

# Неупорядоченный квантовый антиферромагнетизм в легированных полупроводниках. Метод плотности состояний.

Павел Петров

Bogoslovskiy, N. A., Petrov, P. V., Averkiev, N. S. “Disordered quantum antiferromagnetism in doped semiconductors: Density of states approach”, Physical Review B, 112(11), 115203 (2025)  
<https://arxiv.org/abs/2412.07305>

Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев, “Метод плотности состояний для расчёта магнитных свойств квантовой спиновой цепочки”, Физика Твёрдого Тела (принято к печати)

## Мотивация — примесная $\chi$ компенсированных полупроводников

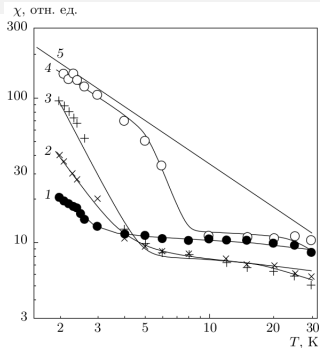


Рис. 1. Поведение магнитной восприимчивости образцов Ge:As с различной компенсацией: кривая 1 — 0; 2 — 0.28; 3 — 0.56; 4 — 0.67; 5 —  $\chi \propto 1/T$  (закон Кюри)

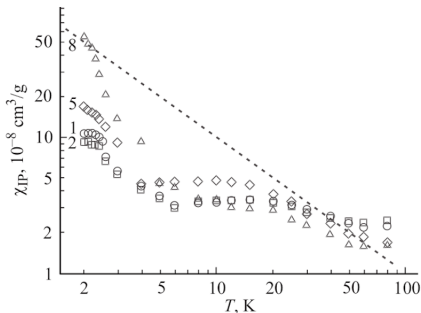


Рис. 1. Температурные зависимости парамагнитной восприимчивости репрезентативных образцов Ge:As 1, 2, 5, 8 из измерений ЭПР. Прямая — закон Кюри.

Вейнгер А.И., Забродский А.Г., Макарова Т.Л., Тиснек Т.В., Голощапов С.И., Семенихин П.В. ЖЭТФ, Том 143, Вып. 5, стр. 918, 2013 г.

Вейнгер А.И., Забродский А.Г., Макарова Т.Л., Тиснек Т.В., Голощапов С.И., Семенихин П.В. ФТП, 49(10), 1339-45, 2015 г.

## $\chi$ одного спина. Закон Кюри

Среднее значение величины с плотностью вероятности  $f(x)$

$$\bar{x} = \int x f(x) dx$$

Средний магнитный момент квантовой спиновой системы

$$\overline{M}(T, B) = \frac{\sum_j M_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)}$$

Для одного спина: есть два состояния с энергией  $E_{1,2} = 0$  и  $M_{1,2} = \pm\mu$

$$\overline{M}(T, B) = \frac{\mu e^{\mu B/kT} - \mu e^{-\mu B/kT}}{e^{\mu B/kT} + e^{-\mu B/kT}} = \mu \frac{\sinh \mu B/kT}{\cosh \mu B/kT} = \mu \tanh \frac{\mu B}{kT}$$

При малых  $B$  и больших  $T$

$$\overline{M}(T, B) = \mu \tanh \frac{\mu B}{kT} \approx \mu \frac{\mu B}{kT} \longrightarrow \chi = \frac{dM}{dB} = \frac{\mu^2}{kT}$$

## χ ДВУХ СПИНОВ

Гамильтониан Гейзенберга

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - g\mu B \sum_i \hat{S}_{zi}$$

Волновые функции базиса

$$\Psi_i = |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$$

Матричные элементы гамильтониана

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle$$

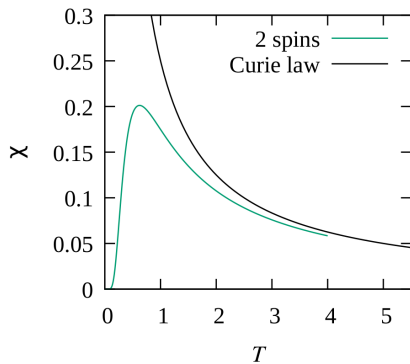
Матрица гамильтониана

$$H = J \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}$$

Собственные значения энергии

синглет  $E_1 = -3/4J$ ;  $M = 0$

триплет  $E_{2,3,4} = 1/4J$ ;  $M = \pm 1, 0$



$$\overline{M}(T, B) = \frac{\sum_j M_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)}$$

$$\chi = \frac{d\overline{M}}{dB} \approx \frac{\Delta \overline{M}}{\Delta B} = \frac{\overline{M}(\Delta B) - \overline{M}(-\Delta B)}{2\Delta B}$$

## Зависимость $J$ от расстояния между атомами для молекулы $H_2$

$$J(r) = -J_0 \left(\frac{r}{a}\right)^{5/2} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

Л. П. Горьков, Л. П. Питаевский, "Энергия расщепления термов молекулы водорода", Докл. АН СССР, 151:4, 822-825, (1963)  
 C. Herring and M. Flicker, Asymptotic exchange coupling of two hydrogen atoms, Phys. Rev. 134, A362 (1964).

completely insignificant. In table 3 we also list the asymptotic exchange energies,  $K_{as}$ , calculated from the formula of Herring and Flicker [6]

$$K_{as} = 0.821 \times R^{5/2} \exp(-2R). \quad (7)$$

Even in the vicinity of the minimum, the values of  $K_{as}$  are seen to be fairly reliable.

Table 3  
 Energy of two ground-state hydrogen atoms<sup>a)</sup>

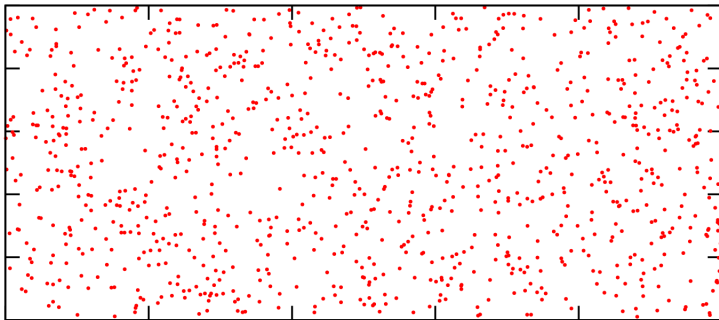
|     | ${}^3E_{\text{exch}}$ | $K_{as}$ |
|-----|-----------------------|----------|
| 5   | 112.6                 | 97.63    |
| 10  | 3.87                  | 3.671    |
| 10  | 0.118                 | 0.117    |
| 156 | 0.0035                | 0.0034   |

Kolos, W., and L. Wolniewicz. "Variational calculation of the long-range interaction between two ground-state hydrogen atoms." Chemical Physics Letters 24.4 457-460 (1974)

## Постановка задачи

Рассчитать магнитную восприимчивость системы случайно расположенных водородоподобных примесей, энергия взаимодействия между которыми зависит от расстояния как  $J(r)$  как функцию от концентрации примесей, магнитного поля и температуры  $\chi(na^3, B, T)$ .

$$J(r) = -J_0 \left( \frac{r}{a} \right)^{5/2} \exp \left( -\frac{2r}{a} \right)$$



## Что было сделано до нас? Синглетная фаза, закон $\chi \sim T^{-\alpha}$

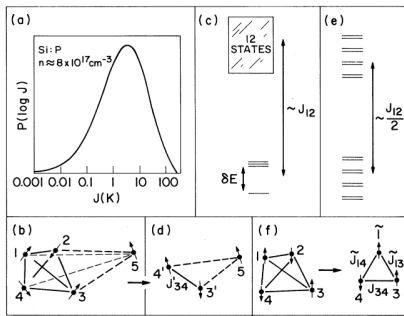


FIG. 1. (a) The distribution of nearest-neighbor couplings in Si:P at a typical concentration. Note the logarithmic scale along the horizontal axis. (b) A four-spin cluster with a neighbor, 5. (c) Eigenstates of the Heisenberg four-spin cluster for  $J_{12} \gg |J_{ij}|$  ( $i, j \neq 1, 2$ ). (d) Equivalent Heisenberg pair (3', 4') (with renormalized couplings to neighbor 5 in second scheme). (e) Ei-

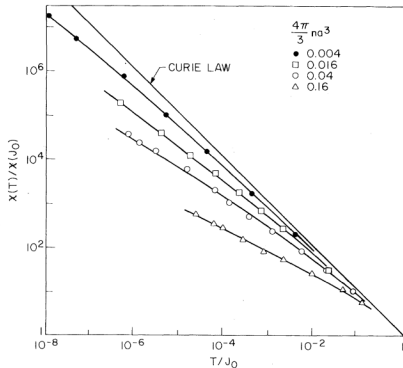


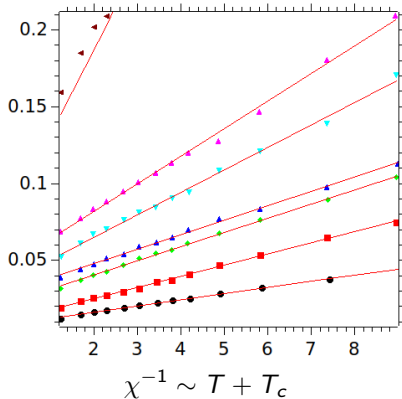
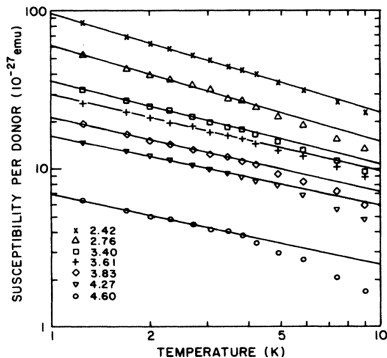
FIG. 3. Magnetic susceptibility of the spatially random 3D Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$  system with exponential exchange for various concentrations,  $n$ .

$$\chi \sim \frac{1}{T^\alpha}, \quad \alpha(na^3) < 1$$

Bhatt, R. N., and P. A. Lee. "Scaling studies of highly disordered spin-1/2 antiferromagnetic systems." *Physical Review Letters* 48.5 : 344 (1982)



## Что хотим изучить мы? Закон $\chi \sim (T + T_c)^{-1}$



Roy, A. and Sarachik, M.P., Susceptibility of Si: P across the metal-insulator transition. II. Evidence for local moments in the metallic phase.

Physical Review B, 37(10), p.5531, (1988)

Schlager, H.G. and Löhneysen, H.V., Susceptibility of local magnetic moments in phosphorus-doped silicon near the metal-insulator transition. Europhysics Letters, 40(6), p.661, (1997)

## Как исследовать? Метод плотности состояний

Среднее значение величины с плотностью вероятности  $f(x)$

$$\bar{x} = \int x f(x) dx$$

$$\bar{M}(T, B) = \frac{\sum_j M_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{E_j - M_j B}{T}\right)} \Rightarrow \bar{M}(T, B) = \iint M f(E, M, T, B) dE dM$$

$$f(E, M, T, B) = \frac{1}{Z(T, B)} g(E, M) \exp\left(-\frac{E - MB}{kT}\right)$$

$$Z(T, B) = \iint g(E, M) \exp\left(-\frac{E - MB}{T}\right) dE dM$$

$g(E, M)$  — есть число состояний с конкретными значениями  $E$  и  $M$ , выраженное как непрерывная функция  $E$  и  $M$ .

Знаем плотность состояний  $g(E, M) \Rightarrow$  можем посчитать  $\bar{M}, \chi, \bar{E}, C \dots$

## Исторический обзор

W. Heisenberg, Zur theorie des ferromagnetismus, Z.Angew.Phys. 49, 619 (1928)  
The Theory Of Electric And Magnetic Susceptibilities by J. H. Van Vleck, Oxford, The Clarendon Press (1932)

Zhou, C., Schulthess, T.C., Torbrügge, S. and Landau, D.P., Wang-Landau algorithm for continuous models and joint density of states. Physical review letters, 96(12), p.120201 (2006)

B. Kryzhanovsky, L. Litinskii, and V. Egorov, Analytical expressions for Ising models on high dimensional lattices, Entropy 23, 1665 (2021)

N. Bogoslovskiy, P. Petrov, and N. Averkiev, Analytical and numerical calculations of the magnetic properties of a system of disordered spins in the Ising model, St. Petersburg State Polytech. Univ. J. Phys. Math. 16, 193 (2023)

N. Bogoslovskiy, P. Petrov, and N. Averkiev, Phase diagram of a ferromagnetic semiconductor: Origin of superparamagnetism, Phys. Rev. B 109, 024436 (2024)

Bogoslovskiy, N. A., Petrov, P. V., Averkiev, N. S. "Disordered quantum antiferromagnetism in doped semiconductors: Density of states approach", Physical Review B, 112(11), 115203 (2025)

Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев, "Метод плотности состояний для расчёта магнитных свойств квантовой спиновой цепочки", Физика Твёрдого Тела (принято к печати)

## Построение $g(E, M)$ . Центральная предельная теорема

$$g(E, M) = g(M) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left( -\frac{(E - \bar{E}(M))^2}{2\sigma^2(M)} \right)$$

Пусть из  $N$  спинов системы  $q$  направлено вверх,  $N - q$  — вниз.  
Тогда  $M = \frac{1}{2}g\mu(2q - N)$ ,  $g$  —  $g$ -фактор электрона

$$g(M) = C_q^N \implies g_q(E) = C_q^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left( -\frac{(E - \bar{E}_q)^2}{2\sigma_q^2} \right)$$

$$C_q^N \approx 2^N \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \exp \left( -\frac{(N - 2q)^2}{2N} \right)$$

$$g_q(E) = \frac{2^N}{\sqrt{N\pi}\sigma} \exp \left( -\frac{(N - 2q)^2}{2N} - \frac{(E - \bar{E}_q)^2}{2\sigma_q^2} \right)$$

## Средняя энергия $\bar{E}$ как функция магнитного момента $m$

Магнитный момент на один спин  $m = \frac{N-2q}{N} = \frac{2M}{g\mu N} \in [-1, 1]$

$$\bar{E}(m) = \frac{N}{2} \overline{J_1 \hat{S}_i \hat{S}_j} = \frac{N}{2} \overline{J_1 \hat{S}_i \hat{S}_j}$$

$$\overline{J_1} = \int_0^\infty nJ(r)4\pi r^2 dr = \frac{945\pi}{2^8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_0 n a^3$$

Всего есть  $\frac{1}{2}N(N-1)$  парных взаимодействий между спинами.  $\frac{1}{2}q(q-1)$  имеют суммарный момент  $+1$ , а  $\frac{1}{2}(N-q)(N-q-1)$  — момент  $-1$ . Каждое из этих взаимодействий даёт вклад в суммарную энергию  $+1/4$ . Оставшиеся  $(N-q)q$  пар имеют момент  $0$ , а их вклад в энергию поровну делится на состояния  $+1/4$  и  $-3/4$ .

$$\overline{\hat{S}_i \hat{S}_j} = \frac{1}{4} \frac{q(q-1) + (N-q)(N-q-1) - 2q(N-q)}{N(N-1)} = \frac{1}{4} \left( m^2 + O\left(\frac{1}{N}\right) \right)$$

$$\bar{E}(m) = \frac{N}{2} \overline{J_1 \hat{S}_i \hat{S}_j} = \frac{1}{8} N \overline{J_1} \left( m^2 + O\left(\frac{1}{N}\right) \right) \approx \frac{1}{8} N \overline{J_1} m^2$$

## Дисперсия $\sigma^2$ как функция магнитного момента $m$

$$\sigma^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{4} \overline{\sum_{\substack{i,j \\ k,m}} J_{ij} J_{kl} \hat{S}_i \hat{S}_j \hat{S}_k \hat{S}_l} - \frac{1}{2} \overline{\sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j} \frac{1}{2} \overline{\sum_{k,l} J_{kl} \hat{S}_k \hat{S}_l}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{4} \overline{\sum_{\substack{i,j \\ k,l}} J_{ij} J_{kl} \hat{S}_i \hat{S}_j \hat{S}_k \hat{S}_l} - \frac{1}{2} \overline{\sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j} \frac{1}{2} \overline{\sum_{k,l} J_{kl} \hat{S}_k \hat{S}_l}$$

$$\overline{J_{ij}^2} = \frac{3J_0^2 a^3}{R^3 2^{16}} \int_0^\infty \left(\frac{4r}{a}\right)^7 \exp\left(-\frac{4r}{a}\right) d\left(\frac{4r}{a}\right) = \frac{3 \cdot 7! J_0^2 a^3}{2^{16} R^3}$$

$$\overline{\sum_j J_{ij}^2} = n \frac{4}{3} \pi R^3 \overline{J_{ij}^2} = \frac{7! \pi J_0^2 n a^3}{2^{14}}$$

$$\sigma^2 = N \sigma_1^2 \left(1 - \frac{2}{3} m^2 - \frac{1}{3} m^4\right) \quad \sigma_1^2 = \frac{3 \cdot 7!}{2^{19}} \pi J_0^2 n a^3$$

## Проверка формул для средней энергии $\bar{E}(m)$ и дисперсии $\sigma^2(m)$

Гамильтониан Гейзенберга для  $N = 2-16$  спинов

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{S}_i \hat{S}_j - g\mu B \sum_i \hat{S}_{zi}$$

$2^N$  базисных волновых функций вида  $\Psi_i = |\uparrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow \dots \downarrow\downarrow\rangle$

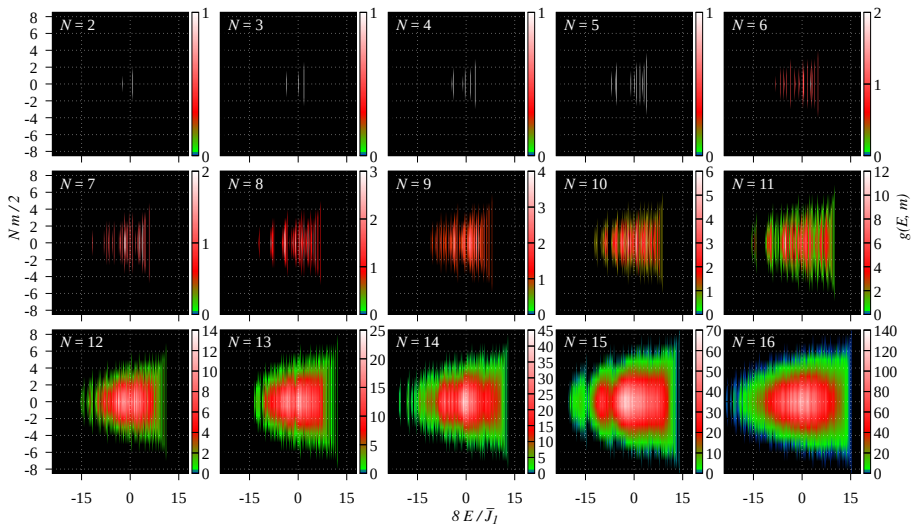
Матрица гамильтониана  $2^N \times 2^N$  с элементами  $H_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle$

Полученную матрицу численно диагонализуем используя возможности параллельных вычислений на GPU на платформе CUDA. Так как эта операция требует значительных машинных ресурсов, для усреднения по реализациям беспорядка использовался следующий подход.

Вначале генерировалось  $10^6$  систем 2–16 спинов и вычислялись первые 4 момента набора односпиновых энергий  $J_i = 1/N \sum_{i \neq j} J_{ij}$ .

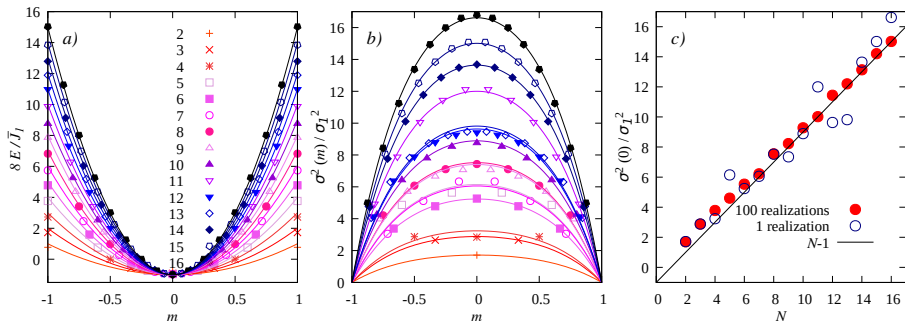
После чего рассматривались только такие реализации, которые имели моменты, отличающиеся от средних не более чем на 5%.

## Плотность состояний $g(E, M)$ для систем из случайно расположенных 2–16 спинов





## Численно рассчитанные средняя энергия $\bar{E}(m)$ и дисперсия $\sigma^2(m)$



$$\bar{E}(m) = \frac{1}{8} N \bar{J}_1 \left( m^2 + O\left(\frac{1}{N}\right) \right); \quad \bar{J}_1 = \frac{945\pi}{2^8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_0 n a^3$$

$$\sigma^2 = N \sigma_1^2 \left( 1 - \frac{2}{3} m^2 - \frac{1}{3} m^4 \right) \quad \sigma_1^2 = \frac{3 \cdot 7!}{2^{19}} \pi J_0^2 n a^3$$

## Переход от дискретного магнитного момента к непрерывному

$$g_q(E) = \frac{2^N}{\sqrt{N}\pi\sigma} \exp\left(-\frac{(N-2q)^2}{2N} - \frac{(E - \overline{E}_q)^2}{2\sigma_q^2}\right)$$

Безразмерные энергия и дисперсия  $e = \frac{E}{NJ_1}$ ,  $s_1 = \frac{\sigma_1}{J_1}$

Рассматриваем случай  $m \ll 1$ , пренебрегаем слагаемыми порядка  $m^4$ .

Тогда плотность состояний имеет вид:

$$g(e, m) = \frac{2^N}{\pi s_1 \sqrt{1 - \frac{2}{3}m^2}} \times \exp\left(-\frac{Nm^2}{2} - \frac{N(e - \frac{1}{8}m^2)^2}{2s_1^2(1 - \frac{2}{3}m^2)}\right)$$

## Расчёт магнитной восприимчивости, $\beta \ll 1$

$$\overline{M}(T, B) = \iint M f(E, M, T, B) dE dM$$

$$f(E, M, T, B) = \frac{1}{Z(T, B)} g(E, M) \exp\left(-\frac{E - MB}{kT}\right)$$

$$Z(T, B) = \iint g(E, M) \exp\left(-\frac{E - MB}{T}\right) dE dM$$

Безразмерные  $T$  и  $B \Rightarrow t = kT/\overline{J_1}$ ;  $\beta = g\mu B/2\overline{J_1}$

$$P(t, \beta) = \iint mg(e, m) \exp\left(-\frac{e - mB}{t}\right) dt dm$$

$$Z(t, \beta) = \iint g(e, m) \exp\left(-\frac{e - mB}{t}\right) dt dm; \Rightarrow \overline{M} = \frac{g\mu N}{2} \frac{P}{Z}$$

## Расчёт магнитной восприимчивости, закон Кюри-Вейсса

$$g(e, m) = \frac{2^N}{\pi s_1 \sqrt{1 - \frac{2}{3}m^2}} \times \exp \left( -\frac{Nm^2}{2} - \frac{N(e - \frac{1}{8}m^2)^2}{2s_1^2(1 - \frac{2}{3}m^2)} \right)$$

$$P(t, \beta) = \iint mg(e, m) \exp \left( -\frac{e - mB}{t} \right) dt dm$$

$$Z(t, \beta) = \iint g(e, m) \exp \left( -\frac{e - mB}{t} \right) dt dm; \implies \overline{M} = \frac{g\mu N}{2} \frac{P}{Z}$$

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial \overline{M}}{\partial B} = \frac{g^2 \mu^2 n}{4\overline{J}_1} \frac{\partial \overline{m}}{\partial \beta} = \frac{g^2 \mu^2 n}{4\overline{J}_1} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial P}{\partial \beta} - \frac{P}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)$$

$$\chi = \frac{g^2 \mu^2 n}{4\overline{J}_1(t + \frac{1}{4} + \frac{2s_1^2}{3t})}; \implies \frac{1}{\chi} = \frac{4kT + \overline{J}_1}{g^2 \mu^2 n} + \frac{8\sigma_1^2}{3g^2 \mu^2 nkT}$$

$$\sigma_1^2/\overline{J}_1^2 \ll 1; \quad kT > \overline{J}_1; \implies \frac{1}{\chi} = \frac{4k(T + T_c)}{g^2 \mu^2 n}; \quad T_c = \overline{J}_1/4k$$

## Проверка 2: квантовая цепочка спинов

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_i J_0 \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} - g\mu B \sum_i \hat{S}_{zi}$$

Средняя энергия

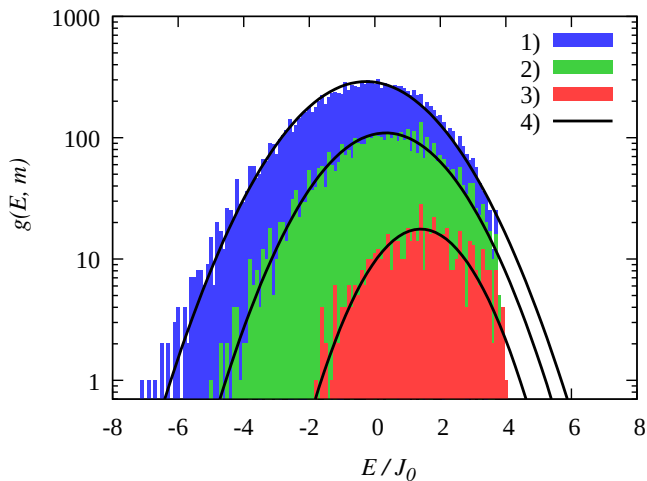
$$\bar{E} = \frac{1}{4} N J_0 \left( m^2 + \frac{m^2}{N} - \frac{1}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right)$$

Дисперсия

$$\sigma^2 = \overline{E^2} - \bar{E}^2 = \frac{1}{16} N J_0^2 \left( 3 - 4m^2 + m^4 + \frac{2 - 6m^2 + 4m^4}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right)$$

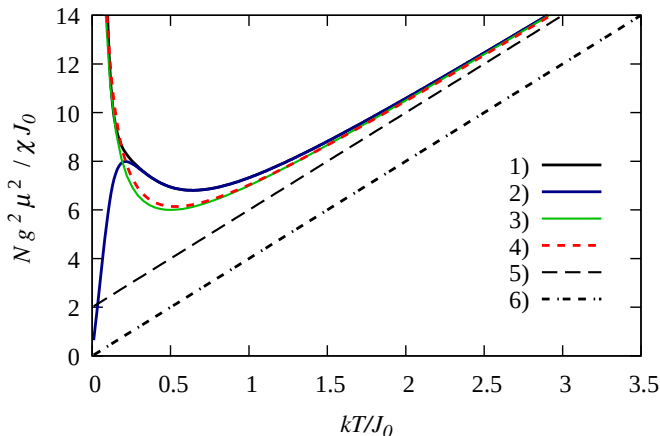
Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев, “Метод плотности состояний для расчёта магнитных свойств квантовой спиновой цепочки”, Физика Твёрдого Тела (принято к печати)

## Плотность состояний $g(E, M)$ для цепочки из 16 спинов



$g(E)$  для  $m = 0$ ;  $m = 3/8$ ;  $m = 5/8$

## Магнитная восприимчивость $\chi$ для цепочки из 16 спинов



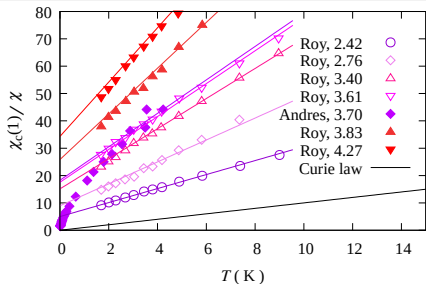
Средний магнитный момент

$$\overline{m}(t, \beta) = \frac{4\beta t}{4t^2 + 2t + 1}$$

Магнитная восприимчивость

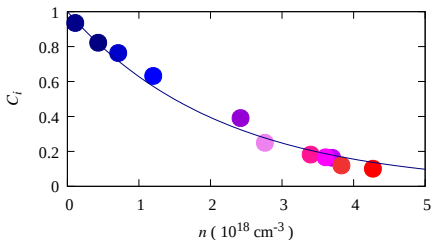
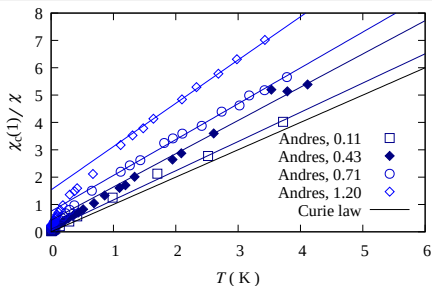
$$\frac{1}{\chi} = \frac{4kT + 2J_0}{g^2 \mu^2 N} + \frac{J_0^2}{g^2 \mu^2 N k T}$$

## Сравнение с экспериментом: $\chi$ в малых полях



$$\frac{\chi_c(1)}{\chi(T)} = \frac{T + T_{exp} n_0}{C_i}$$

$\chi_c(1)$  — восприимчивость Кюри при температуре 1 K,  $T_{exp}$  — температура  $T_c$  при  $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_0$  — безразмерная концентрация равная  $n/10^{18}$ ,  $C_i$  — доля электронов перешедших из фазы изолятора в металлическую фазу





## Случай сильных полей

Другое приближенное выражение для биномиального коэффициента

$$C_{\frac{N(1-m)}{2}}^N = \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \frac{1}{\sqrt{1-m^2}} \exp(Np(m))$$

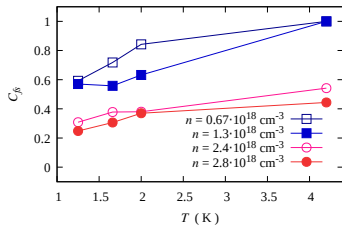
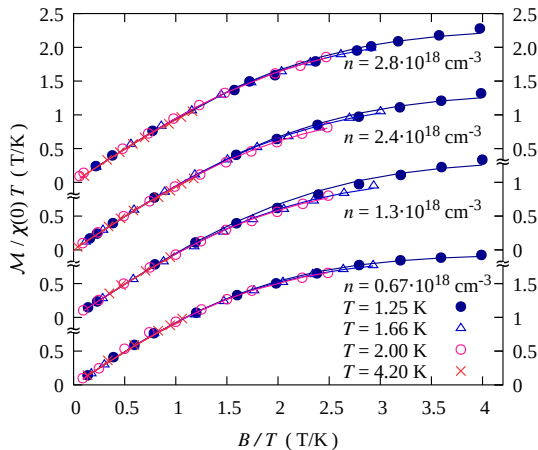
$$p(m) = \ln 2 - \frac{1-m}{2} \ln(1-m) - \frac{1+m}{2} \ln(1+m)$$

$$Z(t, \beta) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int \frac{dm}{\sqrt{1-m^2}} \exp \left( N \left( p(m) + \frac{s_1^2(3-2m^2-m^4)}{6t^2} - \frac{m^2}{8t} + \frac{\beta m}{t} \right) \right)$$

Чтобы найти  $m$ , необходимо численно решить трансцендентное уравнение

$$-\frac{2s_1^2 m_0}{3t^2} - \frac{2s_1^2 m_0^3}{3t^2} - \frac{m_0}{4t} + \frac{\beta}{t} + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1-m_0}{1+m_0} \right) = 0$$

## Сравнение с экспериментом: намагниченность в сильных полях



$C_{fs}$  — доля свободных спинов, то есть спинов не соединившихся в синглеты

$$C_{fs} n_0 \left( -\frac{2s_{18}^2 m_0}{3t^2} - \frac{2s_{18}^2 m_0^3}{3t^2} - \frac{m_0}{4t} \frac{T_{exp}}{T_{N18}} \right) + \frac{\beta}{t} + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - m_0}{1 + m_0} \right) = 0$$

- Методом плотности состояний исследованы магнитные свойства системы водородоподобных примесей с учётом обменного взаимодействия между ними
- Получены аналитические формулы для вычисления магнитной восприимчивости в малых полях и температурах  $T > J$ , а так же выражения для намагниченности в сильных полях
- Посредством сравнения с экспериментальными данными получена зависимость доли локализованных электронов в полупроводнике при концентрациях близких к переходу металл-диэлектрик