

РАЗМЕРНО-ЗАВИСЯЩИЕ КОСВЕННЫЙ ОБМЕН, МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В МАЛЫХ ЧАСТИЦАХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

Э.Л.Нагаев

*Институт физики высоких давлений РАН
142092 Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 18 февраля 1993 г.

Интеграл косвенного обмена в магнитных малых частицах и тонких пленках зависит от их размера. Если в массивных образцах косвенный обмен устанавливает ферромагнитное упорядочение, малые частицы могут стать антиферромагнитными и сверхпроводящими. Тип упорядочения можно менять внешним электрическим полем или адсорбцией.

Здесь исследован косвенный обмен в магнитных образцах конечных размеров. Будет показано, что причинами размерной зависимости косвенного обмена являются два фактора: появление в эффективном обменном интеграле члена, связанного с поверхностью, и изменение объемного члена из-за размерной зависимости импульса Ферми. Оба эти фактора существенно зависят от граничных условий для электронов на поверхности образца. Их можно менять адсорбцией или внешним электрическим полем. Соответственно будет меняться тип магнитного упорядочения или его количественные характеристики, и можно говорить о новой форме магнитоэлектрического эффекта – поверхностной.

С размерной зависимостью косвенного обмена можно связать и чрезвычайно интересный эффект ¹: в то время как кластеры Gd определенных размеров ведут себя нормально – как суперпарамагнитные частицы, кластеры Gd других размеров ведут себя аномально: в установке Штерна–Герлаха они отклоняются в сторону слабых полей. Сравнивая этот факт с тем, что в этой установке кластеры слабых магнетиков V, Pd, Al и даже кластеры сильного магнетика Cr не отклоняются вообще ², естественно заключить, что аномальные кластеры Gd сильно диамагнитны, что может быть следствием их сверхпроводящего состояния.

Это предположение, на первый взгляд, противоречит тому факту, что Gd – ферромагнитный металл, и, следовательно, сверхпроводимость в нем запрещена. Однако из-за размерной зависимости косвенного обмена малые кластеры Gd не обязаны быть ферромагнитными, и потому запрет на сверхпроводимость в них может быть снят.

Ниже считается, что образец представляет собой пластину кристалла с простой кубической элементарной ячейкой, описываемый гамильтонианом s – f -модели с учетом отличия потенциала на поверхности Bv от объемного, выбранного за нуль:

$$H = Bv \sum a_{m\sigma}^* a_{m\sigma} + B \sum a_{g\sigma}^* a_{g+\vec{\Delta},\sigma} - A \sum (S_g s)_{\sigma\sigma'} a_{g\sigma}^* a_{g\sigma'}, \quad (1)$$

где g – номер атома, m – номер поверхностного атома, $\vec{\Delta}$ – вектор, соединяющий ближайших соседей; $a_{g\sigma}^*$, $a_{g\sigma}$ – s -электронные операторы, S_g и s –

операторы спина f -атома и s -электрона, σ – проекция спина последнего, B – блоховский интеграл, A – интеграл s – f -обмена, параметр v задает поверхностный потенциал. Толщина пластины вдоль оси z равна $L = (2l + 1)a$, где a – постоянная решетки.

Гамильтониан косвенного обмена получается из (1) во втором порядке теории возмущений по AS/W , где S – величина f -спина, $W = 12|B|$. Он имеет обычную гейзенберговскую форму с эффективным интегралом косвенного обмена:

$$J(g, g') = -\frac{A^2}{4(2\pi a)^4} \sum_{t, t'} \sum_{k_t, k'_t} \int d^2 p d^2 p' \exp[i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \varphi_t(k_t, z) \times \\ \times \varphi_{t'}(k'_t, z') \varphi_{t'}(k'_t, z) \varphi_t(k_t, z') (n_{\mathbf{p}', k'_t} - n_{\mathbf{p}, k_t}) (E_{\mathbf{p}', k'_t} - E_{\mathbf{p}, k_t})^{-1}, \quad (2)$$

где $\mathbf{r} = (x, y)$, $n_{\mathbf{p}, k}$ – фермиевская функция распределения для электрона с энергией $E_{\mathbf{p}, k}$ в состоянии с волновой функцией φ_t ($t = s, c$):

$$E_{\mathbf{p}, k} = 2B(\cos p_x a + \cos p_y a + \cos k z); \quad (3)$$

$$\varphi_s(k_s, z) = \left[\frac{L}{2a} (1 - \chi_{k_s}) \right]^{1/2} \sin k_s z, \quad \varphi_c(k_c, z) = \\ = \left[\frac{L}{2a} (1 + \chi_{k_c}) \right]^{1/2} \cos k_c z, \quad \chi_k = \frac{a \sin Lk}{L \sin ak}. \quad (4)$$

При $|v| \leq 1$ дозволённые значения поперечных компонент импульса $k \in [0, \pi/a]$ находятся из соотношений (n_c и n_s – целые числа)

$$lk_s a = \pi n_s + \arccos \{ (v - \cos k_s a) / \sin k_s a \}, \\ lk_c a = \pi n_c - \arccos \{ (v - \cos k_c a) / \sin k_c a \}. \quad (5)$$

Ниже будет рассмотрен наиболее актуальный случай "слабого" пространственного квантования, когда все величины оказывается возможным разделить на объёмную и поверхностную части. В простейшем случае это достигается использованием формулы суммирования Эйлера – Маклорена в первом порядке³ по $1/k_F L$. Ограничимся случаями $v = 0, \pm 1$, когда уравнения (5) решаются точно. В первом из них оказывается, что при заданной энергии Ферми μ (но не концентрации s -электронов n !) поверхностная поправка к $J(g, g')$ отсутствует, а в остальных случаях она равна

$$J_s(g, g') = -\frac{A^4 a^6}{8(2\pi)^5 L} \int d^2 p d^2 p' dk \exp\{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \times \\ \times \cos k(z - z') (n_{\mathbf{p}', q} - n_{\mathbf{p}, k}) (E_{\mathbf{p}', q} - E_{\mathbf{p}, k})^{-1}, \quad (6)$$

где $q = 0$ при $v = 1$ и $q = \pi/a$ при $v = -1$.

При малых πa^3 интеграл (6) с $r = r'$, $v = 1$ удастся вычислить аналитически, если использовать квадратичную аппроксимацию для закона дисперсии (3) ($B < 0$):

$$J_s(\zeta) = \frac{A^2 m a^6}{64 \pi^2 L \zeta} \left\{ \lambda_F^2 - \frac{k_F \sin k_F \zeta}{\zeta} - \frac{\cos k_F \zeta}{\zeta^2} + \frac{1}{\zeta^2} \right\}, \quad (7)$$

$$\zeta = |z - z'| \geq a, \quad 1/m = |B|a^2 \quad (\hbar = 1).$$

Импульс Ферми k_F в (7) можно взять тем же, что и для массивного образца. Тогда и при малых, и при больших ζ интеграл J_S пропорционален k_F^2 , то-есть величине $n^{2/3}$, имеющей смысл поверхностной концентрации электронов. Это есть следствие того факта, что J_S связан с электронами, находящимися на виртуальных поверхностных уровнях (значение $v = 1$ – граничное, при котором виртуальные поверхностные уровни превращаются в реальные). Зависимость J_S от расстояния между спинами совершенно иная, чем у общеизвестного выражения для объемной части интеграла косвенного обмена (см., например, ⁴). Если $B < 0$, то при $v = -1$ виртуальные уровни расположены вблизи потолка зоны (3), и электронов на них нет. Поэтому J_S оказывается в этом случае гораздо меньше.

Вторым источником размерной зависимости обменного взаимодействия является размерная зависимость энергии Ферми электронов при фиксированной их плотности. Если $v = 0$, при малых n размерно-зависящая часть k_{FS} импульса Ферми для образца объема V и площади поверхности S равна ³ $\pi S/8V$. Между тем, согласно численным расчетам ⁴, парамагнитная температура Кюри при косвенном обмене является осциллирующей знакопеременной функцией k_{Fa} . В принятой здесь модели ферромагнитное упорядочение теряет устойчивость при $k_{Fa} \approx 2$, и при увеличении этого параметра на 0,1 ферромагнетик с достаточно высокой точкой Кюри превращается в антиферромагнетик с достаточно высокой точкой Нееля. Но именно к такому порядку величины изменения k_{Fa} приводит указанная выше оценка для размерного сдвига импульса Ферми в малых частицах с радиусом в пределах до $10a$. Таким образом, если массивный металл ферромагнитен, его малая частица в определенном интервале размеров может быть антиферромагнитной.

Адсорбция на поверхности образца и внешнее электрическое поле меняют величину поверхностного потенциала vB в (1). Соответственно меняются оба J_S и k_F , а значит, и магнитные характеристики образца вплоть до типа магнитного упорядочения. Зависимость k_F от v в образцах конечных размеров приведена в ³.

-
1. D.Douglass, J.Bucher, and L.Bloomfield, Phys. Rev. Lett. **68**, 1774 (1992).
 2. D.Douglass, J.Bucher, and L.Bloomfield, Phys. Rev. B **45**, 6341 (1992).
 3. E.L.Nagaev, Phys. Rep. **222**, 201 (1992).
 4. D.Mattis, The Theory of Magnetism, Harper and Row, New York, 1965.