

метод дискуссии. Вместе с этим, опираясь на результаты работ [13, 14], можно предположить, что в температурной области, соответствующей максимуму внутреннего трения в диспрозии (260—320 К), происходит термоактивированный отрыв дислокаций от точечных центров закрепления.

Таким образом, анализ литературы и полученные экспериментальные данные указывают на то, что максимумы на кривых $Q^{-1}(T)$ в области комнатных температур имеют дислокационную природу. Необходимо отметить, что в работе [7] данные максимумы в сплавах тербия с диспрозием и эрбием наблюдались практически при одних и тех же температурах, что фактически также косвенно подтверждает их немагнитную природу. Однако, на взгляд авторов, это не противоречит высказанному в [3] предположению о наличии в ПМ-области температур магнитных кластеров.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Шермергор Т. Д. // Релаксационные явления в твердых телах. М., 1968. С. 31. [2] Шубин В. В. // Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1986. [3] Катаев Г. И., Кортов С. В., Саттаров М. Р., Тишин А. М. // Тез. докл. II Всесоюз. семин. «Магнитные фазовые переходы и критические явления». Махачкала, 1989. С. 125. [4] Левитин Р. З. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1962. [5] Белов К. П., Левитин Р. З., Малевская Л. А., Соколов В. И. // ФММ. 1969. 17, № 4. С. 617. [6] Willis F., Ali N. // J. Appl. Phys. 1991. 69. P. 5694. [7] Саттаров М. Р. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1989. [8] Белов К. П., Левитин Р. З., Никитин С. А. // УФН. 1964. 82. С. 449. [9] Rosen M. // Phys. Rev. 1968. 174, N 2. P. 504. [10] Постников В. С. Внутреннее трение в металлах. М., 1974. [11] Новик А., Берри Б. Релаксационные явления в кристаллах. М., 1975. [12] Никифоров С. П., Кардашев Б. К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М., 1985. [13] Сойфер Я. М., Штейнберг В. Г. // ФММ. 1970. 29, № 6. С. 1274. [14] Золотухин И. В., Бармин Ю. В. Стабильность и процессы релаксации в металлических стеклах. М., 1991.

Поступила в редакцию
27.03.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1993. Т. 34. № 2

УДК 537.311.3:539.216.2.001

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В АНОМАЛЬНОМ ЭФФЕКТЕ ХОЛЛА

А. В. Ведяев, Н. Г. Карачанская, О. А. Котельникова, Н. В. Рыжанова
(кафедра магнетизма)

Для металлических пленок в рамках приближения когерентного потенциала при использовании формализма Кубо исследован размерный эффект в аномальном эффекте Холла (АЭХ). Рассчитан классический размерный эффект в АЭХ тонких ферромагнитных пленок при низких температурах. Разработана методика расчета кинетических явлений в пленках произвольной толщины, не накладывающая ограничений на параметры примесного рассеяния в объеме и на поверхности пленок.

В предыдущей работе [1] нами был развит подход, позволяющий описать размерный эффект в электросопротивлении металлических пленок в приближении когерентного потенциала (ПКП) с использованием формализма Кубо. Было показано, что в квазиклассическом пределе при слабом рассеянии электронов проводимости результаты расчета совпадают с полученными ранее с помощью более традиционных методов [2], которые используют решение классического уравнения Больцмана для функции распределения электронов, подчиняющейся

специфическому граничному условию, сформулированному Фуксом [3] и подробно исследованному другими авторами [2, 4, 5]. Особую актуальность новый подход приобретает при рассмотрении явлений, требующих выхода за рамки борновского приближения, таких как аномальный эффект Холла (АЭХ), магнитооптические эффекты Фарадея и Керра и т. д. В этом случае, как нам представляется, формализм Кубо предпочтительнее, чем громоздкая итерационная процедура для уравнения Больцмана [6], и он имеет более широкий спектр применений.

В настоящей работе в рамках предложенной нами методики рассчитывается классический размерный эффект в АЭХ тонких ферромагнитных пленок при низких температурах. В такой постановке задача интересна не только чисто теоретически, но и с точки зрения различных технологических применений (имеется в виду возможность обобщения предложенной методики на исследование многослойных тонкопленочных структур, в которых наблюдается гигантский магниторезистивный эффект).

Методика расчета

Изложим кратко методику расчета, которая подробно описана в [1], при следующей постановке задачи: исследуемая зависимость недиагональной компоненты тензора электропроводности σ_{xy} металлической тонкой пленки с одной «идеальной» и одной «грязной» поверхностями от ее толщины D и температуры T при $T \ll \Theta$ (где Θ — температура Дебая), соответствующая рассеянию на статических неоднородностях, обусловленных хаотическим распределением атомов различных сортов в пленке (примесей), рассматривается в ПКП, а электрон-фононное взаимодействие, ответственное за температурную зависимость σ_{xy} , считается слабым. Как показано в [1], расчет удобно проводить в x - z представлении, явно учитывающем зависимость различных величин от координаты z , определяющей положение точки относительно поверхности пленки. Бесконечно высокие потенциальные барьеры находятся в точках $z=0$ и $z=D$, «грязная» же поверхность сдвинута относительно барьера на расстояние $z_0 = av_0$, где a — постоянная решетки, v_0 — целое число порядка единицы.

Отправной точкой расчета является эффективная в смысле ПКП функция Грина пленки $\tilde{G}_x(z, z'; E)$ (энергетический параметр E в дальнейшем будем опускать, если это не приводит к недоразумению):

$$\tilde{G}_x(z, z') = G_x(z, z') + \Delta G_x(z, z'), \quad (1)$$

$$\Delta G_x(z, z') = G_x(z, z_0) \frac{\Sigma(E)}{1 - \Sigma(E)} G_x(z_0, z'), \quad (2)$$

$$G_x^\pm(z, z') = G_x(z, z'; E \pm i0) = \frac{2a}{D} \sum_k \frac{\sin kz \cdot \sin kz'}{E - E_p - \eta \pm i\gamma}. \quad (3)$$

В (1) — (3) $p = (x, k)$, где x — параллельная, а k — перпендикулярная поверхности компоненты волнового вектора, E_p — дисперсионная функция электронов проводимости, η и γ — действительная и мнимая части когерентного потенциала объемных «примесей», $\Sigma(E)$ — комплексный когерентный потенциал поверхностных «примесей». Существование, что в пленке компонента k является квантованной и принимает значения $k_n = (\pi/D)n$, $n=1, 2, 3, \dots$

Как и при расчете электросопротивления [1], когерентные потенциалы объемных и поверхностных «примесей» зависят только от изотропной части рассеяния электронов проводимости, анизотропная же часть, связанная со спин-орбитальным взаимодействием (СОВ) и ответственная за АЭХ, считается малой и может быть учтена по теории возмущений. В κ - z представлении гамильтониан СОВ H^{so} имеет вид

$$H^{so}(z) = i\lambda^{so} \frac{a^2}{N} \frac{M}{M} \sum_{pp'\mu} \exp\{i(\kappa - \kappa', \rho_n)\} v(n, z) \times \\ \times \sin kz \cdot \sin k'z [\kappa \times \kappa'] a_p^+ a_{p'} \delta(z - z_\mu), \quad (4)$$

где для двухкомпонентной системы AB

$$v(n, z_\mu) = a_A(n, \mu) c_B^\mu - a_B(n, \mu) c_A^\mu, \quad (5)$$

$$a_\alpha(n, \mu) = \begin{cases} 1, & \text{если узел } (n, \mu) \text{ занят атомом сорта } \alpha \ (\alpha = A, B), \\ 0 & \text{— в противоположном случае,} \end{cases}$$

c_α^μ — концентрация компоненты α на плоскости $z_\mu = a\mu$, N — число атомов в основной области кристалла, (ρ_n, z_μ) — радиус-вектор n -го узла на плоскости z_μ , M/M — единичный вектор в направлении вектора намагниченности M пленки, которая в стандартной для АЭХ геометрии считается направленной по оси z , λ^{so} — параметр СОВ.

АЭХ является линейным по СОВ эффектом, поэтому найдем линейные по H^{so} поправки к функции Грина и другим, связанным с ней, величинам:

$$G^{so} = \tilde{G} + \tilde{G} H^{so} \tilde{G}. \quad (6)$$

С помощью G^{so} может быть найдена антисимметричная часть тензора электропроводности σ_{xy} , которая для пленки может быть вычислена по формуле Кубо в κ - z представлении:

$$\sigma_{xy} = \frac{2\hbar e^2}{\pi S^2 a^2 D} \iiint_0^D dz dz' dz_1 dz_2 \left\{ \sum_{\kappa\kappa'} v_\kappa^x v_{\kappa'}^y \tilde{G}_\kappa^+(z, z_1) \times \right. \\ \left. \times \tilde{G}_{\kappa'}^+(z_1, z') \tilde{G}_{\kappa'}^-(z', z_2) \tilde{G}_\kappa^-(z_2, z) \langle H_{\kappa\kappa'}^{so}(z_1) T_{\kappa'\kappa}(z_2) \rangle \right\}_{E=E_F}, \quad (7)$$

где S — площадь поверхности пленки, $v_\kappa^{x,y}$ — x , y -компоненты скорости, $T_{\kappa\kappa'}(z)$ — матричный элемент введенного в [1] оператора T -матрицы изотропного рассеяния на «примесях»:

$$T_{\kappa\kappa'}(z) = \sum_{kk'\mu} \exp\{i(\kappa - \kappa', \rho_n)\} \frac{\omega_\mu v(n, z) - \Sigma(E)}{1 - (\omega_\mu v(n, z) - \Sigma(E)) F(z, z)} \times \\ \times \sin kz \cdot \sin k'z \cdot \delta(z - z_\mu); \quad (8)$$

здесь ω_μ — амплитуда рассеивающего потенциала «примесей», величина которой зависит от того, совпадает ли z_μ с приповерхностным z_0 или лежит в объеме пленки,

$$F_\kappa(z, z) = \sum_x \tilde{G}_\kappa(z, z). \quad (9)$$

Угловые скобки в (7) означают усреднение по всем возможным распределениям атомов компонент. Заметим, что это усреднение удобно провести после выполнения интегрирования по z_1 и z_2 , при этом получим сумму

$$\sum_{nn'\mu\nu} \exp\{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}', \boldsymbol{\rho}_n-\boldsymbol{\rho}_{n'})\} \left\langle v(n, z_\nu) \frac{w_\nu(n', z_\nu) - \Sigma(E)}{1 - (w_\nu v(n', z_\nu) - \Sigma(E))F(z_\nu, z_\nu)} \right\rangle,$$

которая при абсолютно хаотическом распределении в пренебрежении корреляцией в заполнении разных узлов отлична от нуля только при $n=n', \mu=\nu$. Учитывая это обстоятельство, выделим в (7) два вклада, один из которых, σ_{xy}^V , обусловлен асимметрией рассеяния электронов проводимости в объеме пленки, а другой, σ_{xy}^s на ее поверхности. В результате получим

$$\sigma_{xy}^{V,s} = \frac{\lambda_{so}^{V,s} \hbar e^2 a^3}{2\pi S^2 D^2} \int_0^D \int_0^D dz dz' \left\{ \sum_{\mathbf{x}\mathbf{x}'\mu} (v_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{x})(v_{\mathbf{x}'} \cdot \mathbf{x}') |\tilde{G}_{\mathbf{x}}(z, z_\mu)|^2 |\tilde{G}_{\mathbf{x}'}(z_\mu, z')|^2 \times \right. \\ \left. \times c_A^{V,s} c_B^{V,s} \cdot \text{Im} \left[\frac{c_B w - \Sigma^+}{1 - (c_B w - \Sigma^+) F(z_\mu, z_\mu)} + \frac{c_A w + \Sigma^+}{1 + (c_A w + \Sigma^+) F(z_\mu, z_\mu)} \right]_{V,s} \right\}_{E=E_F}, \quad (10)$$

где для σ_{xy}^s $z_\mu = z_0$, а для σ_{xy}^V индекс μ нумерует все плоскости внутри объема пленки. Коэффициент АЭХ пленки $R_s(D)$ может быть найден по формуле

$$R_s(D) = \frac{\sigma_{xy}^V + \sigma_{xy}^s}{4\pi M \overline{\sigma_{xx}(z)}^2}, \quad (11)$$

где диагональная часть тензора проводимости $\overline{\sigma_{xx}(z)}$ вычислена в [1, 2] и равна

$$\overline{\sigma_{xx}(z)} = \frac{3}{2} \sigma_0 \int_0^1 du (1-u^2) \left\{ 1 - A(u) \frac{2l_0}{D} \frac{1 - \exp\{-2D/l_0 u\}}{(1+A(u))^2 - (1-A(u))^2 \exp\{-2D/l_0 u\}} \right\}. \quad (12)$$

Здесь σ_0 — проводимость безграничного образца, l_0 — длина свободного пробега при $T=0$, $A(u)$ — интенсивность поверхностного рассеяния:

$$A(u) = \frac{2am \sin^2(z_0 p_F u) \cdot \text{Im} \Sigma^+}{\hbar^2 p_F u}, \quad (13)$$

m — масса электрона, p_F — модуль его фермиевского волнового вектора, черта сверху означает усреднение по толщине пленки. В соответствии с (10) остаточный коэффициент АЭХ $R_{so}(D)$ разбивается на сумму двух вкладов, $R_{so}^V(D)$ и $R_{so}^s(D)$. Наиболее просто интерпретировать $R_{so}^V(D)$. Сравнение (10) с формулами [1] показывает, что каждая из сумм по \mathbf{x}, \mathbf{x}' пропорциональна $\sigma_{xx}(z_\mu)$, поэтому можно записать

$$R_{so}^V(D) = R_s^V \overline{\sigma_{xx}(z)} / [\overline{\sigma_{xx}(z)}]^2, \quad (14)$$

где R_{so}^V — остаточный коэффициент АЭХ безграничного образца.

В пределе слабого рассеяния для двухкомпонентного сплава можно выписать явную зависимость R_{so}^V от основных параметров [7]:

$$R_{so}^V \sim c_{AC}^V c_{CB}^V (c_A^V - c_B^V) \lambda_{so}^V (\omega^V)^2 M^{-1}. \quad (15)$$

Более подробно остановимся на вычислении σ_{xx}^s , которое сводится к выполнению суммирования по κ , κ' и последующему интегрированию по z , z' . Учитывая явный вид $\tilde{G}(z, z')$ (1), найдем величину

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{S} \int_0^D dz \sum_{\kappa} \kappa^2 |\tilde{G}(z, z_0; E_F)|^2 = \\ &= (4a^2/DS) \cdot \sum_{\kappa} \kappa^2 \left| \frac{1}{1 - \Sigma^+ G^+(z_0, z_0)} \right|^2 \sum_k \frac{\sin^2(z_0 k)}{(E_F - E_{\kappa, k})^2 + \gamma^2}. \end{aligned} \quad (16)$$

При суммировании по дискретным k воспользуемся формулой Пуассона [8]:

$$\sum_n f\left(\frac{\pi}{D} n\right) = \frac{D}{\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \exp\{2iDnk\}, \quad (17)$$

что при квадратичном законе дисперсии электронов приводит к следующему результату:

$$B = \frac{4am}{S\hbar^2} \sum_{\kappa} \frac{\sin^2(z_0 c)}{dc^2} \left| \frac{1}{1 - \Sigma^+ G^+(z_0, z_0)} \right| \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-2nDd\} \cos(2Dnc) \right] \quad (18)$$

где c и d определяются соотношениями

$$c^2 - d^2 = p_F^2 - \kappa^2, \quad cd = m\gamma(E_F)/\hbar^2. \quad (19)$$

Пренебрегая быстроосциллирующими слагаемыми, которые после суммирования по κ дают вклады порядка $(Dp_F)^{-1}$, являющиеся малыми в условиях классического размерного эффекта, получим

$$B = \frac{\hbar e^2 p_F^3}{8\pi^2 m^3} \sigma_s, \quad (20)$$

где

$$\sigma_s = \frac{3}{2} \sigma_0 \int du u^2 (1-u^2) \frac{1 - \exp\{-2D/l_0 u\}}{(1+A(u))^2 - (1-A(u))^2 - \exp\{-2D/l_0 u\}}. \quad (21)$$

Таким образом, вклад от асимметрии поверхностного рассеяния в АЭХ может быть записан в виде

$$R_{so}^s(D) = R_{so}^s \frac{\sigma_s (\sigma_0 - \sigma_{xx}(z))}{\sigma_{xx}(z)^2}, \quad (22)$$

где R_{so}^s — остаточный коэффициент АЭХ гипотетического безграничного образца, характер и распределение «примесей» в котором такие же, как и на «грязной» поверхности. Например, для двухкомпонентной системы в пределе слабого рассеяния

$$R_{so}^s \propto c_A^s c_B^s (c_A^s - c_B^s) \lambda_{so}^s (\omega^s)^2 M^{-1}. \quad (23)$$

В формулы (14) и (22) могут быть введены низкотемпературные поправки, вызванные электрон-фононным взаимодействием, которое можно считать слабым по сравнению с E_F и рассматривать как возмущение. Расчет в данной постановке задачи облегчает то обстоятельство, что в «грязных» системах при низких температурах наиболее эффективными оказываются так называемые некогерентные процессы рассеяния электронов на фононах, при которых не сохраняется квазиимпульс, поэтому такие процессы приводят к его быстрой релаксации. «Вершинные» поправки в формуле Кубо от таких процессов обращаются в нуль, а температурная зависимость σ_{xx} и σ_{xy} входит только через затухание электронов $\gamma(T)$. Для вычисления затухания при конечных температурах разложим функцию Грина по электрон-фононному взаимодействию до первого не исчезающего после усреднения по фоновым переменным члена:

$$G_{\text{eff}} = \bar{G} + \bar{G}V_{\text{eff}}\bar{G} + \bar{G}V_{\text{eff}}\bar{G}V_{\text{eff}}\bar{G} + \dots, \quad (24)$$

$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n, p, p', q} \exp\{i(p - p' - q, r_n)\} v(n) b_q^+ Q_{pp'q} a_p^+ a_{p'} + \text{э. с.}, \quad (25)$$

b_q^+ — оператор рождения фонона с волновым вектором q , $Q_{pp'q}$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия:

$$Q_{pp'q} = \frac{(p - p', q)}{q V q} \omega_v \varepsilon \alpha^{-1/2}. \quad (26)$$

Здесь ε — безразмерный параметр, характеризующий относительное смещение атомов. Подставляя (25) в (24) и усредняя по фоновым переменным и по «примесям», получим температурно-зависящую поправку γ_{ph} к затуханию электронов:

$$\gamma_{\text{ph}} = \beta c_{A^c B} (T/T_D)^2, \quad (27)$$

где β — некоторый коэффициент с размерностью энергии, содержащий $(\omega_v)^2$, плотность электронных состояний, ε^2 и другие параметры.

Заменяя затем во всех величинах, входящих в (14) и (22), γ на $\gamma(T) = \gamma_0 + \gamma_{\text{ph}}$ и вводя длину свободного пробега $l_T = \hbar^2 p_F / [2\gamma(T)m]$ при $T \neq 0$, получим температурную зависимость коэффициентов $R_s^v(D)$ и $R_s^s(D)$. Конечно, явный вид этой зависимости от параметров достаточно сложный, можно сказать лишь, что он сводится к квадратичным по (T/T_D) добавкам.

Обсуждение результатов

Сравнение двух подходов [1] и [2] показывает, что их результаты для коэффициента АЭХ в пределе слабого рассеяния совпадают, так же как и при расчете электросопротивления, с той лишь оговоркой, что в [6] концентрация примесей считается малой, поэтому в концентрационных зависимостях и коэффициента АЭХ, и электросопротивления удерживается только линейный по концентрации член. В формулах (14) и (22) взят более общий случай произвольной концентрации компонент, поэтому вид концентрационной зависимости R_s более сложный. Как видно из (15), (23), оба вклада ведут себя немонотонно и могут менять знак в области средних концентраций. В достаточно реалистической ситуации, когда примесей в объеме намного меньше, чем на поверхности, и в условиях сильного размерного эффекта, возможно из-

менение величины и знака эффекта, вызванное изменением поверхностных свойств пленки. Относительно температурных добавок можно только сказать, что они могут быть любого знака, так как входят и в числитель и в знаменатель формул (14) и (22).

Предложенный нами подход имеет более широкий спектр применений, поскольку в сочетании с численными методами расчета позволяет отказаться от ряда ограничений, присущих традиционному квазиклассическому подходу — малости рассеивающего потенциала, концентрации, квадратичности спектра. Кроме того, как видно из (18), в формуле (10) присутствуют и квантовые поправки, обусловленные осциллирующими членами, т. е. в предложенной схеме может быть рассмотрен и квантовый размерный эффект Холла, в том числе и с выходом за рамки ПКП в духе [9].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Рыжанова Н. В., Устинов В. В., Ведяев А. В., Котельникова О. А. // ФММ. 1992. № 3. С. 38. [2] Lucas M. S. P. // J. Appl. Phys. 1965. 36, № 5. P. 1632. [3] Fuchs K. // Proc. Camb. Phil. Soc. 1938. 31. N 1. P. 100. [4] Окулов В. И., Устинов В. В. // Физ. низ. температур. 1975. 5, № 3. С. 213. [5] Фальковский Л. А. // ЖЭТФ. 1973. 14. С. 1855. [6] Kogan E. H., Ustinov V. V. // Solid. State. Comm. 1982. 43, N 10. P. 743. [7] Волошинский А. И., Коваленко А. Д. // ФММ. 1970. 31. С. 13. [8] Маделунг Э. Математический аппарат физики. М., 1968. [9] Altshuler B. L., Aronov A. G., Khmel'nitskii D. E., Larkin A. J. Coherent effects in disordered conductors. М., 1982.

Поступила в редакцию
30.03.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1993. Т. 34, № 2

УДК 539.19.3

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДИМЕРАХ ПРОПИЛОКСИЦИАНОБИФЕНИЛА

П. В. Шибаев, М. Б. Гусева, Б. М. Костишко

(кафедра физической электроники)

Сравнительное изучение межмолекулярных взаимодействий в димере пропилоксицианобифенила проводилось методами модифицированной теории возмущений Рэлея—Шрёдингера (МРШ) и атом-атомных потенциалов (ААП). Обнаружено, что антипараллельная ориентация молекул энергетически более выгодна. Максимальное значение энергетической щели между параллельной и антипараллельной ориентациями составляет 5,7 и 2,9 ккал/моль для расчетов в рамках теории МРШ и ААП соответственно.

Введение

В последнее время расчеты энергии взаимодействия между молекулами жидких кристаллов стали предметом многих теоретических исследований [1—3]. Особый интерес представляют методы, позволяющие изучать анизотропию межмолекулярного взаимодействия в реальных системах. В зависимости от физических идей, лежащих в основе расчета межмолекулярного потенциала, большинство этих методов можно отнести к одной из двух следующих категорий:

— методы, основанные на применении полуэмпирических атом-атомных потенциалов (ААП). Этот подход позволяет вычислять в основном дисперсионную составляющую межмолекулярного взаимодей-