Литература

1. *Novik V.K., Gavrilova N.D.* // Ferroelectrics. 1981. **34**. P. 4755.
2. *Лайнс М., Гласс А.* Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М., 1981.
3. *Верховская К.А.* Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М. (Ин-т кристаллографии РАН), 1995.
4. *Верховская К.А., Бунэ А.В.* // ФТТ. 1991. **33**. С. 1659.
5. *Valdes-Aguilera O., Neckers D.C.* // Acc. Chem. Res. 1989. **22**. P. 171.
6. *Фролова Т.Б.* Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1997.
7. *Furukawa T., Johnson G.E.* // J. Appl. Phys. 1981. **22**, No. 2. P. 940.
8. *Ситникова Н.Л., Малышкина И.А., Гаврилова Н.Д.* и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1998. № 2. С. 38 (Moscow University Phys. Bull. 1998. No. 2).
9. *Большакова Н.Н., Гаврилова Н.Д., Малышкина И.А.* и др. // Кристаллография. 1998. **43**, № 6. С. 1124.
10. *Jonscher A.K.* Dielectric Relaxation in Solids. L.: Chelsea Dielectric Press, 1983.
11. *Deng Z.G., Mauritz K.A.* // Macromolecules. 1992. **25**, No. 6. P. 2369.
12. *Лущейкин Г.А.* Полимерные пьезоэлектрики. М.: Химия, 1990.

Поступила в редакцию
06.07.98

УДК 537.6: 538.935: 538.975

ВЛИЯНИЕ s-d-РАССЕЯНИЯ НА КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛОВ

А. В. Ведяев, О. А. Котельникова, Н. Г. Пугач

(*кафедра магнетизма*)

Рассчитана проводимость тонкой металлической пленки в рамках формализма Кубо с использованием метода функций Грина для s-d-обменной модели. При этом учитывается зависимость амплитуды рассеяния электронов проводимости от толщины пленки, возникающая в результате квантового размерного эффекта, и вероятность рассеяния s-электронов в расщепленную d-зону. Показано, что проводимость описывается осциллирующей функцией толщины пленки с периодами, соответствующими ферми-импульсам d-электронов.

В тонких металлических пленках, толщина которых сравнима с постоянной решетки, движение электронов в одном из направлений ограничено. При этом возникают так называемые состояния в квантовой яме (quantum well states) [1], приводящие к дискретизации энергетических уровней и как следствие к квантовым размерным эффектам, хорошо исследованным теоретически и обнаруженным экспериментально [2, 3]. Вычисления электропроводности тонких пленок в однозонной модели квазисвободных электронов [4–6] показали, что учет этих эффектов приводит к зависимости коэффициентов переноса от толщины пленки осциллирующего типа с периодом, обратно пропорциональным импульсу Ферми. Квантовый размерный эффект наблюдался при измерении сопротивления тонких металлических пленок [7, 8].

Ранее был разработан последовательный квантовостатистический подход к расчету проводимости низкоразмерных систем, опирающийся на формализм Кубо и аппарат функций Грина [9, 10]. В настоящей работе этот метод развивается далее, причем учитывается не только рассеяние s-электронов на примесях и дефектах кристаллической решетки, но и возможность их рассеяния в d-зону в переходных металлах, поскольку наличие ямы сказывается на распределении плотности состояний как s-, так и d-электронов, причем последняя в свою очередь определяет вероятность s-d-рассеяния.

Модель

Для учета s-d-рассеяния будем использовать двухзонную модель с гамильтонианом

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_s(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle_s\langle\mathbf{k}|_s + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_d(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle_d\langle\mathbf{k}|_d + \\ + \sum_{\mathbf{k}} \lambda(|\mathbf{k}\rangle_s\langle\mathbf{k}|_d + |\mathbf{k}\rangle_d\langle\mathbf{k}|_s),$$

где $\varepsilon_{s,d}(\mathbf{k})$ — кинетические энергии s- и d-электронов соответственно, $|\mathbf{k}\rangle$ и $\langle\mathbf{k}|$ — кет- и бра-векторы состояний с квазиимпульсом $\mathbf{k}$, а λ — константа гибридизации.

Рассмотрим тонкую пленку толщины D. Ось Oz направим перпендикулярно плоскости пленки. Квазиимпульс электронов $\mathbf{k}$ имеет параллельную ($\varkappa$) и перпендикулярную (k) к плоскости пленки компоненты. Как известно, квазиимпульс электронов в квантовой яме, образованной потенциальными барьерами на границах пленки, квантуется в направлении Oz:

$$k = \frac{\pi n}{D}, \quad n = 1, 2, \ldots .$$

Тогда опережающая (G^+) и запаздывающая (G^-) функции Грина d-электронов в смешанном $\varkappa$-z-представлении [8] будут иметь вид

$$\widehat{G}^{\alpha\pm}_{\varkappa}(z,z';\varepsilon) = \frac{2m_d a_0}{\hbar^2 k^{d\pm}_{\alpha}} \frac{\sin(k^{d\pm}_{\alpha} z')\sin(k^{d\pm}_{\alpha}(z-D))}{\sin(k^{d\pm}_{\alpha} D)}$$

при $z > z'$. Здесь

$$k^{d\pm}_{\alpha} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_d(\varepsilon \pm i\gamma^d_{\alpha}) - \varkappa^2\hbar^2} \qquad (1)$$

— компонента квазиимпульса d-электронов в направлении Oz, m_d — эффективная масса, a_0 — постоянная решетки, ε — энергетическая переменная, z и z' — координаты точек на оси Oz, индекс α обозначает направление проекции спина на ось намагниченности образца ($\alpha = \uparrow$ или $\downarrow$); коэффициент затухания d-электронов $\gamma^d_{\alpha} = \operatorname{Im}\Sigma^d_{\alpha}$, где Σ^d_{α} — собственно энергетическая часть; при этом величина $\operatorname{Re}\Sigma^d_{\alpha}$ может быть включена в энергетическую переменную ε с помощью перенормировки спектра.

Предположим, что d-зона расщеплена по направлению проекции спина, т. е. импульсы Ферми d-электронов $k^{\uparrow}_{Fd} \neq k^{\downarrow}_{Fd}$.

Плотность состояний d-электронов выражается через их гриновские функции по известной формуле, которая в $\varkappa$-z-представлении имеет вид

$$\rho^d_{\alpha}(z,\varepsilon) = \frac{a_0^2}{4\pi^3}\operatorname{Im}\int G^{\alpha-}_{\varkappa}(z,z;\varepsilon)\,d\varkappa.$$

Будем считать, что основной вклад в проводимость вносит движение s-электронов, но вероятность их рассеяния в d-зону пропорциональна плотности состояний d-электронов. Тогда коэффициент затухания для состояния электронов s-зоны можно записать в виде

$$\gamma^s_{\alpha}(z) = \frac{\hbar^2 k_{Fs}}{m l^{\alpha}_s}\frac{\rho^d_{\alpha}(z,\varepsilon_F)}{\rho^d_{\alpha 0}}, \qquad (2)$$

где $\rho^d_{\alpha 0}$ и l^{α}_s — соответственно плотность состояний на уровне Ферми d-электронов и длина свободного пробега s-электронов для рассматриваемой модели без учета размерных эффектов, k_{Fs} — импульс Ферми s-электрона, m — его эффективная масса.

Графики зависимости коэффициента затухания электронных состояний $\gamma^s_{\alpha}(z)$ от координаты z представлены на рис. 1,*а*, а зависимость усредненной по координате величины $\overline{\gamma}^s_{\alpha}(D) = \frac{1}{D}\int\limits_0^D \gamma^s_{\alpha}(z)\,dz$ от толщины пленки D — на рис. 1,*б*.

Таким образом, для движения s-электронов получен спин-зависящий потенциал, который изменяется от точки к точке внутри пленки и является функцией толщины.

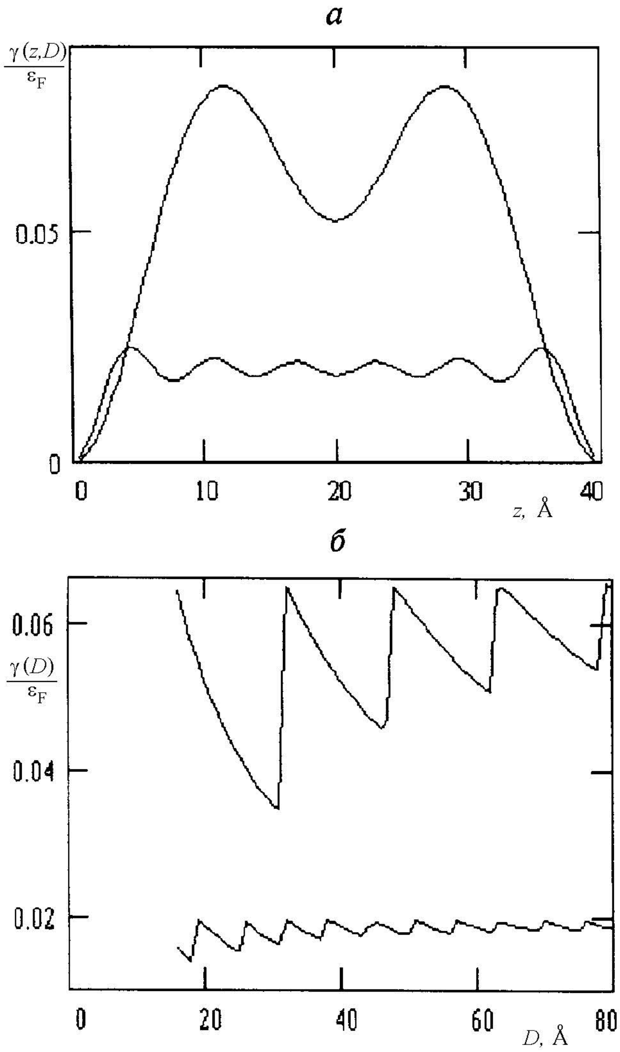

Рис. 1. Зависимость коэффициента затухания состояний s-электронов (отнесенного к их энергии Ферми) при рассеянии в d-зону от координаты рассеивающего центра в пленке толщиной $D = 40$ Å (*а*) и зависимость этого коэффициента, усредненного по координате, от толщины пленки D (*б*): магнитный момент электрона параллелен намагниченности ($k^{\uparrow}_{Fd} = 0{,}5$ Å^{-1}) — нижние кривые и антипараллелен намагниченности ($k^{\downarrow}_{Fd} = 0{,}2$ Å^{-1}) — верхние; для s-зоны $k_{Fs} = 1$ Å^{-1}, $l^{\uparrow}_s = 100$ Å, $l^{\downarrow}_s = 30$ Å

Функции Грина для s-зоны в присутствии этого спин-зависящего потенциала рассчитывались методом ВКБ и при $z > z'$ имели вид

$$G^{WKB\pm}_{\varkappa\alpha}(z,z';\varepsilon) = -\frac{2m\alpha_0}{\sqrt{k^{\pm}_{\alpha}(z)k^{\pm}_{\alpha}(z')}} \times$$
$$\times \frac{\sin\left[\int\limits_0^{z'} k^{\pm}_{\alpha}(z_1)\,dz_1\right]\sin\left[\int\limits_z^{D} k^{\pm}_{\alpha}(z_1)\,dz_1\right]}{\sin\left[\int\limits_0^{D} k^{\pm}_{\alpha}(z_1)\,dz_1\right]}, \qquad (3)$$

где выражение для компоненты квазиимпульса электронов проводимости $k^{\pm}_{\alpha}(z)$ аналогично (1), а коэффициент затухания s-электронов $\gamma^s_\alpha(z)$ определяется плотностью состояний в d-зоне (2).

Проводимость s-электронов в плоскости пленки рассчитывалась по формуле Кубо в $\varkappa$-z-представлении:

$$\sigma_\alpha(D) = \frac{\hbar^3 e^2}{(2\pi)^3 m^2} \int \varkappa^2 \, d\varkappa \times$$

$$\times \frac{1}{2D} \int\limits_0^D \int\limits_0^z G^{WKB+}_{\varkappa\alpha}(z, z'; \varepsilon_F) G^{WKB-}_{\varkappa\alpha}(z, z'; \varepsilon_F) \, dz' \, dz.$$

После подстановки функций Грина (3) и соответствующих алгебраических преобразований было получено выражение для проводимости тонкой пленки:

$$\sigma(D) \approx \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \int\limits_0^{k_F} \left\{ \frac{\mathrm{ch}(2d_\alpha D) + (d_\alpha / c_\alpha)\sin(2c_\alpha D)}{4(c_\alpha^2 + d_\alpha^2) d_\alpha [\mathrm{ch}(2d_\alpha D) - \cos(2c_\alpha D)]} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2D(c_\alpha^2 + d_\alpha^2)^2} \right\} \varkappa^3 \, d\varkappa,$$

где

$$c_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(k_F^2 - \varkappa^2)^2 + \frac{4m^2}{\hbar^4} \overline{\gamma}^2_\alpha(D)} + (k_F^2 - \varkappa^2)},$$

$$d_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(k_F^2 - \varkappa^2)^2 + \frac{4m^2}{\hbar^4} \overline{\gamma}^2_\alpha(D)} - (k_F^2 - \varkappa^2)}.$$

Графики зависимости проводимости тонкой пленки, нормированной на объемную проводимость, от толщины пленки представлены на рис. 2, 3.

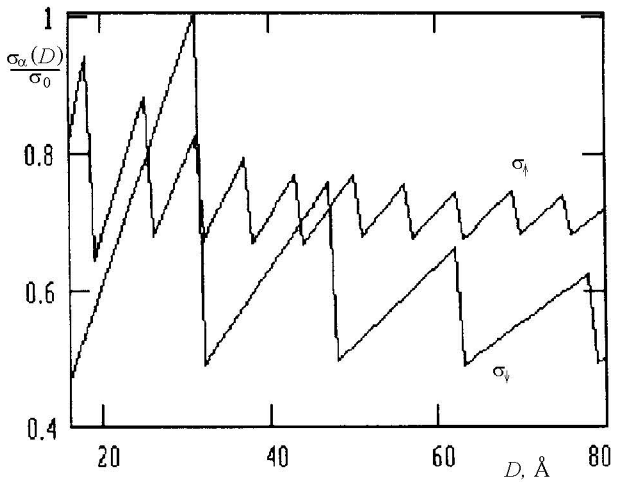

Рис. 2. Зависимость величин проводимости тонкой пленки, обусловленных электронами с различным направлением спина, от толщины этой пленки D: магнитный момент электрона параллелен намагниченности ($k^\uparrow_{Fd} = 0{,}5$ Å^{-1}) — верхняя кривая и антипараллелен намагниченности ($k^\downarrow_{Fd} = 0{,}2$ Å^{-1}) — нижняя. Проводимость рассчитана с учетом s-d-рассеяния и нормирована на проводимость объемного образца σ_0; для s-зоны $k_{Fs} = 1$ Å^{-1}, $l^\uparrow_s = 100$ Å, $l^\downarrow_s = 30$ Å

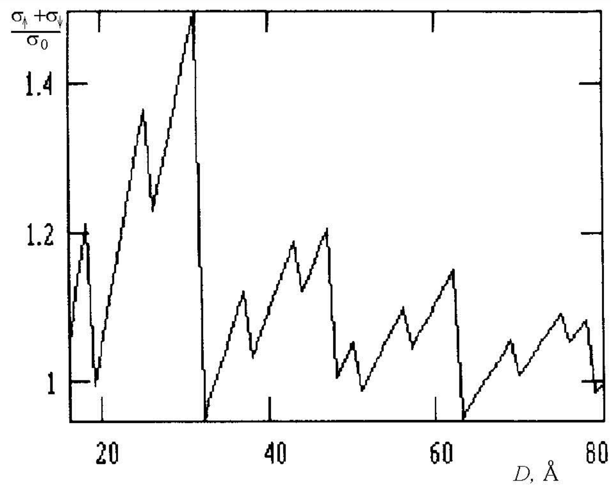

Рис. 3. Зависимость проводимости тонкой пленки $\sigma(D) = \sigma_\uparrow(D) + \sigma_\downarrow(D)$, рассчитанной с учетом s-d-рассеяния и нормированной на проводимость объемного образца σ_0, от толщины этой пленки D

Обсуждение результатов

Как видно из сравнения рис. 2 и 1,*б*, период осцилляций проводимости s-электронов при учете s-d-рассеяния совпадает с периодом осцилляций плотности состояний в d-зоне, обратно пропорциональным импульсу Ферми d-электронов. Полная проводимость складывается из величин, соответствующих двум возможным проекциям спина на ось намагничивания. Эти величины имеют разные периоды осцилляций (рис. 3). Для сравнения на рис. 4 представлена проводимость s-электронов в плоскости тонкой металлической пленки без учета s-d-рассеяния, ее период соответствует ферми-импульсу s-зоны.

Проведенный расчет позволяет сделать вывод, что при учете рассеяния s-электронов в d-зону периоды осцилляций проводимости в зависимости от толщины пленки определяются импульсами Ферми

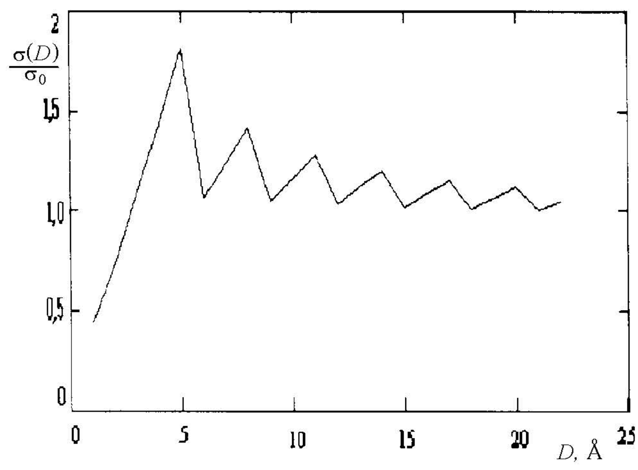

Рис. 4. Зависимость проводимости тонкой пленки $\sigma(D)$ без учета s-d-рассеяния, нормированной на проводимость объемного образца σ_0, от толщины этой пленки D; для s-зоны $k_{Fs} = 1$ Å^{-1}, $l_s = 200$ Å

d-электронов с различными проекциями спина на ось намагниченности, хотя основными носителями заряда являются s-электроны. Это обстоятельство необходимо учитывать и при рассмотрении эффекта гигантского магнетосопротивления в многослойных структурах и сэндвичах.

Литература

1. *Stiles M.D.* // Phys. Rev. 1993. **B48**, No. 10. P. 7238.
2. *Suzuki Y., Katayama T., Yoshida S.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. **68**. P. 3355.
3. *Katayama T., Suzuki Y., Awano H.* // Phys. Rev. Lett. 1988. **60**. P. 1426.
4. *Сандомирский В.Б.* // ЖЭТФ. 1967. **52**, №1. С. 158.
5. *Zhang X.-G., Butler W.H.* // Phys. Rev. 1995. **B 51**. P. 10085.
6. *Trivedi N., Ashcroft N.V.* // Phys. Rev. 1988. **B38**. P. 12298.
7. *Hoffmann H., Fisher G.* // Thin Solid Films. 1976. **36**. P. 25.
8. *Fisher G., Hoffmann H.* // Solid State Commun. 1980. **35**. P. 793.
9. *Camblong H.C., Levy P.M., Zhang S.* // Phys. Rev. 1995. **B51**. P. 16052.
10. *Crepieux A., Lacroix C., Ryzhanova N., Vedyayev A.* // Phys. Lett. 1997. **A 229**. P. 401.

Поступила в редакцию
08.07.98

УДК 538.214; 537.248

ПРИРОДА СПИНСТЕКЛООБРАЗНОЙ ФАЗЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СПИНОВЫХ СТЕКЛАХ СИСТЕМЫ $x\,CuCr_2Se_4-(1-x)Cu_{0,5}Me_{0,5}Cr_2Se_4$ (Me = In, Ga)

А. И. Абрамович, Л. И. Королева

(*кафедра общей физики для естественных факультетов*)

Изучена зависимость магнетосопротивления $\Delta\rho/\rho$ от квадрата намагниченности σ^2 в сильных магнитных полях в системе $x\,CuCr_2Se_4-(1-x)Cu_{0,5}Me_{0,5}Cr_2Se_4$ (Me = In, Ga). Показано, что и в спиновых стеклах (СС), и в возвратном спиновом стекле (ВСС) этой системы при температуре замораживания T_f происходит изменение наклона зависимостей $(\Delta\rho/\rho)(\sigma^2)$, что указывает на существенную перестройку спиновой системы при $T=T_f$, т. е. на наличие в ней термодинамического фазового перехода. Показано, что спинстеклообразная фаза в ВСС состоит из спинов отдельных ионов Cr^{3+}, в то время как в СС содержатся и взаимодействующие ферромагнитные кластеры.

Введение

В настоящее время в физике спиновых стекол (СС) одним из основных является вопрос о существовании фазового перехода СС – парамагнетизм (ПМ) и СС – дальний магнитный порядок (ДМП). Изучению первого из них посвящено большое количество работ, в которых применяются различные методы исследования: эффект Мёссбауэра, рассеяние нейтронов, деполяризация положительных мюонов, ЯМР, ЭПР и др. Однако ни один из этих методов не позволяет однозначно установить наличие фазового перехода СС–ПМ. Фазовый переход СС–ДМП гораздо менее изучен. В настоящей работе приводится новое экспериментальное доказательство существования фазовых переходов в системе твердых растворов $x\,CuCr_2Se_4-(1-x)Cu_{0,5}Me_{0,5}Cr_2Se_4$ (Me = In, Ga): СС–ПМ в составах с $x \leqslant 0{,}5$ и СС–ДМП в составе с $x=0{,}125$ (Me = Ga).

Известно, что в магнетиках магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho$ пропорционально квадрату намагниченности σ^2 и наклон кривых зависимости $(\Delta\rho/\rho)(\sigma^2)$ в области сильных магнитных полей характеризует интенсивность парапроцесса при данной температуре. Для выяснения природы СС-фазы целесообразно сравнить этот наклон для двух близких по составу образцов, один из которых является магнетиком с ДМП, а другой — СС, при одинаковых температурах, а также для возвратных спиновых стекол (ВСС) в различных температурных областях, а именно в областях, соответствующих ДМП- и СС-состоянию. Если наклон этих кривых близок по величине, то СС-фаза, по всей видимости, представляет собой систему кластеров, внутри которых тот же магнитный порядок, что и в фазе с ДМП. Если же наклон существенно различается, то можно говорить о существенном отличии СС-фазы от фазы с ДМП. Можно предположить несколько вариантов структуры СС-фазы, а именно: а) структура из кластеров с тем же магнитным порядком, что и фаза с ДМП, кластеров с иным магнитным порядком, чем фаза с ДМП, и других носителей магнитных моментов, например спинов отдельных ионов; б) структура из кластеров с иным магнитным порядком, чем фаза с ДМП; в) из кластеров с иным магнитным порядком, чем фаза с ДМП, и отдельных магнитных ионов; г) из спинов отдельных магнитных ионов. В последнем случае следует ожидать отсутствия частотной зависимости температуры замораживания T_f. Подобное сравнение наклона зависимостей $(\Delta\rho/\rho)(\sigma^2)$ можно провести и для одного образца с СС-состоянием в различных температурных областях: при $T>T_f$ и $T<T_f$.

Ранее нами были изучены магнитные и электрические свойства системы твердых растворов $x\,CuCr_2Se_4-(1-x)Cu_{0,5}Me_{0,5}Cr_2Se_4$ (Me = In, Ga) [1–6]. Было показано, что составы с $0 \leqslant x \leqslant 0{,}1$ являются невырожденными полупроводниками и об-