

УДК 538.22

**ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ  
И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
МЕЛКИХ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ  
В ПОЛУМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ  
ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

Б. В. Егоров, Б. Б. Тимофеев

Получена формула для плотности состояний связанных магнитных поляронов в магнитосмешанных полупроводниках. Показано, что обменное взаимодействие электронов примесных центров с поперечными флуктуациями спинов магнитных атомов приводит к появлению щели в плотности состояний. Вычислены термодинамические характеристики связанных электронов в фазе спинового стекла.

Характеристики мелких примесных центров в полумагнитных полупроводниках типа  $Cd_{1-x}Mn_xSe(S)$  широко исследовались экспериментально (см. [1-4] и литературу в [4]) и теоретически [1, 2, 5-9]. В них для объяснения оптических и термодинамических свойств таких центров вводилось понятие связанного магнитного полярона (СМП), возникающего за счет зеемановского расщепления состояния электрона, локализованного на мелком доноре в поле, создаваемом флуктуациями намагниченности. Мы рассмотрим некоторые новые аспекты теории СМП, связанные, во-первых, с тем, что во всех предыдущих теоретических работах [5-9] считалось, что волновая функция локализованного электрона имеет только одну спиновую компоненту, т. е. спин электрона являлся квантовым числом, и было учтено только изменение его направления в зависимости от направления флуктуации намагниченности в области локализации. Однако, поскольку оператор  $s-d$ -обменного взаимодействия локализованного электрона со спинами примесных магнитных атомов не коммутирует с оператором спина электрона, то спин электрона не является точным квантовым числом, поэтому адиабатическая электронная волновая функция обязательно содержит обе спиновые компоненты, хотя вторая спиновая компонента обычно мала. В настоящей работе проведен учет малой спиновой компоненты во втором порядке и вычислены плотность электронных состояний и термодинамические характеристики. При этом в плотности состояний в нулевом магнитном поле появляется щель. Наличие этой щели приводит к существенному видоизменению температурных зависимостей вклада СМП в теплоемкость при низких температурах: теплоемкость падает при  $T \rightarrow 0$  не степенным образом, а экспоненциально.

Вторым новым аспектом этой работы явился учет того, что при низких температурах в полумагнитных полупроводниках происходит замораживание атомных спинов [10], при этом при температуре  $T = T_{SG}$  может происходить фазовый переход в спин-стеклоное состояние (если концентрация с магнитных атомов не слишком велика, когда происходит переход в антиферромагнитную фазу). Как известно [11], спиновое стекло — фаза, не обладающая свойством эргодичности, т. е. средние характеристики не сводятся к гиббсовским, а должны определяться иначе, поэтому

результаты работы [5] для термодинамических характеристик при  $T < T_{SG}$  должны быть существенно видоизменены. Если фазового перехода в состояние спинового стекла нет, а система спинов находится в метастабильном состоянии с большим временем релаксации, то под  $T_{SG}$  следует понимать температуру максимума восприимчивости в нулевом поле.

## 1. Энергия локализованного электрона

Запишем гамильтониан мелкого кулоновского центра в полумангнитном полупроводнике во внешнем поле  $\mathbf{H}$  в виде

$$H = H_e + H_M, \quad H_e = \sum_{nn'\sigma} C_{nn'} a_{n\sigma}^+ a_{n'\sigma} - \sum_{n\sigma} \frac{e^2}{\epsilon_0 R_n} a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + \\ + 2A \sum_{n\sigma\sigma'} a_{n\sigma}^+ (s_e S_n)_{\sigma\sigma'} a_{n\sigma'} c(n) + 2\mu_B \sum_{n\sigma\sigma'} a_{n\sigma}^+ (H S_e)_{\sigma\sigma'} a_{n\sigma'}, \\ H_M = g\mu_B \sum_n H S_n c(n) + H_{M0}, \quad (1)$$

где первый член в  $H_e$  описывает трансляционное движение электрона;  $a_{n\sigma}^+$ ,  $a_{n\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов с волновой функцией Ванье на узле  $n$  с радиус-вектором  $\mathbf{R}_n$  и спиновым квантовым числом  $\sigma$  ( $\sigma=1, 2$ );  $C_{nn'}$  — интеграл переноса между узлами  $n$  и  $n'$ . Второй член, в котором  $\epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость, представляет собой кулоновскую энергию центра, а третий — обменную энергию с примесными магнитными атомами.

В нем  $A$  —  $s$ - $d$ -обменный интеграл;  $s_e$  — оператор спина электрона;  $S_n$  — спин  $n$ -го магнитного атома;  $c(n)=1$ , если в узле  $n$  имеется магнитная примесь, и  $c(n)=0$ , если нет. Гамильтониан магнитных атомов обозначен  $H_M$ , а его часть  $H_{M0}$  описывает взаимодействие магнитных атомов. Обычно радиус примесного состояния  $r_c$  значительно больше как постоянной решетки  $d$ , так и среднего расстояния между магнитными атомами  $d/c^{1/3}$  [3] (будем рассматривать случай малых концентраций магнитных атомов  $c \ll 1$ ). Характерные энергии  $s$ - $d$ -обмена  $ASc$  ( $S$  — величина спинов магнитных атомов) и зеемановского расщепления во внешнем поле  $\mu_B H$  обычно значительно меньше глубины примесного центра  $E_c = =c^2/\epsilon_0 r_c$ , поэтому последние два слагаемых в  $H_e$  можно рассматривать как возмущение.

Во втором порядке теории возмущений, учитывая двукратное вырождение по спину энергии основного состояния электрона, запишем секулярное уравнение для нахождения энергии СМП  $E$

$$\left| (E - E_0) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} - V_{0\sigma_1 \sigma_2} - \sum_{\substack{m\sigma' \\ m \neq 0}} \frac{V_{m\sigma_1 \sigma'}^* V_{m\sigma_2 \sigma'}}{E - E_m} \right| = 0, \\ V_{0\sigma_1 \sigma_2} = \sum_n \psi_0^2(n) \mathbf{h}_n \langle \sigma_1 | s_e | \sigma_2 \rangle, \quad V_{m\sigma_1 \sigma_2} = \sum_n \psi_m^*(n) \psi_0(n) \mathbf{h}_n \langle \sigma_1 | s_e | \sigma_2 \rangle, \\ E_0 = \sum_{nn'} C_{nn'} \psi_0(n) \psi_0(n') - \sum_n \frac{e^2}{\epsilon_0 R_n} \psi_0^2(n), \\ \mathbf{h}_n = AS_n c(n) + \mu_B \mathbf{H}. \quad (2)$$

Здесь  $\psi_0(n)$  — волновая функция основного состояния электрона нулевого приближения в узле  $n$ , являющаяся функцией основного состояния в поле кулоновского центра;  $E_0$  — энергия основного состояния;  $\psi_m(n)$  — аналогичная волновая функция  $m$ -го возбужденного состояния ( $m \neq 0$ ), а  $E_m$  — энергия этого состояния;  $V_{0\sigma_1 \sigma_2}$  — матричные элементы переходов между состояниями со спинами  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , соответствующими исходно двукратно вырожденному основному состоянию с энергией  $E_0$ , а  $V_{m\sigma_1 \sigma_2}$  —

матричные элементы переходов между основным и возбужденными состояниями.

Введем ось квантования спина электрона  $z$  вдоль направления вектора флуктуации намагниченности  $\mathbf{h}$ , где  $\mathbf{h} = \sum_n \psi_0^2(n) \mathbf{h}_n$ . Это условие приводит к тому, что среди матричных элементов  $V_{0\sigma_1\sigma_2}$  ненулевыми будут диагональные по спиновому квантовому числу  $V_{0\sigma_1\sigma_2} = \delta_{\sigma_1\sigma_2} (2\sigma_1 - 3) V_0$ , где  $V_0 = \sum_n h_{nz} \psi_0^2(n)$ .

Решая секулярное уравнение (2), получаем значения энергии СМП

$$E_\nu = E_0 - W_1 + (-1)^\nu \sqrt{V_0^2 + |W_2|^2},$$

$$W_1 = \sum_{nn'} \psi_0(n) \psi_0(n') G(n, n') h_n h_{n'},$$

$$W_2 = A^2 \sum_n \psi_0^2(n) G(n) (S_{nx} + iS_{ny}) c(n), \quad G(n) \equiv G(n, n),$$

$$G(n, n') = \sum_{m \neq 0} \frac{\psi_m(n) \psi_m(n')}{E_0 - E_m}. \quad (3)$$

Число  $\nu=1, 2$  соответствует двум возможным состояниям электрона, причем  $\nu=1$  соответствует основному состоянию. Величина  $G(n, n')$  — функция Грина гамильтониана кулоновского центра, соответствующего двум первым слагаемым в  $H_c$  в (1). Основной вклад в  $G(n, n')$  дают состояния непрерывного спектра (вследствие их большей плотности), поэтому  $G(n, n') \approx \sum_k [\psi_k^*(n) \psi_k(n') / (E_0 - E(k))]$  и по порядку величины  $G(n, n') \sim 1/W$ ,  $W = \hbar^2/mv^2a$ ,  $m$  — эффективная масса,  $v$  — объем элементарной ячейки,  $E(k)$  — закон дисперсии электрона непрерывного спектра.

Формула (3) определяет энергию электрона при произвольных значениях  $S_n$  с точностью до второго порядка теории возмущений. Ее параметром является малая величина  $ASc/W$  (обычно  $ASc \ll E_0 \ll W$ ). Аналогичное выражение для энергии электрона вблизи примесного центра для случая магнитного полупроводника получено в [12]. В работах же [3, 5, 6] учитывался только член  $V_0$  в энергии электрона, а величинами  $W_1$  и  $W_2$  пренебрегали, т. е. рассмотрение ограничивалось, с одной стороны, первым порядком теории возмущений, а с другой — адиабатическим приближением (т. е. считалось, что  $S_n$  — классические векторы, что допустимо при  $2S \gg 1$ ). Однако, как будет видно из дальнейшего, учет  $W_1$  и  $W_2$  (особенно члена  $W_2$ , связанного с поперечными флуктуациями атомных спинов) является в некоторых случаях принципиально важным и приводит к качественному отличию результатов.

Поскольку направления  $S_n$  и расположения магнитных примесей  $c(n)$  случайны, то  $E_\nu$  как функция этих величин тоже будет случайной величиной, поэтому спектр электрона мы будем характеризовать плотностью состояний  $\rho(E_\nu)$ .

## 2. Плотность электронных состояний

Для определения  $\rho(E_\nu)$  вычислим распределение входящих в  $E_\nu$  случайных величин  $V_0$ ,  $W_1$  и  $W_2$ , в свою очередь зависящих от случайных величин  $S_n$ ,  $c(n)$ . Распределение магнитных примесей будем считать для простоты нескоррелированным, а их положения фиксированными, поэтому случайные величины  $c(n)$  являются независимыми. Мгновенные направления векторов  $S_n$  являются случайными, но зависимыми. Спиновые корреляторы вблизи донора, вообще говоря, необходимо определять с учетом энергии электронов. Однако предположим, что боровский радиус достаточно велик и выполнено условие  $AS(d/r_c)^3 \ll \max\{kT, kT_{SG}\}$ . В этом случае электронное поле мало и корреляционная функция

$$\chi_{nn'} = \langle S_n S_{n'} \rangle_{t,c} - \langle S_n \rangle_{t,c} \langle S_{n'} \rangle_{t,c} \quad (4)$$

вблизи донора определяется гамильтонианом  $H_M$ . В неэргодической фазе  $\langle \dots \rangle_{t,c}$  означает усреднение по времени и по всем возможным местоположениям магнитных атомов. Кроме того, будем рассматривать случай, когда  $\chi_{nn'}$  убывает достаточно быстро (т. е. корреляционный радиус  $r_c$  значительно меньше борковского радиуса  $r_e$ ). В этом случае область локализации можно разбить на микрообласти размером  $\sim r_c$  и спины в разных микрообластях можно считать независимыми.

Будем искать сначала функцию распределения величины  $V_0^2$ , причем  $V_0$  в предыдущем разделе определялась как  $V_0 = \sum_n h_{nz} \psi_0^2(n)$ , а за ось  $z$  выбиралась ось квантования электронного спина, так что выполнялись условия

$$\sum_n h_{nx} \psi_0^2(n) = 0, \quad \sum_n h_{ny} \psi_0^2(n) = 0. \quad (5)$$

При вычислении функции распределения величины  $V_0^2$  необходимо усреднить по всем направлениям локальных флуктуаций намагниченности СМП. Поэтому удобно ввести новую систему координат с осью  $z$  вдоль направления магнитного поля  $\mathbf{H}$ , тогда величина  $V_0^2$  запишется так:

$$V_0^2 = |\mathbf{h}|^2. \quad (6)$$

В рамках справедливости неравенства  $r_c \ll r_e$  суммы векторов  $\mathbf{h}_n$  по микрообластям представляют собой независимые случайные величины. А поскольку  $\mathbf{h}$  является суммой большого  $\sim N_0 (d/r_c)^3 = (4\pi c/3) (r_e/r_c)^3$  числа независимых случайных величин ( $N_0$  — число магнитных атомов в объеме сферы радиусом  $r_e$ ), то плотность вероятностей значений ее компонент  $h_i$ , согласно центральной предельной теореме теории вероятностей, должна определяться гауссовой функцией

$$f_0(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left[-\frac{(h_i - \bar{h}_i)^2}{2\sigma_i^2}\right], \quad i = x, y, z,$$

$$\bar{h}_z = \sum_n \psi_0^2(n) \bar{h}_{nz} = A S_{nz} c + \mu_B H \equiv h, \quad \sum_n \psi_0^2(n) = 1,$$

$$\sigma_i^2 = \bar{h}_i^2 - (\bar{h}_i)^2 = A^2 c \sum_n \psi_0(n) \psi_0(n') \chi_{nn'i} \approx A^2 c \sum_n \psi_0^2(n) \chi_{Si},$$

$$\chi_{Si} = \sum_{n'} \chi_{nn'i}, \quad \chi_{nn'i} = \overline{S_{ni} S_{n'i}} - S_{ni} S_{n'i}, \quad (7)$$

где  $\bar{X}_n$  — среднее в указанном выше смысле физической величины  $X_n$ , соответствующей узлу  $n$ . В случае слабых полей  $g\mu_B H \ll \max\{kT, kT_{SG}\}$ , который мы будем в основном дальше рассматривать, можно считать  $\bar{S}_{nz} = 0$  (для эргодической фазы при  $T > T_{SG}$  этот результат можно несколько улучшить, используя закон Кюри  $\bar{S}_{nz} = \chi_p H / g\mu_B c$ , где  $\chi_p = g^2 \mu_B^2 S(S+1)c/3kT$ ), а  $\chi_{Si} \approx S(S+1)/3$ . В области  $T \ll T_{SG}$   $\chi_{Si}$  несколько меньше за счет прямого антиферромагнитного обмена близких пар магнитных атомов и соответствующего их упорядочения, что приводит к эффективному уменьшению  $\sigma$ . Аналогичные рассуждения приведены в [3, 9].

Формула (7) позволяет найти плотность вероятностей случайной величины  $V_0^2 = |\mathbf{h}|^2 \equiv B$ , определяемую равенством

$$f_1(B) = \int db f_2(b_x) f_2(b_y) f_2(b_z) \delta(b_x + b_y + b_z - B),$$

$$f_2(b_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i \bar{h}_i} \exp\left[-\frac{b_i + (\bar{h}_i)^2}{2\sigma_i^2}\right], \quad b_i = h_i^2. \quad (8)$$

Далее для получения формулы для плотности состояний СМП необходимо учесть также вклад в энергию  $E$ , слагаемого  $|W_2|^2$ , связанного с поперечными флуктуациями атомных спинов и не учтенного в предыдущих работах. Этот вклад определяется формулой (3), в которой компоненты атомных спинов  $S_{nx}$  и  $S_{ny}$  являются случайными величинами, свя-

занными соотношениями (5). Среднее значение величины  $|W_2|^2$ , согласно (4), определяется выражением

$$|\overline{W_2}|^2 = A^4 c [\chi_{Sx} + \chi_{Sy}] \sum_n \psi_0^4(n) G^2(n) \equiv \Delta^2. \quad (9)$$

В эргодической фазе при  $T > T_{SG}$  в слабых полях

$$\Delta^2 = \frac{2}{3} A^4 S^2 c \left[ 1 - \frac{1}{15} \left( \frac{g S \mu_B H}{kT} \right)^2 \right] \sum_n \psi_0^4(n) G^2(n). \quad (10)$$

Из-за сложного вида величины  $G(n)$  получить величину  $\Delta$  в аналитической форме не удастся, но, учитывая, что  $G(n) \sim 1/W$ , а  $\psi_0^2(n) = (v/\pi r_s^3) \times \exp(-2R_n/r_s)$ , по порядку величины  $\Delta$  можно оценить как  $\Delta \sim \sim A^2 S c / W \sqrt{N_0}$ . Эта оценка будет справедлива в слабых полях  $\mu_B H \ll \ll kT_{SG}$  и при  $T < T_{SG}$ .

Аналогично можно оценить дисперсию распределения случайной величины  $|W_2|^2$  и убедиться в том, что она в  $(AS/W)^4$  раз меньше дисперсии распределения случайной величины  $V_0^2$ . Поэтому размытие из-за флуктуаций случайной величины  $|W_2|^2$  значительно меньше аналогичного размытия величины  $V_0^2$  и им можно пренебречь и считать  $|W_2|^2 \approx \Delta^2$  в выражении для энергии СМП  $E_v$  в формуле (3).

Малость размытия величины  $|W_2|^2$  связана не только с тем, что она является поправкой следующего порядка к энергии электрона, но и с тем, что она связана с поперечными флуктуациями магнитных атомов и поэтому определяется средними характеристиками большого количества магнитных атомов  $N_0 \gg 1$ , и поэтому флуктуации ее малы  $\sim 1/\sqrt{N_0}$ . В то же время величина  $V_0^2$  сама определяется флуктуацией намагниченности и изменение какой-либо случайной величины  $h_n$  может привести к существенному изменению  $V_0^2$ .

Аналогично легко убедиться, что можно пренебречь размытием величины  $W_1$  в формуле (3) для  $E_v$  при расчете плотности электронных состояний и заменить ее на среднее значение  $\Delta_1$ , равное

$$\Delta_1 \equiv \overline{W_1} = A^2 S (S+1) c \sum_n \psi_0^2(n) G^2(n). \quad (11)$$

При этом учет величины  $\Delta_1$  приводит лишь к малому (по сравнению с  $E_0$ ) понижению энергии всех состояний, а размытие энергии СМП будет определяться плотностью вероятности распределения величины  $\varepsilon = (-1)^v \sqrt{V_0^2 + \Delta^2}$ . Поэтому вместо величины  $\rho(E_v)$  далее будем рассматривать  $\rho(\varepsilon)$ , при этом отрицательные значения  $\varepsilon$  будут соответствовать основному состоянию СМП ( $v=1$ ), а положительные значения  $\varepsilon$  соответственно состояниям с  $v=2$ .

Плотность вероятности случайной величины  $V_0^2 + \Delta^2$  можно записать в следующем виде:

$$f(p) = \begin{cases} f_1(p - \Delta), & |\varepsilon| > |\Delta|, \\ 0, & |\varepsilon| < |\Delta|, \end{cases} \quad p = V_0^2 + \Delta^2. \quad (12)$$

Здесь функция распределения  $f_1$  определяется из (8). Искомую же плотность электронных состояний можно найти непосредственно из формулы (12)

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d}{d|\varepsilon|} \int_0^{\varepsilon^2} dp f(p) = 2|\varepsilon| f(\varepsilon^2) = \begin{cases} 2|\varepsilon| f_1(\varepsilon^2 - \Delta^2), & |\varepsilon| > |\Delta|, \\ 0, & |\varepsilon| < |\Delta|. \end{cases} \quad (13)$$

В случае малых возмущающих полей  $\hbar = A\bar{S}c + \mu_B H \ll \max[kT, kT_{SG}]$  интеграл в выражении для  $f_1$  в формуле (8) можно вычислить в явном виде и получить для плотности состояний выражение

$$\rho(\varepsilon) = \begin{cases} A_0 |\varepsilon| \operatorname{sh} \left( \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{\sigma^2} \hbar \right) \exp \left( -\frac{\varepsilon^2}{2\sigma^2} \right), & |\varepsilon| > |\Delta|, \\ 0, & |\varepsilon| < |\Delta|, \end{cases}$$

$$A_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\hbar \sigma} \exp \left( \frac{\Delta^2 - (\hbar)^2}{2\sigma^2} \right), \quad \sigma^2 = \frac{(ASc)^2}{18N_0}. \quad (14)$$

Как видно из формулы (14), в плотности состояний имеется энергетическая щель величиной  $2\Delta$ , отделяющая две полосы электронных состояний: в одной из них спин электрона почти параллелен, а в другой почти антипараллелен флуктуации намагниченности в области локального центра. Наличие этой щели не было отмечено в литературе, хотя ее существование четко видно из машинных расчетов плотности состояний, проведенных в [13]. Если же положить  $\Delta=0$  в формуле (14), то выражение для  $\rho(\varepsilon)$  совпадает с аналогичной формулой для плотности вероятности расщепления по спину энергии электронного уровня работы [5], полученной другим способом. Дополнительное расщепление электронных состояний связано с вкладом поперечных компонент (перпендикулярных флуктуации намагниченности) атомных спинов во втором порядке теории возмущений.

Область применимости формулы (14) ограничена множеством  $\varepsilon$ , для которых  $\rho(\varepsilon)/\rho_{\max} \ll (r_c/r_e)^{3/2}$ , поскольку, во-первых, она является первым членом асимптотического разложения по  $1/N_0$ , во-вторых, при ее выводе не учитывались флуктуации концентрации магнитных атомов внутри СМП. Эти две причины приводят к тому, что на востехах плотности состояний формула (14) должна быть видоизменена, в частности щель в плотности состояний  $-\Delta < \varepsilon < \Delta$  замоется. Однако поскольку плотность состояний, соответствующих этим энергиям очень мала, то фактически они будут давать очень малый вклад в термодинамические характеристики связанных магнитных поляронов.

Формула (14) справедлива для малых магнитных полей. При увеличении магнитного поля оба максимума на кривой  $\rho(\varepsilon)$  сдвигаются в сторону больших  $|\varepsilon|$ , щель увеличивается, сами пики сужаются и при  $\mu_B H \gg kT$ ,  $kT_{SG}$  щель между двумя состояниями носит чисто зеemanовский характер.

Величина  $\Delta$  обычно не очень велика, для типичных значений параметров  $A \sim 0.1$  эВ,  $W \sim 10$  эВ,  $S=5/2$ ,  $c \sim 0.1$ , используя оценку  $\Delta \sim A^2 S^2 c / W$ , получим  $\Delta \sim 10^{-4}$  эВ и обычно  $\Delta \ll \sigma$ . Но ее наличие существенно влияет на термодинамические свойства СМП при низких температурах  $T \sim T_{SG} \sim \Delta$ .

### 3. Термодинамические характеристики СМП

Если рассматривать ансамбль невзаимодействующих СМП, то можно вычислить его термодинамические характеристики. В эргодической фазе ( $T > T_{SG}$ ) для этого можно пользоваться обычным усреднением по гиббсовскому распределению. В [5] таким образом были вычислены теплоемкость и восприимчивость СМП. Но при низких температурах такой подход приводит к неверным результатам (расходимостям при  $T \rightarrow 0$ ). Это связано с тем, что в неэргодической фазе ( $T < T_{SG}$ ) гиббсовское среднее не совпадает со средним по времени, так как состояние системы магнитных примесей бесконечно вырождено, и температурные зависимости термодинамических величин зависят от того, к какому из минимумов стремится система [11]. Однако при выполнении условия  $AS(d/r_e)^3 \ll kT_{SG}$  электроны слабо влияют на магнитную систему (слабо подмагничивают спины магнитных атомов), и с учетом гиббсовского распределения электронов на донорах по системе двух уровней, соответствующих значениям  $\nu=1$  и  $\nu=2$  с энергиями  $-\varepsilon$  и  $\varepsilon$  получим выражение для средней энергии электронов

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon \rho(\varepsilon)}{e^{kT} + 1}. \quad (15)$$

Для электронного вклада в свободную энергию из (15) получаем

$$\Delta F = -kT \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \ln \left[ \operatorname{ch} \left( \frac{\varepsilon}{kT} \right) \right], \quad (16)$$

откуда, пользуясь формулой (14) для  $\rho(\varepsilon)$ , получаем выражение для электронной теплоемкости  $c_V = \partial \langle E \rangle / \partial T$  при  $H=0$

$$c_V = 3nk \left( \frac{\sigma}{kT} \right)^2 \left[ 1 - \frac{5}{4} \left( \frac{\sigma}{kT} \right)^2 \right], \quad \Delta \ll \sigma \ll kT, \quad (17a)$$

$$c_V = 4nk \left( \frac{\Delta}{\sigma} \right)^3 \sqrt{\frac{\Delta}{kT}} e^{-\frac{\Delta}{kT}}, \quad kT \ll \sigma, \quad \Delta \ll \sigma. \quad (17b)$$

В формулах (17a), (17b)  $n$  — концентрация донорных центров. При низких температурах теплоемкость стремится к нулю в согласии с теоремой Нернста, причем благодаря наличию щели это стремление экспоненциальное.

Аналогично из (16) с учетом (14) можно вычислить электронную часть магнитной восприимчивости  $\chi = (-\partial^2 \Delta F / \partial H^2) |_{H \rightarrow 0}$  в нулевом поле

$$\chi = \frac{\mu_B^2 a^2}{T} n, \quad \Delta \ll \sigma \ll kT,$$

$$\chi = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\mu_B^2 a^2}{\sigma} n, \quad kT \ll \sigma, \quad \Delta \ll \sigma, \quad (18)$$

$$a = 1 + \frac{A}{g\mu_B^2} \chi_0.$$

Здесь  $\chi_0$  — магнитная восприимчивость системы локализованных спинов. В неэргодической фазе она не поддается аналитическому определению. В эргодической фазе  $\chi_0$  — обычная парамагнитная восприимчивость  $\chi_0 = \chi_p$ .

В области высоких температур  $kT \gg \sigma$  формулы (17) и (18) совпадают с аналогичными формулами работы [5].

Авторы благодарны М. А. Кривоглазу за обсуждение результатов работы.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Nawrocki M., Planel R., Fishman G., Galazka R. R. Phys. Rev. Lett., 1981, vol. 46, N 11, p. 735—738.
- [2] Алов Д. А., Губарев С. И., Тимофеев В. Б., Шепель Б. Н. Письма в ЖЭТФ, 1981, т. 34, № 2, с. 76—80.
- [3] Heiman D., Wolff P. A., Warnock J. Phys. Rev. B, 1983, vol. 27, N 8, p. 4848—4860.
- [4] Peterson P. L., Bartholomew D. U., Debska V. et al. Phys. Rev. B, 1985, vol. 32, N 1, p. 323—340.
- [5] Dieltl T., Spalek J. Phys. Rev. Lett., 1982, vol. 48, N 5, p. 355—358; Phys. Rev. B, 1983, vol. 28, N 3, p. 1548—1563.
- [6] Рябченко С. М., Семенов Ю. Г. ЖЭТФ, 1983, т. 84, № 4, с. 1419—1431.
- [7] Рябченко С. М., Семенов Ю. Г. ФТТ, 1984, т. 26, № 11, с. 3347—3354.
- [8] Warnock J., Wolff P. A. Phys. Rev. B, 1985, vol. 31, N 10, p. 6579—6587.
- [9] Golnik A., Spalek J. J. Magn. Magn. Mater 1986, vol. 54—57, pt 11, p. 1207—1213.
- [10] Brandt N. B., Moshchalkov V. V. Adv. Phys., 1984, vol. 33, N 3, p. 193—256.
- [11] Chowdhury D. Spin glasses and other frustrated systems. Singapore, 1986. 385p.
- [12] Нагаев Э. Л. ЖЭТФ, 1978, т. 74, № 4, с. 1375—1385.
- [13] Thibblin U., Chao K. A., Michas R. J. Phys. C, 1986, vol. 19, N 14, p. L303—L308.

Институт металлофизики АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
21 октября 1987 г.  
В окончательной редакции  
11 февраля 1988 г.