

На правах рукописи

Орленко Федор Евгеньевич

ЗАКОНОМЕРНОСТИ СПИНОВОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В ЭЛЕКТРОННЫХ
СИСТЕМАХ ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТИ И В СИСТЕМАХ ЧАСТИЦ С
«БОЛЬШИМ» СПИНОМ

01.04.02 – теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2011

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Зегря Георгий Георгиевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор
Эйдельман Евгений Давидович

доктор физико-математических наук,
профессор
Качоровский Валентин Юрьевич

Ведущая организация: Государственное образовательное
учреждение высшего профессионального
образования «Новгородский государственный
университет им. Ярослава Мудрого»

Защита состоится 19 октября 2011 г. В 16 ч. 00 мин. на заседании диссертационного Совета Д 212.229.29 при ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу:
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, II уч. корп., ауд. 265

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан «_____» _____ 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат физ-мат. наук,
доцент

Ермакова Н.Ю.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Теория формирования спин-поляризованных областей в низкоразмерной гетероструктуре и когерентного спинового состояния в антиферромагнитных спин-1-цепочках актуальна для современных разработок квантовых запоминающих устройств, для создания наногетероструктур и метаматериалов. Динамической двумерной или одномерной называют системы электронов или дырок, движение которых свободно только в двух или одном пространственном измерении, а их движению во втором или в третьем соответствует дискретный энергетический спектр. Эти системы не являются одномерными (двумерными) в прямом смысле, поскольку волновые функции носителей зависят от трёх координат, электромагнитные поля распространяются в трёхмерном пространстве, и спин остаётся трёхмерным. Наиболее известные примеры 2D-систем – это гетероструктуры. Получение квазиодномерной системы возможно в так называемом топологическом металле, например, на поверхности (114) полуметалла висмута, которая поддерживает квазиодномерные свойства электронного газа [1]. Подобные системы, могут использоваться в качестве элементной базы для создания квантово-информационных устройств, поскольку при низких температурах большинство нежелательных релаксационных процессов в них оказываются подавленными. На роль элементной базы в устройствах квантовой памяти могут претендовать и системы частиц с «большими» спинами, то есть спинами больше $1/2$. Эти системы обладают целым рядом свойств, принципиально отличающихся от свойств аналогичным образом устроенных систем локализованных половинных спинов[2]. Родилось направление в теоретической (статистической) физике [2,3], посвященное численному изучению критических явлений и фазовых трансформаций в низкоразмерных системах локализованных «больших» спинов. Всё вышесказанное определяют актуальность предлагаемых исследований.

Целью диссертационной работы является изучение закономерностей спинового упорядочения в низкоразмерных системах электронов и системах частиц с «большими» спинами. Исследование эффектов изменения

размерности пространства и критериев возникновения спинполяризованного состояния в магнитном поле и при его отсутствии.

Задачами диссертационной работы являются:

1) Проведение расчета энергии квазидвумерной и квазиодномерной систем свободных электронов методом Хартри–Фока (ХФ) с учетом поляризации и проведение сравнительного анализа эффектов понижения размерности на конфигурацию основных параметров системы. Установление универсальной зависимости энергии от степени поляризации и параметра размерности.

2) Исследование возможности перехода в поляризованное состояние и установление критериев спинового упорядочения в 2D-системе путём применения различных методов теоретического исследования (метод ХФ, векторная модель Гейзенберга—Дирака—Ван-Флека (ГДвФ), теория Фермижидкости Ландау (ФжЛ)), построенных для вырожденного газа электронов проводимости. Анализ усиления парамагнитного отклика в магнитном поле с учетом спиновых корреляций с помощью теории ФжЛ.

3) Построение гамильтониана обменного взаимодействия в векторной модели типа модели ГДвФ в спиновом представлении для систем тождественных частиц со спинами $S=1$ и $S=3/2$. Исследование основного состояния антиферромагнитной спин-1- цепочки методом ренорм-групп. Исследование линейных и нелинейных возбуждений цепочек спин-1-ионов в квазиклассическом приближении. Установление дисперсионной зависимости линейных спиновых волн и возможности формирования магнитного солитона.

4) Исследование состояния пар тяжелых дырок со спинами $S=3/2$ и вычисление обменной энергии акцепторов в антимониде индия. Установление влияния обменного взаимодействия на положение расщеплённой зоны тяжелых дырок и ширину щели при одноосном сжатии и включении сильного магнитного поля с индукцией $B > 8\text{T}$ в $\text{In}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$

Новизна полученных результатов состоит в том, что впервые:

1. установлена зависимость энергии электронной системы от степени поляризации α и параметра размерности системы ν в рамках метода ХФ.

2. получено универсальное соотношение для критического параметра r_s^* (среднего расстояния между частицами, измеренного в атомных единицах) (5) с учетом размерности ν пространства, при выполнении неравенств с которым

$r_s > r_s^*$ реализуются спинполяризованное состояние электронного газа с поляризацией степени $\alpha > 0$.

3. показано, что в одномерном случае критический параметр $r_s^* < 1$ меньше единицы, что означает наличие поляризации в системах, где расстояния между частицами превышает радиус Бора, то есть для всех существующих плотностей квазиодномерной электронной системы;

4. получен явный вид функции Ландау в квазидвумерном случае, на основе которой получены трансцендентные уравнения для определения величины поляризации и описаны эффекты усиления парамагнитной восприимчивости;

5. получено выражение для энергии основного состояния антиферромагнитной спин-1-цепочки в модели ближайших соседей и волновой функции основного состояния в спиновом представлении в векторной модели типа модели ГДвФ;

6. установлено, что возбуждения спин-1 цепочки в линейном приближении имеют отличную от антиферромагнетиков с половинным спином дисперсионную зависимость, а учет нелинейных вкладов приводит к образованию dark-bright-солитона;

7. получен спиновый Гамильтониан обменного взаимодействия пары тождественных частиц со спином $3/2$ с определёнными коэффициентами и вычислены его собственные значения, величина зеемановского расщепления уровней энергии в магнитном поле, необходимые для оценки дырочной проводимости в легированном марганцем антимониде индия.

Достоверность полученных результатов определяется адекватным применением методов теоретической физики в рамках границ их применимости, таких как метод ХФ, теория ФЖЛ, векторная модель ГДвФ, Обменная теория возмущений (ОТВ), Метод ренорм-групп, а также совпадением полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными, данными численных экспериментов и выводами теоретических работ, использующих альтернативные подходы.

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что полученные результаты расширяют представления о поведении спиновых систем, в том числе систем с «большими» спинами, в низкоразмерных структурах и могут быть использованы в таких областях современной физики и техники, как

квантовая метрология, квантовая информатика, теория создания новых магнитных наноматериалов на основе наногетероструктур и метаматериалов.

Положения выносимые на защиту:

1. Аналитическая зависимость энергии электронной системы и соотношение для критического параметра r_s^* (среднего расстояния между частицами, измеренного в атомных единицах) как функции параметра ν размерности пространства и степени поляризации α , полученные в рамках метода Хартри–Фока. Выполнение неравенств с параметром r^* приводит систему в поляризованное состояние с $\alpha > 0$ если $r > r^*$, и при $r < r^*$ реализуется неполяризованное состояние.

2. Усиление парамагнетизма, обусловленное ферми-жидкостными эффектами, связанными со спиновым выстраиванием, в квазидвумерном вырожденном электронном газе. Полученный в диссертации явный вид функции Ландау в квазидвумерном случае позволяет вывести трансцендентные уравнения для определения величины поляризации и описать эффекты усиления парамагнитной восприимчивости.

3. Выражение для энергии основного состояния антиферромагнитной цепочки $S=1$ спинов в модели ближайших соседей, полученное квантовомеханически методом Гейзенберга--Дирака--Ван-Флека, где константа обменного взаимодействия A перенормированна методом ренорм-групп. Энергия имеет особенность, которая указывает на формирование антиферромагнитного дальнего порядка. Получена волновая функция основного состояния цепочки ионов в спиновом представлении.

4. Методом Гейзенберга—Дирака—ван-Флека в спиновом представлении получен гамильтониан обменного взаимодействия пары тождественных частиц со спином $3/2$ и вычислены его собственные значения, величина зеемановского расщепления уровней энергии в магнитном поле \vec{H} , необходимые для оценки дырочной проводимости в легированном марганцем антимиониде индия.

Апробация работы Результаты, представленные в диссертации, докладывались на научных семинарах кафедр «Теоретическая физика», «Экспериментальная физика» СПбГПУ, на XII Всероссийской молодёжной конференции полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург 25-29 октября 2010, на Конференции

по физике и астрономии для молодых ученых Санкт-Петербурга и Северо-Запада Санкт-Петербург; 27—28 октября 2010 года AISAMP-8, Australia 2008, PS1-34, Австралия 4-7 ноября 2008; ICONO/LAT 2010, Kazan, 23-26 August, Казань, 23-26 августа 2010; International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (MPS2010) Sendai, Japan September 4-7, 2010 Сендай, Япония, 4-7 сентября 2010.

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 6 статьях, из них 4 работы – в отечественных реферируемых журналах, входящих в перечень ВАК и 2 статьи – в зарубежных.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, 4-х глав, заключения и двух приложений, изложенных на 124 страницах, включая 13 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются цели и задачи работы, отмечается новизна и практическая значимость выносимых на защиту результатов, приведены сведения об апробации работы.

Глава 1 посвящена проблеме спинового упорядочения в квазидвумерной электронной системе. Здесь представлен обзор публикаций, посвященных этой теме, например [4], в которой вычисляется корреляционная энергия путём суммирования всех циклических диаграмм и учета обменных вкладов до второго порядка включительно. На результирующее поляризационное состояние влияют два основных вклада: первый связан непосредственно с кинетической энергией вырожденного Ферми-газа, второй -- с обменным взаимодействием, являющимся результатом антисимметрии волновой функции. Основные параметры, характеризующие электронный газ в 2D- системе, помещённой в магнитное поле, E_F - энергия Ферми, A - энергия обменного взаимодействия и $\vec{\mu}_B \cdot \vec{B}$ - энергия магнитно-дипольного взаимодействия с магнитным полем, являются величинами одного порядка. Вариация указанных трёх основных параметров в 2D-системе приводит к ряду магнитных явлений, связанных с конкуренцией указанных вкладов в спиновое упорядочение. Для описания эффектов спинового упорядочения применены различные методы (метод ХФ, векторная модель ГДвФ, теория ФжЛ), поскольку каждый из этих

методов является приближенным и имеет свои ограничения. Сопоставление результатов, полученных этими методами, даёт объективную картину явлений спинового упорядочения в квазидвумерной системе. Приведены выражения энергии, приходящейся на одну частицу, как функции степени поляризации α ,

$$\text{методом ХФ: } E(\alpha) = E_F \frac{1}{2} (1 + \alpha^2) + C - \frac{A}{2} \left\{ (1 + \alpha)^{3/2} + (1 - \alpha)^{3/2} \right\}, \quad A = -\frac{e^2 k_F^3}{6\pi\sigma} = \frac{e^2 \sqrt{2\pi\sigma}}{3\pi}$$

$$\text{ГДФ: } E(\alpha) = -A \left\{ \frac{\alpha}{2} \left(\frac{N\alpha}{2} + 1 \right) - \frac{3}{4} \right\} + \varepsilon_0 + E_F \frac{1}{2} (1 + \alpha^2),$$

В первой главе диссертации получены следующие результаты:

1. Критерии возникновения поляризованного состояния в двумерном вырожденном электронном газе, которые приведены в таблице 1.

Таблица 1. Критерии возникновения поляризованного состояния.

методы	ХФ	ГДФ	ФЖЛ
Общий критерий поляризованного состояния	$\frac{4E_F}{3} \sqrt{\frac{2}{5+\sqrt{5}}} < A.$	$A > \frac{2E_F}{\nu+1}$ $\nu = 2 \div 5$	$\beta = \frac{2E_F}{J(p_F)}$ $\beta \in [1, 1.53]$
Условия для концентрации	$\sigma < 6,97 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$	$\sigma < 7,57 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$	$\sigma \in [2,8; 7,82] \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$
Эксперимент [5]	$\alpha \sim 20\%, \sigma < 10^{12} \text{ см}^{-2}.$	$\alpha \sim 40\%, \sigma < 5.510^{11} \text{ см}^{-2}$ $\alpha \sim 30\%, \sigma < 7.510^{11} \text{ см}^{-2}$	$\alpha = 100\%, \sigma < 210^{11} \text{ см}^{-2}$

2. Найдены области допустимых концентраций электронов в полупроводниковой пленке для возникновения в ней эффектов поляризации.

3. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными [5]: в магнитной полупроводниковой гетероструктуре $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te} / \text{Cd}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ ($\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te} / \text{CdMgTe}$) и исследован с помощью электронно-резонансного метода раммановской спектроскопии.

4. Получен явный вид функции f Ландау в квазидвумерном случае

$$f = -\frac{j(\vec{p}, \vec{p}')}{\sigma} \cdot \left[\frac{1}{4} + \hat{s} \cdot \hat{s}' \right], \quad (\text{где } \sigma \text{ — поверхностная концентрация электронов,}$$

$j(\vec{p}, \vec{p}')$ — параметр обменного взаимодействия свободных электронов), на основе которой получено трансцендентное уравнение для определения степени

поляризации: $th(x) = \beta \cdot \frac{x}{0.5+x}$, где $\beta = \frac{2E_F}{J(p_F)}$ и описаны эффекты усиления

парамагнитной восприимчивости:
$$\chi = \frac{2\mu_0^* \sigma}{1 - \left(\frac{J(p_F)}{2E_F} \right)} \cdot \frac{1}{E_F}$$

В заключении к **главе 1** приведены полученные результаты и выводы.

Глава 2 посвящена исследованию влияния размерности системы на спиновую поляризацию в вырожденном электронном газе. Исследуется спиновое упорядочение в квазиодномерной системе с помощью метода Хартри-Фока с учетом варьируемого параметра α поляризации, и проводится сравнительный анализ эффектов понижения размерности на конфигурацию основных вкладов в энергию и на характер спинового упорядочения. Связь основных параметров системы с её размерностью приведена в таблице.

Таблица 2. Сравнение основных параметров системы для различной размерности.

1 D [6, 2*]	2 D [4], [1*]	3 D [7]
$E_F = \frac{\hbar^2}{8m} \sigma_i^2 \pi^2$	$E_F = \frac{\hbar^2}{m} \sigma_s \pi$	$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$
$\Delta\mu(T) = + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \cdot E_F$	$\Delta\mu(T) = T \ln \left(1 - e^{-\frac{E_F}{T}} \right) \approx -T e^{-\frac{E_F}{T}}$	$\Delta\mu(T) \approx - \frac{\pi^2}{12} E_F \cdot \left(\frac{T}{E_F} \right)^2$
$E_F^\pm = E_F \cdot (1 \pm \alpha)^2$	$E_F^\pm = E_F (1 \pm \alpha)$	$E_F^\pm = E_F \cdot (1 \pm \alpha)^{2/3}$
$\frac{K}{N} = \frac{E_F}{6} \left((1+\alpha)^3 + (1-\alpha)^3 \right)$	$\frac{K}{N} = E_F \frac{1}{4} \left((1+\alpha)^2 + (1-\alpha)^2 \right)$	$\frac{K}{N} = \frac{3}{10} E_F \left((1+\alpha)^{5/3} + (1-\alpha)^{5/3} \right)$
$\frac{E_1^\pm}{N} = - \frac{e^2 k_F^2 \cdot (1 \pm \alpha)^2}{\sigma_i} \left(\frac{5}{2} - 3\gamma \right)$	$\frac{E_1^\pm}{N} = - \frac{e^2 k_F^3}{6\pi\sigma_s} (1 \pm \alpha)^{3/2}$	$\frac{E_1^\pm}{N} = - \frac{3}{2} \frac{e^2 k_F^4}{\pi n} (1 \pm \alpha)^{4/3}$

Откуда видно, что одномерный случай выделен тем, что имеется одинаковая зависимость от степени поляризации в кинетической энергии и в обменном вкладе в потенциальную энергию, тогда как в других случаях степень роста кинетической составляющей с увеличением степени поляризации опережает отрицательные вклады потенциальной энергии ($3/2 \text{ --- } 2$ – в 2D случае и $4/3$ –

5/3 - для 3D систем). Полная энергия системы, приходящаяся на одну частицу, выраженная в общем виде через универсальный безразмерный параметр r_s , связанный со средним расстоянием между частицами в системе для произвольной размерности ν , имеет вид:

$$\frac{E}{N} = \frac{C_{2\nu}}{r_s^2} \left((1+\alpha)^{\frac{\nu+2}{\nu}} + (1-\alpha)^{\frac{\nu+2}{\nu}} \right) - \frac{C_{1\nu}}{r_s} \left((1+\alpha)^{\frac{\nu+1}{\nu}} + (1-\alpha)^{\frac{\nu+1}{\nu}} \right), \quad (1)$$

где ν - есть размерность системы, параметр r_s определяется в 3D- системе как $\frac{N}{V} = \frac{3}{4\pi r_s^3 a_B^3}$, в 2D- как $\frac{N}{S} = \frac{1}{\pi r_s^2 a_B^2}$ [5] и 1D- как $\frac{N}{L} = \frac{1}{r_s a_B}$. Система ферромагнитна,

если E/N имеет минимум при $\alpha \rightarrow 1$. Это возникает при $\left(\frac{d}{dr_s} \frac{E}{N} \right) = 0$, то есть при

$$r_s^* = \frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}} \frac{\left((1+\alpha)^{\frac{\nu+2}{\nu}} + (1-\alpha)^{\frac{\nu+2}{\nu}} \right)}{\left((1+\alpha)^{\frac{\nu+1}{\nu}} + (1-\alpha)^{\frac{\nu+1}{\nu}} \right)}. \quad (2)$$

Таким образом, при $r_s > r_s^*$ реализуется поляризованное состояние электронного газа с $\alpha > 0$ (электронный газ с низкой плотностью) и при $r_s < r_s^*$ - немагнитное состояние. Соотношение коэффициентов $C_{1\nu}$ при первой и $C_{2\nu}$ при второй степени от $\frac{1}{r_s}$ само меняется в зависимости от ν размерности системы: по мере уменьшения размерности системы относительный вклад обменной энергии, ответственной за упорядочение спинов, увеличивается, тогда как кинетические факторы, с учетом принципа запрета Паули, ослабляются.

Таблица 3. Соотношение коэффициентов относительного вклада кинетической к обменной энергии.

	1D	2D	3D
$\frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}}$	0.238	1.666	4.829
r_s^*	$\frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}} \cdot 2 = 0.476$	$\frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}} \cdot \sqrt{2} = 2.356$	$\frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}} \cdot \sqrt[3]{2} = 6.08$

На рисунке 1 представлены энергетические поверхности квазиодномерной и квазидвумерной электронной системы соответственно как функция универсального безразмерного параметра r_s расстояния и степени поляризации

α . Значения энергии отложены по вертикальной оси в атомных единицах (ридбергах). «Завал» энергетических поверхностей приходится в сторону увеличения поляризации, то есть при всех значениях $r_s > r_s^*$ поляризованное состояние тем выгоднее, чем выше его степень поляризации. Различием этих диаграмм для трёх значений размерности пространства являются порядки величин «завала» поверхности (то есть разница энергии поляризованного и неполяризованного состояний: в случае 1D – она составляет (рис.1 А) $\sim 1Ry$, в случае 2D-- $\sim 0.01Ry$ (1B), в случае 3D-- $\sim 0.0001Ry$). Положение изгиба поверхности для разных метрик пространства приходится на разные значения r_s^* , так для 1D-системы $r_s^* \sim 0.5$, 2D--- $r_s^* \sim 2.4$, 3D -- $r_s^* \sim 6.1$. Данные теоретические выводы подтверждаются экспериментально полученной в работе [5] диаграммой.

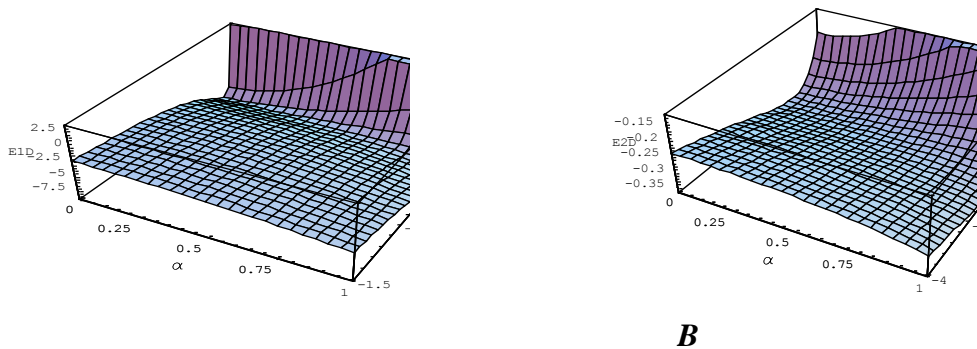


Рис.1 Энергетическая поверхность квазиодномерной А и квазидвумерной В системы.

Глава 3 посвящена теоретическому исследованию свойств антиферромагнитной цепочки «больших» спинов $S=1$. Критические явления и возможные фазовые диаграммы в спин-1-цепочках обсуждаются в теоретических работах [2,3,] где наряду с численными экспериментами получены аналитические решения. В полуклассическом приближении в [2] было найдено солитонное решение для возбуждений, анализировались также промежуточные фазы путём изучения модели с учетом биквадратного члена в обменном взаимодействии. В других работах, например [3], использовался модельный гамильтониан с неопределённым коэффициентом:

$$H_{AKLT} = J \sum_i [(\hat{s}_i \cdot \hat{s}_{i+1}) + \beta (\hat{s}_i \cdot \hat{s}_{i+1})^2]$$

и было показано, что существование решений возможно при значении коэффициента $\beta = 1/3$. В работе [8] было доказано, что коэффициент β принимает единственное допустимое значение $\beta=1$. Таким образом, знание

точного вида гамильтониана, описывающего поведение спин-1 системы, является принципиальным моментом решения проблемы статистического описания таких систем и анализа критических явлений в них.

Задачи, которые ставятся и решаются в **главе 3**:

1. Построение векторной модели ГДвФ для одномерной цепочки спин-1-ионов. На основе использования общей теории [8] «больших» спинов получен полный гамильтониан обменного взаимодействия в виде:

$$\widehat{H}_{int} = \sum_i \left[K_{i,i+1} + A_{i,i+1} \left\{ \left(\widehat{s}_i \cdot \widehat{s}_{i+1} \right)^2 + \widehat{s}_i \cdot \widehat{s}_{i+1} - 1 \right\} \right] \quad (3)$$

и антисимметричные спиновые состояния для системы 2^v частиц

2. Исследование основного состояния антиферромагнитной $S=1$ цепочки методом ренорм-групп. Гамильтониан (3) цепочки спинов представляется в виде ряда [6*]

$$\widehat{H}_{int} \approx K \frac{N}{2} + \sum_{i=1, N/2} A_{i,i+1} \langle \bullet_i \bullet_{i+1} \rangle + \sum_{q=1, N/4} A_{q,q+1}^{(1)} \langle \langle \bullet \bullet \rangle_q \langle \bullet \bullet \rangle_{q+1} \rangle + \dots, \quad (4)$$

где символически обозначены операторы обменного взаимодействия

$A_{i,i+1} \langle \bullet_i \bullet_{i+1} \rangle = A_{i,i+1} \left\{ \left(\widehat{s}_i \cdot \widehat{s}_{i+1} \right)^2 + \widehat{s}_i \cdot \widehat{s}_{i+1} - 1 \right\}$ пары соседних ионов; двух пар –

$A_{q,q+1}^{(1)} \langle \langle \bullet \bullet \rangle_q \langle \bullet \bullet \rangle_{q+1} \rangle = A_{q,q+1}^{(1)} \left\{ \left(\widehat{s}_q \cdot \widehat{s}_{q+1} \right)^2 + \widehat{s}_q \cdot \widehat{s}_{q+1} - 1 \right\}$ с перенормированной

константой $A_{q,q+1}^{(1)}$ обменного взаимодействия и суммарными спинами пары

$\widehat{s}_{q=\frac{i+1}{2}} = \widehat{s}_i + \widehat{s}_{i+1}$ и $\widehat{s}_{q+1=\frac{i+3}{2}} = \widehat{s}_{i+2} + \widehat{s}_{i+3}$ и так далее. Энергия основного состояния

находится методом последовательных приближений с учетом блочной структуры гамильтониана. Состоянием, соответствующим минимальной энергии в паре частиц является антисимметричное состояние с суммарным спином $S=1$, в паре блоков – с суммарным спином $\sigma=1$, и так далее. Таким образом, значение суммарного спина Σ всей цепочки, состоящей из N ионов, будет равен $\Sigma = 1$, что соответствует удельной намагниченности системы,

приходящейся на одну частицу $M/N = \frac{g\Sigma}{N} \rightarrow 0$, и относится к

антиферромагнитному. Полная энергия при этом будет иметь вид:

$$\frac{E_{int}}{N} \approx \frac{K}{2} + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} \right) \sum_v \frac{A^{(v)}}{2^v} = \frac{1}{2} \left(K - A^{(0)} \sum_v \frac{\xi^v}{2^v} \right) = \left(\frac{1}{2} K - A^{(0)} \frac{1}{2 - \xi} \right) \quad (5)$$

Здесь константа обменного взаимодействия $A^{(k)}$ при каждом последующем k -м шаге перенормировки связана с константой $A^{(k-1)}$ предыдущего шага $k-1$ -го как

$$A^{(k)} \approx A^{(k-1)} \xi, \quad (6)$$

где ξ - постоянная ренормализации. Следуя методу ренорм-групп [9], получаем уравнение для нахождения коэффициента ренормализации:

$$2ch\left(\frac{2A}{T}\right) = \frac{2ch\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)}{2ch\left(3\frac{A^{(1)}}{T}\right)} e^{\frac{2A^{(1)}}{T}}. \text{ В пределах области существования решений } x = \frac{A}{T} \in$$

$[0, \ln(5/4)/2]$ и соответствующей ей области значений $x' = \frac{A^{(1)}}{T} \in [0, \ln(2)/2]$

имеем решение: $\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)_1 = x'_1 = \frac{1}{2} \ln\left\{\frac{1 - \sqrt{1 - 4(e^{2x} - 1)}}{2(e^{2x} - 1)}\right\}$. Коэффициент ренормализации

определяется как отношение ординаты к абсциссе точки кривой при заданной температуре. При определённой температуре ($T^* \approx \frac{A}{0.075 \cdot k_B}$, где k_B - константа

Больцмана) коэффициент ренормализации $\xi \rightarrow 2$ стремится к двум, что в соответствии с (7) означает переход в антиферромагнитное состояние с возникновением дальнего порядка.

3. Получены аналитические выражения для возбуждений спин-1 цепочки в квазиклассическом приближении и исследован их линейный и нелинейный характер. В соответствии с теоремой Блоха собственный магнитный момент каждого иона прецессирует в эффективном магнитном поле, выражение для которого получено в виде:

$$\vec{H}^* = \frac{-A}{g} \left\{ \vec{s}_k \left(2 + b^2 \left(\frac{\partial \vec{s}_k}{\partial x} \right)^2 + \frac{b^4}{4} \left(\frac{\partial^2 \vec{s}_k}{\partial x^2} \right)^2 \right) + \frac{b^2}{2} (1 + 2s_k^2) \cdot \frac{\partial^2 \vec{s}_k}{\partial x^2} \right\}. \quad (7)$$

Установлена дисперсионная зависимость спиновых волн в линейном приближении $\omega = \frac{\gamma As}{g} \left\{ -2 + \frac{5}{2} b^2 k^2 \right\}$, полученная из уравнения для циклических

координат $\dot{m}^+ = \frac{\gamma As}{g} i \left\{ -2m^+ + \frac{b^2}{2} (1 + 2s(s+1)) \frac{\partial^2 m^+}{\partial x^2} \right\}$. Спектр линейных возбуждений

отделён от основного состояния энергетической щелью $\Delta = \frac{2\hbar\gamma As}{g}$. Если в

выражении (10) сохранить первые исчезающие нелинейные поправки, то

система уравнений для поперечных компонент собственных магнитных моментов переходит в систему уравнений для Dark–Bright –солитона [10].

Глава 4 посвящена исследованию магнитного состояния системы тяжелых дырок, характеризующихся спином $3/2$. Эффект гигантского отрицательного магнетосопротивления (ОМС) в немагнитном кристалле при увеличении магнитного поля был обнаружен в 1984, когда наблюдалось уменьшение сопротивления более чем в тысячу раз в одноосно деформированном антимониде индия, легированном марганцем [11]. Известные квантовые поправки к проводимости, обусловленные слабой локализацией электронов в полупроводниках, взаимодействием с магнитными примесями, спин-орбитальным взаимодействием и др., которые могут приводить к ОМС, не могли объяснить эффект гигантского ОМС [11]. Для описания возрастания обменного взаимодействия дырок на акцепторах в [11] использовался модельный гамильтониан для пар акцепторов, расположенных по оси сжатия, спин которых равен $3/2$, в виде: $\hat{H} = c_0 + c_1(\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2) + c_2(\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2)^2 + c_3(\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2)^3$, где коэффициенты c_0, c_1, c_2, c_3 являются неопределёнными. Анализ собственных значений гамильтониана приводит к наложению определённых условий на соотношения коэффициентов. Магнитное поле индуцирует металлическое состояние тем, что вызывает парамагнитное расщепление энергии дырок на акцепторах, сравнимое с шириной примесной зоны. Знание точного вида гамильтониана, описывающего обменное взаимодействие в системе дырок со спином $3/2$, играет здесь ключевую роль для объяснения перестройки спектра. **В 4-й главе** получен гамильтониан обменного взаимодействия в спиновом представлении для пары тяжелых дырок со спином $3/2$, на основе использования общей теории [8], и найдены его собственные значения. Показано, что в расщеплённой валентной зоне «проводящее» состояние тяжелых дырок вырождено по полному спину, который принимает два значения $\sigma = 0$ и $\sigma = 2$. Окончательно вырождение снимается приложенным сильным магнитным полем, при учете которого гамильтониан переписывается в виде, явно содержащем оператор квадрата спина пары $\hat{\sigma}_{1,2}^2$ частиц с номерами $1, 2$ для системы:

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\aleph_z g \mu_B \hat{\sigma}_{12z} + K + \left\{ -\frac{2}{9} \left(\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{1,2}^2 - 2\hat{j}^2) \right)^3 - \frac{11}{18} \left(\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{1,2}^2 - 2\hat{j}^2) \right)^2 + \frac{9}{8} \left(\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{1,2}^2 - 2\hat{j}^2) \right) + \frac{67}{32} \right\} \quad (8)$$

где \aleph_z - напряженность магнитного поля, направленного вдоль оси сжатия образца, g - гиромагнитный фактор акцептора, μ_B - магнетон Бора. В магнитном поле наиболее выгодным состоянием будет антисимметричное состояние с полным спином $\sigma=2$ и его максимальной проекцией $\sigma_z=2$. Коэффициент электропроводности полупроводника, обусловленный рассеянием на примесях, определяется соотношением $\sigma_{im} = \frac{e^2}{mv_T n' Q} n_0 e^{\frac{\Delta}{T}}$, где тепловая скорость электрона $v_T = \sqrt{T/m}$, с учетом рассеяния на примесях, концентрация которых n' , а сечение Q . Ширина запрещенной зоны Δ в чистом антимониде индия составляет 0.2 eV, ширина запрещенной зоны Δ' между примесной и валентной зоной составляет в недеформированном кристалле ~ 0.04 eV, при сжатии этот зазор увеличивается вследствие роста абсолютного значения обменного взаимодействия: $\Delta'_x = \Delta' \pm |A_x|$, что ухудшает проводимость. Расщепление примесных уровней в сильном магнитном поле $\aleph_z > 8T$ поднимает верхний (антисимметричный) подуровень до примесных уровней, поскольку щель $\Delta'_x \sim \aleph_z g \mu_B \sigma_z$ между примесным подуровнем и валентной зоной практически нивелируется магнитным полем. Таким образом дырочная проводимость при температуре ~ 10 К увеличивается в $\left| e^{\frac{\Delta'_x}{T}} \right| \approx e^7 = 1096$ раз, что соответствует выводам [11].

В Заключение сформулированы общие выводы к работе:

1. В процессе установления равновесной спиновой поляризации в вырожденном электронном газе в системе с произвольной размерностью пространства участвуют два конкурирующих фактора: 1) - несилевой обмен, являющийся следствием принципа запрета Паули, так называемый «кинетический» вклад, и 2) - собственно обменное кулоновское взаимодействие. Степень влияния упорядочивающего фактора определяется как соотношением коэффициентов при «кинетическом» вкладе, и собственно «обменном» вкладе, так и зависимостью этих вкладов от универсального безразмерного параметра расстояния. При этом по мере уменьшения

размерности системы, относительный вклад обменного взаимодействия увеличивается по сравнению с кинетическим фактором, что объективно подтверждается соотношением коэффициентов $\frac{2C_{2\nu}}{C_{1\nu}}$, приведённых в таблице 3.

Обнаружено существование критического расстояния между частицами, в случае превышения которого обменный вклад превалирует над кинетическим.

2. Спиновый гамильтониан с определёнными коэффициентами для цепочки спин-1 получен на основе использования выводов общей теории спинового упорядочения «больших» спинов [8]. На основании вычисленного в диссертации собственного значения энергии основного состояния спин-1 цепочки приходим к выводу о том, что антиферромагнитное состояние цепочки ионов с $s=1$ формируется так, что при парном взаимодействии наиболее выгодным состоянием является антисимметричное состояние с суммарным спином ближайших соседей $S=1$, на ν -й итерации укрупнения при взаимодействии двух кластеров, состоящих из $2^{\nu-1}$ каждый формируется кластер, содержащий 2^ν частиц, для которого антисимметричное состояние с суммарным спином $\Sigma=1$ кластера является основным. Таким образом, намагниченность системы, помещенной в магнитное поле, определяется проекцией на направление поля именно этого суммарного спина $\Sigma=1$, так что удельная намагниченность системы, приходящаяся на один ион стремится к нулю. В отличие от спин-1/2 магнетиков, спектр возбуждений антиферромагнитной спин-1 цепочки отделён энергетической щелью, предсказываемой ещё в работах Халдана [2]. В рассматриваемой цепочке могут распространяться и нелинейные волны, имеющие форму Dark-Bright-солитона.

3. В настоящей работе был получен гамильтониан обменного взаимодействия в спиновом представлении для пары частиц со спином $3/2$ на основе использования общего метода, разработанного в [8] и найдены возможные собственные значения энергии парного взаимодействия акцепторов, расположенных на оси сжатия. Показано также, что основное антиферромагнитное состояние в антимониде индия, легированном марганцем, не является простым, а вырождено по полному спину пары акцепторов, который может иметь два значения $\sigma=0$ и $\sigma=2$. Величина зеемановского расщепления уровней энергии в сильном магнитном поле $\mathfrak{N}_z > 8T$ становится сравнимой с энергетической щелью, что приведет к поднятию состояний

тяжелых дырок до примесных подуровней, тем самым нивелируя щель между валентной зоной и примесными подуровнями. Это увеличивает дырочную проводимость при температуре ~ 10 К в $\left| e^{\frac{\Delta_z}{T}} \right| \approx e^7 = 1096$ раз.

В Приложении1 приведены диаграммы энергетических поверхностей для 1D, 2D, 3D- систем и экспериментально полученная в работе [5] диаграмма 2D газа. Проводится сопоставление результатов.

В Приложении2 приведён вывод вектора основного состояния спин-1 цепочки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wells J. W., Nondegenerate Metallic States on Bi(114): A One-Dimensional Topological Metal [Text]/ J. W. Wells, J. H. Dil, F. Meier, J. Lobo-Checa, V. N. Petrov, J. Osterwalder//Phys. Rev. Lett. –2009—Vol.102, 096802-096805.
2. Haldane, F. D. M. Nonlinear Field Theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Neel state. [Text]/ F. D. M. Haldane// Phys. Rev. Lett. – 1983-Vol.50, N15-- P. 1153-1156.
3. Albuquerque, A. Fabricio Quantum phase diagram and excitations for the one-dimensional $S=1$ Heisenber Antiferromagnet with single-ion anisotropy [Text]/ A. Fabricio Albuquerque, Chris J. Hamer, and Jaan Oitmaa, //Phys. Rev. B –2009—Vol.79—P. 054412.
4. Rajagopal A. K. Correlation in a two-dimensional electron system [Text]/ A. K. Rajagopal, John J. C. Kimball // Phys.Rev. B. – 1977.– Vol.15.– № 5.– P.2819–2825.
5. Perez, Florent, Spin-polarized two-dimensional electron gas embedded in a semimagnetic quantum well:Ground state, spin responses, spin excitations, and Raman spectrum [Text]/ Florent Perez//Phys.Rev. B -- 2009—Vol. 79—045306-22 .
6. Bagraev, N.T. Spin depolarization in quantum wires polarized spontaneously in zero magnetic field [Text]/N. T. Bagraev, I. A. Shelykh, V. K. Ivanov, and L. E. Klyachkin// Phys. Rev. B-- 2004– Vol. 70—P. 155315.
7. Animalu, A.O.E. Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids, / A.O.E. Animalu// Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey –1981—P. 574

8. Orlenko, E. The universal Hamiltonian of the exchange interaction for the system of particles with an arbitrary spin j [Text]/Elena Orlenko// International Journal of Quantum Chemistry –2007—Vol.107—2838-2843.
9. Maris, H.J. Teaching of the renorm-group [Text]/H. J. Maris and Leo P. Kadanoff// American Journal of Physics – 1978- Vol. 46- P.P.652-658.
10. Манаков, С.В. О полной интегрируемости и стохастизации в дискретных динамических системах [Текст]./ С.В. Манаков // ЖЭТФ-1974-Т.67.--С.543-555.
11. Аверкиев, Н. С. Гигантское отрицательное магнетосопротивление в одноосно деформированном антимониде индия, легированного марганцем [Текст] / Н. С. Аверкиев, В. Гай, С.А. Обухов, А.А. Рогачев// Письма в ЖЭТФ—т. 40, вып. 2—С.45-47.

Публикации автора по теме диссертации:

- 1*. Орленко, Ф.Е. Усиление парамагнитных эффектов при спиновом выстраивании в 2-D полупроводниках [Текст]/ Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря , Е.В. Орленко // ЖТФ.—2008.-- Т. 78.—Вып.8.-- С.22-27.**
- 2*. Орленко, Ф.Е. Эффекты понижения размерности при спиновом упорядочении в вырожденном электронном газе [Текст]/ Ф.Е. Орленко, С.И. Челкак, Е.В. Орленко, Г.Г. Зегря //ЖЭТФ.—2010. -- Т.137.—Вып.5.-- С. 919-925.**
- 3*. Orlenko, E. V. Excitations for the one-dimensional $S=1$ pseudo-Heisenberg antiferromagnetic chain [Text] / E. V. Orlenko, F. E. Orlenko, G. G. Zegrya// Natural Science. – 2010.-- Vol. 2.-- No.11. – P. 211155-211159.
- 4*. Орленко, Ф.Е. Переход диэлектрик-металл в немагнитном кристаллическом полупроводнике антимонида индия в магнитном поле [Текст]/ Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря //НТВ. —2011.-- Т. 116.-- №1.-- С.7-11.**
- 5*. Orlenko, E.V. Exchange Perturbation Theory for Multi-Atomic Electron System and its Application to Spin Arrangement in Manganite Chains [Text]/ E.V. Orlenko, T.S. Orlova, F.E. Orlenko, G. G. Zegrya// Advances in Physical Chem.-- 2011.-- Vol.2011.—No.3.—P.868610-868616.
- 6*. Орленко, Ф.Е. Ренорм-групповой анализ основного состояния одномерной антиферромагнитной цепочки локализованных $S=1$ спинов [Текст]/ Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря// НТВ.—2011. -- Т. 122.-- №2. -- С.7-13.**