

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(государственный университет)

Факультет общей и прикладной физики
Кафедра "Проблемы теоретической физики"

Дипломная работа
студента 828 группы Кашубы А. Н.

**Обменное взаимодействие в электронном кристалле, стабилизированном
проводящей подложкой.**

Научный руководитель:
к.ф.м.н. Иосселевич А. С.

Москва
2002

Введение.

Цель данной работы - построить антиферромагнитный Вигнеровский кристалл с гамильтонианом Гейзенберга:

$$\hat{H} = \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

где величины J_{ij} (называемые обменными интегралами) будут положительны и достаточно велики ($\sim 0.001\text{К}$). Гамильтониан Гейзенберга с положительными J легко получается из гамильтониана Хаббарда:

$$\hat{H} = \sum_{ij} I_{ij} (c_{i\uparrow}^+ c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

если рассматривать второй порядок теории возмущений, где возмущением считать переброс электрона с узла на узел. В этой модели обменные интегралы по порядку величины будут равны $J \sim I^2/U$ [6].

Это значит, что кристалл должен удовлетворять следующим условиям:

1. Обменное взаимодействие в кристалле достаточно велико.
2. В данной системе будут превалировать двухчастичные взаимодействия.
3. Энергия локализации электрона будет достаточно большой, для того чтобы кристалл не разрушался.

Обменное взаимодействие удобно вычислять на языке интегралов по траекториям [1,2]. Процесс обмена характеризуется энергией перехода из начального состояния (до обмена) в конечное, отличающееся от начального тем, что некоторые электроны поменялись местами. Можно показать [1], что по порядку величины энергия перехода из состояния $|X_i\rangle$ в $|X_j\rangle$ (X_i и X_j - координаты электронов до и после туннелирования) пропорциональна интегралу по траекториям

$$I_{ij} = \frac{\hbar}{T} \int [DX] e^{iS/\hbar}$$

где T - время движения от X_i до X_j , а S - действие производимое системой вдоль траектории $X(t)$

$$S = \int_0^T \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dX(t)}{dt} \right)^2 - V(X(t)) \right) dt$$

Строгое вычисление интегралов по траекториям - невозможная, за редкими исключениями, работа, однако в квазиклассическом приближении интеграл стремится к

$$\int [DX] e^{iS/\hbar} \approx e^{iS_0/\hbar}$$

где S_0 - действие вдоль квазиклассической траектории

$$S_0 = \int_{X_I}^{X_P} p(X) dX = \int_0^L \sqrt{2m(E - U(X(l)))} dl$$

где L - длина траектории [2]. Когда траектория описывает подбарьерное движение, то уравнения движения лучше записывать в мнимом времени ($t = -i\tau$) - тогда действие становится эвклидовым

$$S = \int_0^T \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dX(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(X(\tau)) \right) d\tau$$

а квазиклассический интеграл по траекториям принимает вид

$$\int [DX] e^{-S/\hbar} \sim e^{-S_0/\hbar}$$

где

$$S_0 = \int_0^L \sqrt{2m|U(X(l)) - E|} dl$$

Электронный кристалл с подложкой.

Вигнеровский кристалл без подложки, в котором электроны взаимодействуют по закону Кулона, и со сплошной проводящей подложкой (диполь-дипольное взаимодействие) условиям сформулированным вначале, не удовлетворяют [1,4]. В таких кристаллах будет всегда превалировать трехчастичное взаимодействие, и кроме этого обменное взаимодействие будет мало [1,4]. Тот факт, что трехчастичное взаимодействие является главным может быть объяснен с помощью интегралов по траекториям. Для простоты будем рассматривать квазиклассическое движение электронов. Потенциальная энергия $V(X)$ обусловлена лишь электрон-электронным взаимодействием. Будем считать, что $E \ll V_0$, где V_0 - характерная энергия взаимодействия между электронами (для системы без подложки $V_0 = \frac{e^2}{D}$, где D - среднее расстояние между электронами, с проводящей подложкой - $V_0 = \frac{e^2 z^2}{D^3}$, где z - расстояние от электрона до подложки). Тогда для N -частичного взаимодействия действие можно оценить как $S \approx MS_1$, где M - количество вовлеченных в процесс обмена электронов - в общем случае $M \geq N$, а $S_1 \sim \sqrt{mV_0 D^2}$ - эффективное действие совершаемое системой при обмене. Для межэлектронных взаимодействий типа $1/r^n$, где n варьировалось от 1 до 12 получалось для $N = 2$ $M \approx 4$, минимальное значение $M \approx 3$ было при $N = 3$ [1].

Однако, если добавить в систему некоторый статический потенциал, который будет иметь ту же симметрию, что и кристалл, и те же характерные размеры, и будет стабилизировать его, то действие примет вид $S \approx NS_0 + \tilde{M}\tilde{S}_1$. Задача состоит в том, чтобы построить потенциал, для которого U_0 стало больше \tilde{V}_0 , т.е. чтобы в системе доминировало бы 2х частичное взаимодействие. Но, с другой стороны, мы также должны существенно понизить вклад в действие, связанный с межэлектронным взаимодействием.

В данной работе рассматривается возможность создания такого потенциала за счет подкладки треугольной симметрии с металлическими островками в узлах, находящейся под слоем гелия. Теперь задача сводится к подбору конфигурации подкладки, при наличии которой Вигнеровский кристалл будет удовлетворять вышеуказанным условиям.

Отдельного рассмотрения заслуживают также величины z и D . В данной работе рассматривается следующая картина: над поверхностью гелия находится электронный газ. На систему электронов накладывается прижимающее электрическое поле перпендикулярное поверхности гелия. В результате электроны находятся в потенциале

$$U(z) = -\frac{e^2}{z + z_0} + eE_{\perp}z$$

при $z > 0$ и ограничены стенкой находящейся в $z = 0$. Среднее расстояние от поверхности гелия на котором будет находиться электрон, можно уменьшать за счет увеличения прижимающего поля, и при больших значениях поля z будет иметь порядок величины $\left(\frac{\hbar^2}{meE_{\perp}}\right)^{1/2}$. Величина же D просто падает с концентрацией электронов как $D \sim n^{-1/3}$. Указанные зависимости ограничивают снизу величины z и D . Дело в том, что при увеличении как прижимающего поля, так и плотности электронного облака, имеет место следующий эффект: поверхностные электроны начинают туннелировать в гелий. В нашем случае они будут туннелировать через гелий прямо на подложку. Судя по экспериментальным результатам, по-видимому надо ограничиться снизу следующими значениями: для D - порядка 1000\AA , а для $z \sim 50 \div 100\text{\AA}$.

Сначала была рассмотрена простейшая модель локализации электронов - размещенная в гелии параллельно поверхности подложка с маленькими островками, например в виде шариков. На островках, которые при рассмотрении движения электронов можно считать точечными, находятся заряды, которые и способствуют локализации электрона. Однако в этом случае можно убедиться, что обменный интеграл оказывается слишком маленьким. Для простоты рассмотрим одноэлектронное туннелирование. Электрон туннелирует сквозь потенциал

$$U(x) = -\frac{eQ}{\sqrt{z^2 + x^2}} - \frac{eQ}{\sqrt{z^2 + (x - D)^2}}$$

где e и Q - заряды электрона и островка соответственно, z - расстояние между плоскостью, в которой двигаются электроны, и плоскостью островков, D - расстояние между электронами (островками). Рассмотрим самый слабый потенциал - когда $Q = e$ (меньше не может быть - эффективный заряд островка невозможно сделать меньше заряда электрона). До туннелирования электрон находится в основном состоянии в яме $\frac{eQ}{\sqrt{z^2 + x^2}}$. Предположим что яма глубокая. Тогда $U' = \frac{eQ}{2z^3}x^2$ и эффективная ширина волновой функции $\tilde{x} = z \left(\frac{\hbar^2}{me^2z}\right)^{1/4}$ (m - масса электрона) при $z \approx 100\text{\AA}$ получим $x \approx 0.28z$ т.е. яма действительно глубокая, частица находится на дне ямы. Исходя из вышесказанного и учитывая что $D \approx 1000\text{\AA}$, мы можем оценить действие, соответствующее туннелированию частицы.

$$S = \int_0^D \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(U(x) + \frac{e^2}{z} \right)} dx \sim \sqrt{\frac{me^2D^2}{\hbar^2 z}} \sim 100$$

Поскольку обменный интеграл зависит от S экспоненциально, то получаем пренебрежимо малое значение.

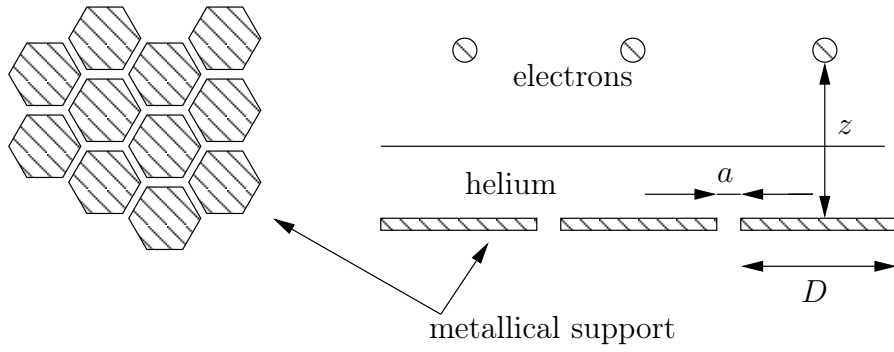


Рис. 1: Вид подкладки

Подкладка с большими шестиугольными островками.

В данной работе предлагается исследовать подкладку с большими островками и маленькими зазорами между ними. Таковую подложку можно сконструировать из шестиугольных пластин лежащих в плоскости, параллельной поверхности гелия (см. рис. 1). Поверхностные электроны находятся над металлическими пластинами, имея там минимум потенциальной энергии, обусловленный полем изображений электронов. Переходу электрона с одной пластины на другую будет препятствовать два фактора: барьер создаваемый щелью между пластинками и электростатическое отталкивание другого электрона, который уже сидит на другой пластинке.

Для начала найдем энергию основного состояния электрона и энергию отталкивания на узле U . В дальнейшем мы будем иметь ввиду случай, когда кинетическая энергия электрона больше, но того же порядка что и потенциальная т.е. $\Pi \sim U_{pot}$, или, что то же самое, $\frac{\hbar^2}{mD^2} \sim \frac{e^2 z^2}{D^3}$. Однако при сравнимых энергиях тяжело производить расчеты, поэтому при необходимости мы будем пользоваться неравенством $\Pi \gg U_{pot}$.

Для упрощения будем рассматривать электрон не в шестиугольной двумерной яме, а в круглой - с радиусом $D/2$. Тогда энергия одного электрона $E = \frac{2\alpha^2 \hbar^2}{mD^2}$, где $\alpha = 2.44$ - первый ноль нулевой функции Бесселя. При нахождении этой энергии в случае $U_{pot} \ll \Pi$, мы можем пренебрегать влиянием остального кристалла, поскольку он добавит слабый потенциал $\Delta U = 12\pi \frac{e^2 z^2}{D^5} r^2$, и тогда поправка к энергии основного состояния будет порядка U_{pot} .

Найдем теперь энергию отталкивания двух электронов находящиеся в одной цилиндрической яме. Когда $U_{pot} \ll \Pi$, это можно сделать с помощью теория возмущений. Полная энергия будет равна $E = 2\Pi + \langle U_{pot} \rangle$. $\langle U_{pot} \rangle$ - среднее значение потенциальной энергии.

$$\langle U_{pot} \rangle = C \left(\frac{z}{D} \right) \frac{e^2 z^2}{D^3}$$

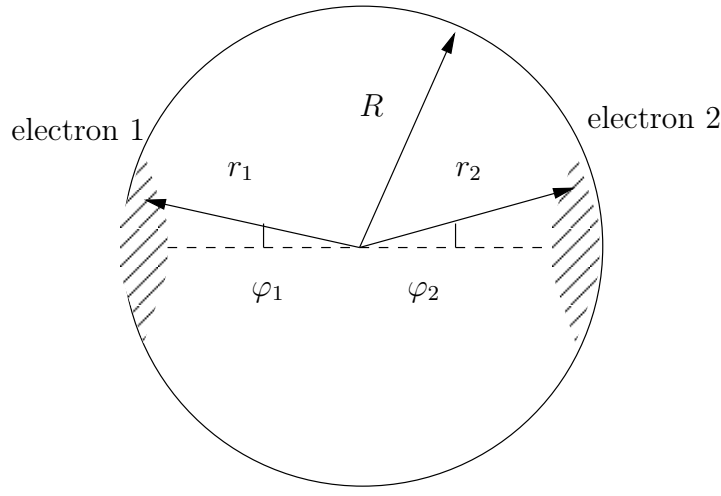


Рис. 2: Цилиндрическая яма с двумя электронами

а

$$C(\alpha) = \frac{4}{\pi^2 \mu^3 \alpha^2 J_1^4(\mu)} \int \int J_0^2(r_1) J_0^2(r_2) \left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} - \frac{1}{\sqrt{|r_1 - r_2|^2 + (4\mu\alpha)^2}} \right) d^2 r_1 d^2 r_2$$

($\mu \approx 2.44$ - первый ноль нулевой функции Бесселя, а интегралы берутся по кругу радиуса μ)

Однако, поскольку в нашей задаче все-таки имеет место неравенство $E \sim \frac{e^2 z^2}{D^3}$, то рассмотрим еще и случай, когда потенциальная энергия много больше кинетической ($\frac{\hbar^2}{mD^2} \ll \frac{e^2 z^2}{D^3}$).

Это приближение приближение даже кажется верным, поскольку при диаметре пластины $D \sim 10^3 \text{ \AA}$, кинетическая энергия имеет порядок $\Pi = \frac{\hbar^2}{mD^2} \sim 0.1K$, а потенциальная - $U_{pot} \approx \frac{e^2 z^2}{D^3} \sim 1.1K$. Тогда условие $\Pi \ll U_{pot}$ выражается в виде $\frac{e^2 z^2}{D^3} \gg \frac{\hbar^2}{mD^2}$. Однако надо отметить, что при более точном подсчете кинетическая энергия имеет тот же порядок, что и потенциальная.

Поэтому воспользуемся моделью, утверждающей что оба электрона локализованы и прижаты к стенкам нашей цилиндрической ямы (см. рис. 2).

Опуская вычисления, получим что минимальная полная энергия системы двух электронов

$$E = U_{pot} \left(1 + 6\phi_0^3 \sqrt{\frac{2\Pi}{3U_{pot}}} + \sqrt{\frac{3\Pi}{U_{pot}}} \right)$$

где $\phi_0 \approx 2.34$ - первый ноль функции Эйри. В результате $E \sim 7.3K$.

Судя по результатам предельных случаев $\Pi \gg U_{pot}$ и $\Pi \ll U_{pot}$ можно сделать утверждение, что энергия отталкивания электронов в узле $U \sim U_{pot} \sim \frac{e^2 z^2}{D^3}$.

Для дальнейшего рассмотрения задачи необходимо сосчитать потенциал создаваемый щелью между шестиугольными пластинками. Для наших целей нам необходимо

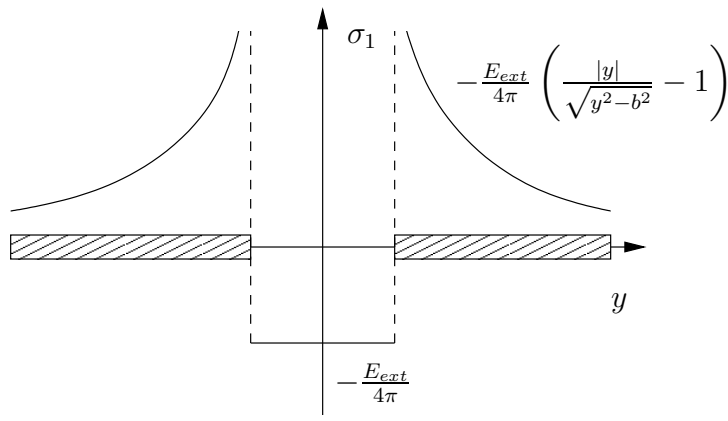


Рис. 3: Добавочный поверхностный заряд около щели

рассматривать случай $D \gg z \gg a$. Для упрощения задачи также примем, что переход электрона через щель происходит вдали от вершин шестиугольника. Тогда у нас возникает задача о потенциальной энергии заряда над плоскостью с щелью, делящей ее на две полуплоскости. Прямой метод решения задачи состоит в нахождении условий экранировки электростатического поля частицы поверхностными зарядами возникающими на плоскости. Однако при таком подходе условия экранировки тангенциальных компонент поля имеют вид нетривиальных интегральных уравнений, которые не поддаются решению. Приведенный ниже метод состоит в том, что применение метода инверсии позволяет свести исходную задачу к задаче о заряде в центре проводящей сферы с кольцевой щелью переменной ширины (см. ниже). Эту задачу можно решить, рассматривая небольшие участки поверхности в окрестности щели. Можно утверждать, что на этих небольших, почти плоских участках мы имеем такое же распределение зарядов, как и в задаче о проводящей плоскости и однородным электрическом полем перпендикулярном ей. Это утверждение основано на том, что ширина щели слабо меняется вдоль нее самой, и радиус кривизны щели много больше ее ширины.

Электростатическая задача.

1. Рассмотрение плоской задачи.

Рассмотрим плоскость со щелью шириной $2b$, которая экранирует внешнее электрическое поле E_{ext} наложенное сверху. В случае отсутствия щели на всей пластине равномерно распределился бы заряд с поверхностной плотностью $\sigma_0 = \frac{E_{ext}}{4\pi}$ [5]. В случае щели поверхностный заряд будет равен

$$\sigma_{\Sigma} = \frac{E_{ext}}{4\pi} \frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}}$$

Этот заряд можно представить в виде $\sigma = \sigma_0 + \sigma_1$, где σ_1 изображено на рис. 3.

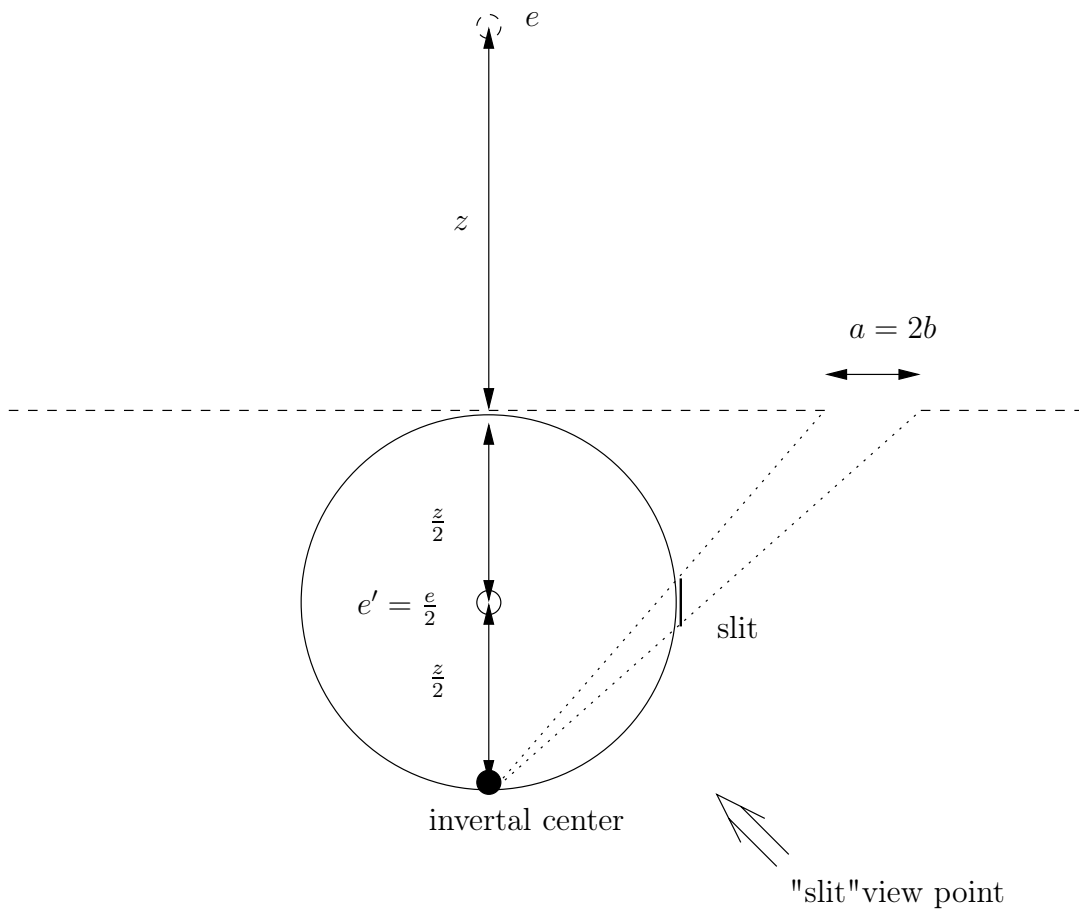


Рис. 4: Схема применения метода инверсии

На самом деле распределение зарядов будет иметь вид

$$\sigma_{\pm} = \frac{E_{ext}}{8\pi} \left(\frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}} \pm 1 \right)$$

где σ_{\pm} - заряд на верхней и на нижней стороне пластины соответственно. Но поскольку на электрон действует сумма зарядов сверху и снизу ($\sigma_+ + \sigma_-$), то ответ будет такой как написано выше.

2. Инверсия.

Метод инверсии для решения электростатических задач в следующей последовательности действий:

1. Выбираем удобную для нас сферическую систему координат,
2. θ и φ оставляем те же, и делаем замену $r = \frac{a^2}{r'}$ (a выбираем сами),

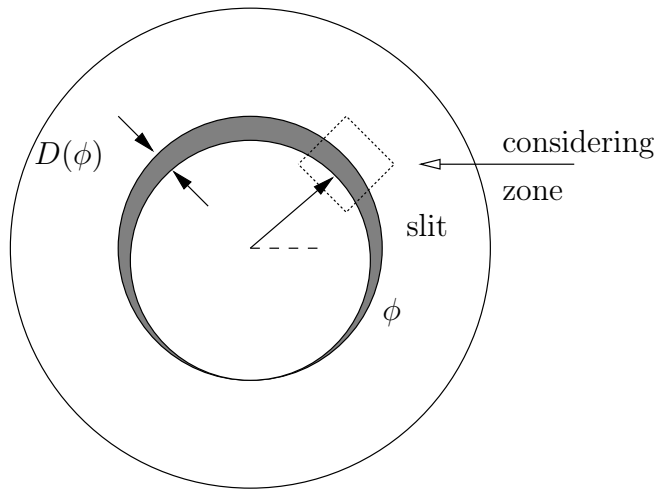


Рис. 5: Вид щели в инвертированной задаче

3. согласно нашему преобразованию перемещаем все наши объекты исходной задачи придерживаясь правила что если заряд переместился из точки r в точку r' , то его величина изменится и станет равной $e' = \frac{a}{r_e} e$,

4. решаем новую электростатическую задачу, получаем зависимость потенциала от координат - $\varphi'(r')$,

5. получаем потенциал в исходной задаче по формуле $\varphi(r) = \frac{a}{r} \varphi'(\frac{a^2}{r})$.

Произведя данные операции как показано на рисунке 4, мы получим следующую задачу: заряд в центре проводящего шара со щелью переменной ширины (см. рис 5). Щель имеет вид кольца с радиусом

$$R = \frac{1}{2} \frac{z^2}{\sqrt{x^2 + z^2}}$$

и шириной

$$D(\phi) = \frac{az^2}{x^2 + z^2} (1 + \cos \phi)$$

где $a = 2b$ - ширина щели в изначальной задаче (эти формулы легко получаются из элементарных геометрических построений). Найдём потенциал, создаваемый единицей длины щели в центре сферы

Выражение для потенциала

$$\varphi' = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma_1(y)}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy = \frac{E_{ext}}{4\pi} \left(2 \int_b^{+\infty} \frac{\frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}} - 1}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy - \int_{-b}^b \frac{1}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy \right)$$

Учитывая что $\int_b^c \frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2} \sqrt{y^2 + z^2/4}} dy = \ln \left(\sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{c^2 + z^2/4} \right) - \ln \sqrt{b^2 + z^2/4}$ и $\int_0^c \frac{1}{\sqrt{y^2 + z^2/4}} dy = \ln \left(c + \sqrt{c^2 + z^2/4} \right) - \ln z/2$, получим

$$\varphi' = \frac{E}{4\pi} \ln \left(1 + \frac{D^2(\phi)}{z^2} \right)$$

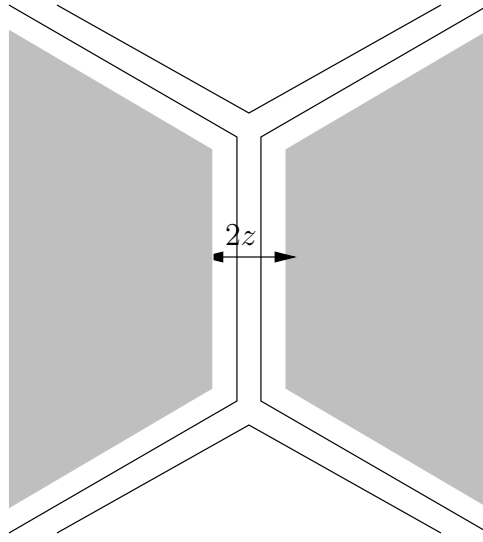


Рис. 6: Распределение электронов на пластинке

Найдем теперь потенциальную энергию заряда

Учитываем соотношения $\varphi = \varphi'/2$, $U = e\varphi/2$ и интегрируем по кольцу-щели:

$$\begin{aligned}
 U(x) &= \frac{e}{4} \int_0^{2\pi} \varphi'(\phi) R d\phi = \frac{e}{4} \frac{4e}{z^2} \frac{z^2}{8\pi \sqrt{x^2 + z^2}} \int_0^{2\pi} \ln\left(1 + \frac{a^2 z^2}{(x^2 + y^2)^2} (1 + \cos \phi)^2\right) d\phi \approx \\
 &\approx \frac{e}{4} \frac{4e}{8\pi \sqrt{x^2 + z^2}} \frac{z^2}{8\pi \sqrt{x^2 + z^2}} \int_0^{2\pi} \frac{a^2 z^2}{(x^2 + y^2)^2} (1 + \cos \phi)^2 d\phi = \\
 &= \frac{e^2}{8\pi} \frac{a^2 z^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}} \int_0^{2\pi} (1 + \cos \phi)^2 d\phi = \frac{3}{8} \frac{e^2 z^2 a^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}}
 \end{aligned} \tag{1}$$

Итак, конечный ответ:

$$U(x) = \frac{3}{8} \frac{e^2 z^2 a^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}}$$

Результаты.

Рассмотрим теперь собственно процесс обмена двух электронов. Электрон туннелирует на соседнюю пластинку, причем пара электронов находится вместе на одной пластинке время порядка \hbar/U_{pot} , а потом другой электрон туннелирует на пустую пластинку. Такой процесс как раз и соответствует второму порядку теории возмущений.

Вернемся к вкладу в действие, создаваемому за счет межэлектронного взаимодействия. Как было сказано выше, для получения достаточно больших значений обменного интеграла нам необходимо понизить этот вклад. Это можно сделать за счет подбора таких значений a , z и D , чтобы имели место неравенства $\Pi \sim \frac{e^2 z^2}{D^3}$, и $\frac{e^2 a^2}{z^3} \gg \frac{e^2 z^2}{D^3}$. При выполнении этих неравенств электрон будет делокализован по всей пластинке, и туннелирование будет происходить только через барьер создаваемый в основном щелью, а не

межэлектронным взаимодействием, который имеет ширину порядка z . Таким образом можно пренебречь межэлектронным взаимодействием.

Необходимо также сделать одно важное замечание. Принципиальное различие между моделью со статическим потенциалом и без него состоит в том, что в первом случае можно уменьшить роль межэлектронного взаимодействия, и получить, соответственно достаточно большой обменный интеграл. Когда статического потенциала нет, то кристалл стабилизируется только за счет сильного межэлектронного взаимодействия. Конечно, и в этом случае можно уменьшить e - e взаимодействие до значений дающих нам достаточно большие обменные интегралы, но при таком слабом взаимодействии кристалл превратится в жидкость.

Итак, мы можем рассмотреть одноэлектронное туннелирование через щелевой барьер. Поскольку потенциал щели спадает очень быстро (как $1/x^5$), то при подсчете подбарьерного действия мы можем распространить интегрирование на весь промежуток $[-\infty, +\infty]$.

Для действие $S = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{2mU(x)/\hbar^2} dx$ получаем:

$$S = \left(\sqrt{3} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{5/2}} \right) \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}} = 1.15 \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}}$$

Теперь осталось подсчитать значение обменного интеграла. Характерное время подбарьерного движения электрона $T \sim mD^2/\hbar$, поэтому

$$I \approx \frac{\hbar^2}{mD^2} \exp\left(-1.15 \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}}\right)$$

Поскольку $J \approx I^2/U$, то

$$J \approx \frac{\hbar^2}{m^2 e^2 z^2 D} \exp\left(-2.3 \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}}\right)$$

Ширину щели будем изменять в пределах от 20 до 80Å, а расстояние от подложки до электрона - в пределах 80 ÷ 200Å. Значения обменного интеграла (величины J) приведены на графике 7.

Заключение.

Итак, мы показали, что за счет использования металлической подложки, состоящей из отдельных металлических пластинок, образующих треугольную решетку, можно добиться существенного увеличения обменного интеграла Гейзенберговского взаимодействия между электронами, локализованными над поверхностью гелия, по сравнению со случаем Вигнеровского кристалла. Максимального эффекта, по видимому, можно добиться при следующем выборе параметров: размер пластинок $D \sim 2000\text{Å}$, зазор между соседними пластинками $a \sim 20\text{Å}$, расстояние от электронов до подложки $z \sim 200\text{Å}$. Нужно, однако, отметить что даже в оптимальных условиях, величина обменного интеграла оказывается весьма малой: $\sim 1mK$, что требует чрезвычайно низких температур для исследования соответствующих магнитных эффектов.

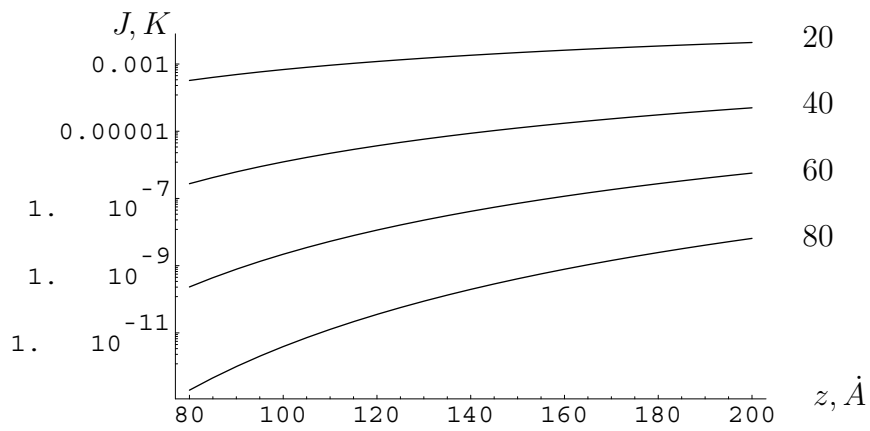


Рис. 7: Зависимость обменного интеграла для значений $a = 20, 40, 60, 80 \text{ \AA}$

Список литературы.

- [1] M. Roger, et al., Phys. Rev. B **30**, 6432 (1984).
- [2] R. P. Feynmann and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [3] R. P. Feynmann, *Statistical Mechanics* (Institute of Technology, California, 1972).
- [4] V. Bernu, L.Candido, D. M. Ceperley, cond-mat/0008062.
- [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц, *Электродинамика сплошных сред* (Москва, 1982)
- [6] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism* (McGraw-Hill, 1970)