

Московский инженерно-
физический институт

Поступило в Редакцию
4 ноября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 2

26 января 1989 г.

11

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АДАТОМОВ НА АКТИВИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ВБЛИЗИ ТОЧКИ КЮРИ МАГНЕТИКА

Ю.Н. Девятко, В.Н. Троиин,
В.И. Троян

В результате многочисленных экспериментов было установлено аномальное возрастание в окрестности точки Кюри (T_K) магнетика скорости таких поверхностных процессов, как начальное окисление Fe и Co , сублимация Co , десорбция водорода с Ni , восстановление окиси Ni [1]. Для описания этих активированных процессов была предложена одночастичная модель [2], учитывающая взаимодействие адатомов с термостатом: выход частицы из потенциальной ямы $U(\vec{r})$ происходит под действием случайных сил, обусловленных флуктуациями равновесного термостата. Поскольку при $T \rightarrow T_K$ возрастает амплитуда и время жизни флуктуаций спиновой подсистемы магнетика, то в результате аномально увеличивается случайная сила, действующая на адатом со спином S , и возрастает частота релаксации частицы γ [2].

Однако одночастичное приближение не позволяет объяснить наблюдаемые [3] зависимости энергии активации и величины аномалий скорости окисления Ni в окрестности точки Кюри от степени заполнения (θ) поверхности адчастицами [3]. Покажем, что взаимодействие между адчастицами может оказывать существенную роль на характер активированных процессов, особенно при больших степенях заполнения и вблизи точки Кюри магнетика. С учетом взаимодействия адатомов друг с другом уравнение Фоккера-Планка для функции распределения частиц по координатам (\vec{r}) и импульсам (\vec{p}) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + (\vec{F}_0 + \vec{F}_1) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \gamma \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(mT \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} + \vec{p}f \right), \quad (1)$$

где m - масса частицы, T - температура термостата, $F_0 = -\nabla U$, $F_1 = -\nabla \int V(\vec{r} - \vec{r}') f(\vec{r}', \vec{p}, t) d\vec{r}' d\vec{p}$ ($U(\vec{r})$ и $V(\vec{r} - \vec{r}')$ - потенциалы взаимодействия адчастицы с термостатом и между собой со-

ответственно Из (1) видно, что в отсутствие взаимодействия ад-частиц уравнение (1) сводится к стандартному уравнению Фоккера-Планка. В первом приближении по взаимодействию адатомов изменение их потенциала взаимодействия с термостатом имеет вид

$$\tilde{U} = U + \delta U, \quad \delta U \approx n_0 \int V(\vec{r} - \vec{r}') e^{-U(\vec{r}')/T} d\vec{r}', \quad (2)$$

где n_0 - средняя плотность частиц на поверхности. Интегрирование в (2) ведется в области, в которой потенциал $U(\vec{r})$ отличен от 0.

Известно [4], что вблизи точки Кюри для описания активированных процессов достаточно ограничиться случаем длинноволновых флуктуаций ($\vec{k} \rightarrow 0$). Тогда можно показать, что учет взаимодействия адатомов приводит к изменению частоты релаксации

$$\tilde{\gamma} = \gamma \left(1 + \frac{n_0 V_{\text{эф}}(\vec{k} \rightarrow 0)}{T} \right)^{-1}, \quad (3)$$

$$\text{где } V_{\text{эф}}(\vec{k}) = \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r}.$$

Таким образом, с учетом взаимодействия адатомов задача о выходе частицы из ямы сводится к задаче Крамерса с заменой параметров $U_0 \rightarrow \tilde{U}_0$ и $\gamma \rightarrow \tilde{\gamma}$, где U_0 - глубина потенциальной ямы $U(\vec{r})$. Тогда вероятность выхода частицы из ямы в приближении так называемого слабого трения ($\gamma < \omega \frac{T}{U_0}$, ω - характерная частота движения частицы в яме) имеет вид [5]

$$\rho = \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\gamma}} \frac{\tilde{U}_0}{T} e^{-\tilde{U}_0/T}. \quad (4)$$

Вычислим эффективное взаимодействие адатомов вблизи T_K . Описание магнитного фазового перехода будем проводить в приближении Гинзбурга-Ландау. Взаимодействие адатома со спином S с магнетиком $\vec{\sigma}(\vec{r})$ запишем в виде [6]

$$H_{B3} = -\lambda \int S \vec{\sigma}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (5)$$

где $n(\vec{r})$ - плотность адатомов.

Запишем полный гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$H = H_0 + H_1 + H_{B3}. \quad (6)$$

Здесь H_0 - гамильтониан Гинзбурга-Ландау, H_1 - энергия непосредственного взаимодействия адатомов друг с другом (без учета взаимодействия через магнетик). Статистическая сумма, соответствующая гамильтониану (6), представляется в виде функционального интеграла по полям $\vec{\sigma}(\vec{r})$ и $n(\vec{r})$.

$$Z = \int D\vec{\sigma} Dn e^{-H/T}. \quad (7)$$

Интересуясь взаимодействием адатомов друг с другом, выполним интегрирование в (7) по спиновым переменным. Ограничиваясь при интегрировании в (7) гауссовым приближением, получим

$$H_{\text{эф}} = H_1 + \int n(\vec{r}) V_{\text{эф}}(\vec{r} - \vec{r}') n(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (8)$$

$$\text{где } V_{\text{эф}}(\vec{r} - \vec{r}') = - \frac{\lambda^2 s(s+1)}{2T} K(\vec{r}, \vec{r}').$$

Корреляционная функция $K(\vec{r}, \vec{r}')$ в (9) для гамильтониана Гинзбурга-Ландау (H_0) имеет вид [7]

$$K(\vec{r}, \vec{r}') = \langle |\sigma(\vec{k})|^2 \rangle = T \int \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')}}{\alpha + ck^2} d\vec{k}, \quad \alpha = \alpha(T - T_K)/T_K, \quad \alpha > 0. \quad (9)$$

Таким образом, из соотношений (8), (9) видно, что из-за взаимодействия адатомов через магнетик между ними возникает „косвенное“ магнитное взаимодействие, носящее характер притяжения. При $T \rightarrow T_K$ это взаимодействие становится дальнедействующим, что приводит к возникновению аномалий в поведении частоты релаксации активированных процессов ($\tilde{\tau}$) вблизи T_K от температуры.

Подчеркнем, что вблизи точки Кюри определяющим является именно „косвенное“ магнитное взаимодействие адатомов. В этом случае непосредственный расчет частоты релаксаций $\tilde{\tau}$ дает

$$\tilde{\tau} = \tau \left[1 - \frac{n_0}{2T_K} \frac{\lambda^2 s(s+1)}{\alpha(T - T_K)} \right]^{-1}. \quad (10)$$

Поскольку учет взаимодействия адатома с термостатом приводит также к аномальной зависимости частоты релаксации τ при $T \rightarrow T_K$ [2] $\tau = A|T - T_K|^{3/2}$, то величина $\tilde{\tau}$ имеет вид

$$\tilde{\tau} = A \frac{1}{|T - T_K|^{3/2}} \cdot \frac{1}{|T - \tilde{T}_K(\theta)|}, \quad \begin{aligned} \tilde{T}_K(\theta) &= T_K + \beta\theta, \quad T > T_K, \\ \tilde{T}_K(\theta) &= T_K - \beta\theta, \quad T < T_K. \end{aligned} \quad (11)$$

Анализ (11) показывает, что с увеличением θ вблизи T_K , когда существенный вклад дает „косвенное“ магнитное взаимодействие, происходит сдвиг T_K и уширение области аномалий. Частота релаксации уменьшается как $\tilde{\tau} \sim 1/\theta$. В результате углубления потенциальной ямы (δU), вызванного взаимодействием адатомов, увеличивается энергия активации с ростом θ . Эти выводы подтверждаются результатами экспериментов по исследованию скорости начального окисления Ni в окрестности T_K [3]. Действительно, согласно [3], при увеличении величины θ с 0.26 до 0.9 исчезают аномалии скорости окисления Ni , энергия активации увеличивается на величину $\Delta E_a \approx 0.1$ эВ и точка Кюри уменьшается на $\Delta T_C \approx 30$ К при переходе из ферромагнитной фазы в парамагнитную.

Авторы признательны В.Д. Борману за полезное обсуждение работы.

- [1] Measor G.C., Afzulpurkar K.K. // Phal. Mag. 1964. V. 10. P. 1984; Chatterjee B. // Jhin Solid Films. 1977. V. 41. P. 227; Shanaberger M.R. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. P. 1964; Delmon B., Roman A. // J.C.J. FARADAY 1. 1973. V. 69. P. 941.
- [2] Борман В.Д., Пивоваров А.Н., Троян В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. С. 458.
- [3] Борман В.Д., Гусев Е.П., Лебединский Ю.Ю., Троян В.И. Физика кластеров, сборник научных трудов ИТ СО АН СССР. Новосибирск, 1987.
- [4] Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980.
- [5] Kramer H.A. // Physica. 1940. N 7. P. 284-304.
- [6] Займан. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
- [7] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.

Московский инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию
10 октября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 2

26 января 1989 г.

06.2; 06.3

ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНОСТЬ ГЕТЕРОСТРУКТУР С WO_3

Б.Ш. Галямов, И.Е. Обвинцева,
Ю.Е. Рогинская, М.И. Яновская

Объединение в единой планарной гетероструктуре (ГС) материалов с различным электрохимическим откликом на воздействие света и (или) потенциала для усиления характеристик индивидуальной компоненты или получения полифункционального устройства может иметь большое практическое значение. При этом желательно, чтобы в качестве внешнего покрытия таких ГС использовались коррозионностойкие материалы, например широкозонные оксиды переходных металлов.

Интересными оказались ГС с оксидами вольфрама и титана. Известно, что широкозонный оксид TiO_2 - фотоэлектрод с высоким квантовым выходом, но спектральной чувствительностью только в УФ-области [1]. Поликристаллические пленки WO_3 являются оксидами, фоточувствительными в более длинноволновой области, но с низким КПД электрохимического преобразования солнечной энергии вследствие высокого положительного потенциала плоских зон [1, 2].