hat{h}_m$ с использованием симметрии задачи. Аналогичное построение для блока с межузельной гибридизацией проводилось в [8].

Функция $|\Psi\rangle$ и энергия основного состояния ε (а, следовательно, и состояния $|2\rangle$, $|1_i\rangle$, $|3_j\rangle$) находятся для ФМ и АФМ упорядочений. В ФМ случае число состояний $|1_i\rangle$ — 4, $|3_j\rangle$ — 4, в АФМ — 8 и 18. Приведем явный вид состояния $|2\rangle$ для АФМ случая

$$|2\rangle = \sum_{q=1}^{5} a_q |x_q\rangle, \quad |x_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \hat{r}) \hat{f}^+_{\alpha\uparrow} \hat{f}^+_{\beta\downarrow} |0\rangle,$$

$$|x_{2,3}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} (1 + u\hat{r}_s)(1 + v\hat{r}_f)(1 - \hat{w}) \hat{c}^+_{\alpha\downarrow} \hat{f}^+_{\beta\uparrow} |0\rangle,$$

$$|x_{4,5}\rangle = \frac{1}{2} (1 + h\hat{r}_\uparrow)(1 + p\hat{r}_\downarrow) \hat{c}^+_{\alpha\uparrow} \hat{c}^+_{\beta\downarrow} |0\rangle, \quad uv = hp = u^2 = v^2 = h^2 = p^2 = 1,$$

$$a_1 \sim 1, \quad a_{2,3} \sim \frac{g}{\Delta \pm t}, \quad a_{4,5} \sim \frac{g^2}{(\Delta \pm t)^2},$$

здесь $\hat{r}_s$, $\hat{r}_f$, $\hat{r}_\uparrow$, $\hat{r}_\downarrow$ — операторы внутриблочного отражения для s, f-электронов, электронов со спином вверх и вниз; $\hat{r}$ — полное отражение ($\hat{r} = \hat{r}_s \hat{r}_f = \hat{r}_\uparrow \hat{r}_\downarrow$); $\hat{w}$ — оператор переворота спинов в блоке.

В приближении $(g/\Delta)^4$ полное выражение (3) можно аналитически проварьировать по δ_{ij} и сравнить энергии ε_Φ, ε_A для ФМ и АФМ порядка. При $J < J_0 \approx \frac{4g^2\Delta}{\Delta^2 - t^2}$ основное состояние системы антиферромагнитно с $\Delta\varepsilon = \varepsilon_A - \varepsilon_\Phi \approx \frac{2g^2t^2}{(\Delta^2 - t^2)^2} [J - J_0]$.

Типичные значения параметров для EuSe, EuTe $t \approx 1$ эВ, $\Delta \approx 2$ эВ, $g/\Delta \approx 0.1$ [5] дают значения АФМ вклада в энергию ~5—10 K, согласующиеся с температурой Нееля этих соединений.

При низких температурах и давлении $\geqslant 5$ кбар EuSe ферромагнитен, так как существенна роль прямого гейзенберговского обмена. С уменьшением давления, т. е. увеличением постоянной решетки, происходит переход I рода ФМ $\to$ АФМ [9]. При таком переходе меняется структура волновой функции (2), определяемая в первую очередь характером основного состояния блока $|2\rangle$. Анализ этой структуры показывает: 1) в ФМ фазе среднее число f-электронов на узле в порядке $(g/\Delta)^4$ меньше, чем в АФМ, т. е. переход ФМ $\to$ АФМ должен происходить с увеличением объема; 2) в АФМ состоянии квадрат полного момента на узле меньше 3/4, а в ФМ — больше 3/4, такое изменение квадрата момента качественно совпадает с изменением полного момента в ряду халькогенидов Eu при переходе от ФМ EuO, EuS к АФМ EuSe [10]; 3) отличительным свойством построенного АФМ состояния является равенство нулю среднего значения проекции полного спина на узле при ненулевых АФМ спиновом корреляторе $\langle \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_j^\downarrow \rangle - \langle \hat{n}_i^\uparrow \rangle \langle \hat{n}_j^\downarrow \rangle$ и зарядовом корреляторе $\langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle$.

Подчеркнем, что последним свойством обладает $|\Psi_0\rangle$ точного решения одномерной модели Хаббарда [11] и основное состояние «резонансных валентных связей» (RVB) [12], которое в настоящее время привлекается для объяснения высокотемпературной сверхпроводимости [13, 14]. Пробная функция (2) дает правильное значение диэлектрической щели, равное $\Delta - 2t$.

В заключение обсудим вопрос об обобщении результатов одномерного подхода $d=1$ на случаи $d=2.3$. Он связан в первую очередь с возможностью конкретного построения $|\Psi_0\rangle$ АФМ состояния RVB типа и с энергетической выгодностью этого состояния по отношению к классическому неелевскому. Построение $|\Psi_0\rangle$ для $d > 1$ требует расширения размера блока и, следовательно, резкого увеличения числа когерентных функций в блоке, что значительно усложняет задачу, но не делает ее принципиально неразрешимой. Единственным известным нам случаем построения $|\Psi_0\rangle$RVB является подход работы [12], где для близкого к (1) гамильтониана Хаббарда на треугольной решетке численно была показана правомерность обобщения свойств $|\Psi_0\rangle$ при $d=1$ на случай $d=2$. Подобное $|\Psi_0\rangle$ может быть построено аналитически и для квадратной решетки. В общем случае $d > 1$ и произвольной решетки, как для модели Хаббарда, так и Андерсона упомянутое обобщение остается открытым, и для подтверждения его правомерности пытаются привлекать дополнительные механизмы, например димеризацию [15].

Авторы благодарны Э. Л. Нагаеву за полезные обсуждения.

Литература

[1] *Anderson P. W.* Phys. Rev., 1961, vol. 124, N 1, p. 41—53.
[2] *Smith D. A.* J. Phys. C, 1968, vol. 1, N 5, p. 1263—1278.
[3] *Нагаев Э. Л.* Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979. 431 с.
[4] *Кочарян А. Н., Хомский Д. И.* ФТТ, 1975, т. 17, № 2, с. 462—464.
[5] *Кочарян А. Н., Овнанян П. С.* ЖЭТФ, 1978, т. 74, № 2, с. 620—628.
[6] *Барабанов А. Ф., Михеенков А. В.* ФТТ, 1986, т. 28, № 4, с. 998—1004.
[7] *Барабанов А. Ф., Михеенков А. В.* ФТТ, 1985, т. 27, № 9, с. 2658—2664.
[8] *Lin T., Falikov L. M.* Phys. Rev., 1980, vol. B22, № 2, p. 857—862.
[9] *Fujivara H., Kadomatsn H., Kurisu M., Hihara T., Kojima K., Kamigaichi T.* Sol. St. Commun., 1982, vol. 42, № 7, p. 509—511.
[10] *Тейлор К., Дарби М.* Физика редкоземельных соединений. М.: Мир, 1974. 374 с.
[11] *Lieb E. H., Wu F. Y.* Phys. Rev. Lett., 1968, vol. 20, N 25, p. 1445—1448.
[12] *Fazekas P., Anderson P. W.* Phyl. Mag., 1974, vol. 30, N 2, p. 423—440.
[13] *Anderson P. W., Baskaran G., Zou Z., Hsu T.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 26, p. 2790—2793.
[14] *Emery V. I.* Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 26, p. 2794—2797.
[15] *Kivelson S., Rokhsar D., Sethna J.* Phys. Rev., 1987, vol. B35, N 16, p. 8865—8868.

Институт физики высоких
давлений им. Л. Ф. Верещагина АН СССР
Троицк
Московская область

Поступило в Редакцию
12 августа 1987 г.
В окончательной редакции
11 декабря 1987 г.

УДК 535.115

Физика твердого тела, том, 30, в. 4, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

ЗАВИСИМОСТЬ ЧАСТОТ ОБМЕННЫХ МОД АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ В $CuCl_2 \cdot 2H_2O$

В. В. Еременко, С. А. Звягин, Ю. Г. Пашкевич, В. В. Пишко, В. Л. Соболев, В. В. Шахов

Настоящее сообщение посвящено экспериментальному и теоретическому исследованию температурной зависимости частот обменных мод антиферромагнитного резонанса (АФМР), обнаруженных в четырехподрешеточном ромбическом антиферромагнетике $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ с $T_N=4.33$ K [1]. Наличие этих мод присуще многоподрешеточным антиферромагнетикам с числом подрешеток большим двух, а их энергия активации определяется обменными межподрешеточными интегралами. Частотно-полевые зависимости всех мод АФМР данного антиферромагнетика подробно исследованы в [2], там же экспериментально определены величины интегралов ферромагнитного обмена и взаимодействия Дзялошинского.

Гамильтониан магнитной подсистемы $CuCl_2 \cdot 2H_2O$, квадратичный по операторам спинов, приведен в [3]. Далее будем рассматривать случай магнитного поля, параллельного легкой оси и не превышающего поля спин-флоп перехода. Температурные поправки к спектру обменных спиновых волн (СВ) будем учитывать стандартным образом [4], удерживая в разложении спиновых операторов, входящих в гамильтониан, по Бозе-операторам Голстейна—Примакова слагаемые четвертого порядка, ограничиваясь в последних учетом лишь обменных взаимодействий. Существенные упрощения в расчетах достигаются при использовании симметрии задачи путем введения линейных комбинаций Бозе-операторов спиновых отклонений подрешеток, называемых далее неприводимыми