05

Поверхностные искажения в слабом ферромагнетике

© Д.Л. Винокуров, А.И. Морозов

Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики,
Москва, Россия

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 26 октября 2012 г.)

Изучено влияние поверхности на скос подрешеток двухподрешеточного антиферромагнетика, обусловленный взаимодействием Дзялошинского–Мория. Показано, что угол скоса вблизи поверхности отличается от его объемного значения. Рассчитаны зависимость его величины от расстояния до поверхности и дополнительный поверхностный магнитный момент. Рассмотрены компенсированная и некомпенсированная поверхности антиферромагнетика.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-02-12241-офи-м-2011).

1. Введение

Повышенный интерес исследователей магнитных материалов вызывают слабые ферромагнетики, приоритет в открытии которых принадлежит нашей стране. В работе Боровика-Романова и Орловой [1] была впервые предложена модель слабого ферромагнетика как антиферромагнетика с небольшой неколлинеарностью магнитных подрешеток. Первая последовательная термодинамическая теория слабого ферромагнетизма как физического явления была развита Дзялошинским [2]. Взаимодействие, связанное с появлением в свободной энергии магнитных кристаллов определенной симметрии спиновых инвариантов, меняющих знак при изменении нумерации магнитных подрешеток, получило общее название „взаимодействие Дзялошинского". В 1960 г. Мория предложил микроскопическую модель, объясняющую происхождение антисимметричного обмена в антиферромагнетиках [3].

Взаимодействие Дзялошинского–Мория — это антисимметричное анизотропное обменное взаимодействие между двумя спинами (магнитными моментами), принадлежащими решетке без центра инверсии. Оно обусловлено релятивистским обменным взаимодействием и имеет вид

$$W_{\mathrm{DM}} = \mathbf{D}_{ij}[\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j], \qquad (1)$$

где индексы i, j — нумеруют локализованные спины $\mathbf{S}_i$, а $\mathbf{D}_{ij}$ является так называемым вектором Дзялошинского–Мория.

Однако, несмотря на наличие обширного теоретического и экспериментального материала, многие вопросы остаются до сих пор открытыми. В частности, ни в одной из известных нам работ, посвященных слабому ферромагнетизму, не рассматриваются поверхностные изменения угла скоса подрешеток. В последние годы в связи с развитием спинтроники слабым ферромагнетикам уделяется большое внимание [4]. Для создания магниторезистивной памяти с записью с помощью электрического поля, функционирующей при комнатной температуре, используют нанослои магнитоэлектрика $\mathrm{BiFeO_3}$ [5,6].

Поскольку в нанослоях поверхностные явления играют первостепенную роль, их исследование наряду с фундаментальным представляет и существенный прикладной интерес. Этому вопросу и посвящена настоящая работа.

В объемном $\mathrm{BiFeO_3}$ присутствует пространственно-модулированная структура [7], что приводит к исчезновению магнитоэлектрического эффекта вследствие его усреднения. Однако в тонких (< 500 nm) пленках феррита висмута пространственно-модулированная структура подавляется [8] и реализуется антиферромагнитное упорядочение G-типа со слабым ферромагнетизмом, обусловленным взаимодействием Дзялошинского–Мория.

Аналогичного эффекта можно достичь замещением висмута стронцием [9] или редкоземельными элементами [10–12].

Спонтанная сегнетоэлектрическая поляризация феррита висмута направлена вдоль одной из осей [111] ромбоэдрически искаженной перовскитоподобной структуры.

Магнитные моменты железа лежат в плоскостях (111), перпендикулярных направлению спонтанной поляризации. Спины атомов, принадлежащих такой плоскости, направлены параллельно друг другу, т.е. принадлежат одной антиферромагнитной подрешетке. Атомы соседних плоскостей принадлежат разным подрешеткам [13].

Согласно [14], вектор антиферромагнетизма **L** лежит в плоскости (111), перпендикулярной вектору **P**, и в упругосжатом слое $\mathrm{BiFeO_3}$ направлен параллельно одному из трех кристаллографических направлений типа [112]. Вектор слабого ферромагнетизма **M** лежит в той же плоскости и ортогонален вектору **L**, т.е. параллелен кристаллографическому направлению $[1\bar{1}0]$ и образует с векторами **P** и **L** правую тройку векторов [13]. В случае деформации растяжения ситуация изменяется на противоположную: легкие направления для векторов **M** и **L** меняются местами [14].

2. Гладкая некомпенсированная поверхность полубесконечного образца

Рассмотрим дискретную систему квазиклассических локализованных спинов при температуре $T \ll T_N$ и $T \ll T_C$, когда модули локализованных спинов можно считать неизменными.

Исследуем некомпенсированный срез (111) $BiFeO_3$. Пронумеруем некомпенсированные атомные плоскости, параллельные поверхности, индексом j начиная с поверхности. Четные и нечетные значения j отвечают разным подрешеткам. Положение спинов в атомной плоскости будем задавать углом θ_j между направлением легкой оси, вдоль которой ориентирован вектор антиферромагнетизма, и соответствующим спину магнитным моментом. Предполагается, что магнитные моменты атомов не выходят из своей атомной плоскости, поскольку такие состояния обладают наименьшей энергией.

С учетом сделанного предположения аналогично работе [15] энергия обменного взаимодействия может быть выражена в виде

$$W_{\text{ex}} = \frac{N|J|z}{4}\sum_{j=1}^{\infty}\left[\cos(\theta_j - \theta_{j-1})(1-\delta_{1,j}) + \cos(\theta_j - \theta_{j+1})\right], \tag{2}$$

где N — число спинов в атомной плоскости, z — число ближайших соседей, $J < 0$ — обменный интеграл, в который включена величина спинов. Число ближайших к данному спину соседей, находящихся в предшествующей или последующей атомных плоскостях, равно $z/2$.

Энергия анизотропии имеет вид

$$W_{\text{an}} = -AN\sum_{j=1}^{\infty}\cos 6\theta_j, \tag{3}$$

где $A > 0$ — константа анизотропии. Данное выражение соответствует наличию трех легких осей в плоскости среза, однако, поскольку нас интересуют малые углы скоса, дальнейшее рассмотрение может быть применено к случаю одной легкой оси путем переобозначения соответствующей константы анизотропии.

Энергия антисимметричного обмена, как следует из векторного произведения в (1), для случаев четных и нечетных атомных плоскостей различается знаком:

$$W_{\text{DM}} = \frac{NDz}{4}\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j[\sin(\theta_{j+1} - \theta_j) + \sin(\theta_{j-1} - \theta_j)(1-\delta_{1,j})]. \tag{4}$$

Рассмотрим случай отсутствия внешнего магнитного поля. Тогда выражение для полной энергии системы представляется в виде

$$W = W_{\text{ex}} + W_{\text{an}} + W_{\text{DM}}. \tag{5}$$

Минимизируя суммарную энергию W по параметрам θ_j, получаем систему уравнений для четных и нечетных атомных плоскостей

$$\sin(\theta_{2n} - \theta_{2n-1}) + \sin(\theta_{2n} - \theta_{2n+1}) = \alpha\sin 6\theta_{2n} - \xi\cos(\theta_{2n+1} - \theta_{2n}) - \xi\cos(\theta_{2n-1} - \theta_{2n}), \tag{6}$$

$$\sin(\theta_{2n-1} - \theta_{2n-2})(1-\delta_{1,2n-1}) + \sin(\theta_{2n-1} - \theta_{2n}) = \alpha\sin 6\theta_{2n-1} + \xi\cos(\theta_{2n} - \theta_{2n-1}) + \xi\cos(\theta_{2n-2} - \theta_{2n-1})(1-\delta_{1,2n-1}), \tag{7}$$

где

$$\alpha = \frac{12A}{zJ}, \tag{8}$$

$$\xi = \frac{D}{J}. \tag{9}$$

Рассмотрим скос намагниченностей антиферромагнитных подрешеток в объеме образца. Обозначим через θ_0 соответствующий угол скоса. Положим все углы θ_j для нечетных j равными θ_0, а для четных j — равными $\pi - \theta_0$. Тогда из системы (6), (7) для малых углов скоса ($\theta_0 \ll 1$) получаем

$$\theta_0 = \frac{\xi}{2 + 3\alpha}. \tag{10}$$

Легко убедиться, что объемное решение не удовлетворяет уравнению (7) для случая $n = 1$, т. е. угол скоса подрешеток на поверхности образца отличается от его объемного значения. Это связано с уменьшением числа ближайших соседей для спинов, лежащих в поверхностной атомной плоскости, и ростом относительного вклада энергии анизотропии в энергию этих спинов.

Введем отклонения углов скоса подрешеток от объемного значения

$$\theta_{2n} = \pi - (\theta_0 + \chi_{2n}), \quad \theta_{2n-1} = \theta_0 + \chi_{2n-1}. \tag{11}$$

Подстановка (11) в систему уравнений (6), (7) дает для малых углов скоса следующее рекуррентное соотношение при $j > 1$:

$$\chi_j(6\alpha + 2) + \chi_{j-1} + \chi_{j+1} = 0. \tag{12}$$

Решение уравнения (12) будем искать в виде геометрической прогрессии

$$\chi_j = \varkappa\chi_{j-1}. \tag{13}$$

Подстановка (13) в уравнение (12) сводит его к квадратному относительно $\varkappa$ уравнению. Поскольку значение χ_n должно убывать в глубь образца, из двух корней уравнения выбирается корень, по модулю меньший единицы,

$$\varkappa = -1 - 3\alpha + \sqrt{9\alpha^2 + 6\alpha}. \tag{14}$$

Отрицательный знаменатель прогрессии свидетельствует об осциллирующем характере искажений. Характерное расстояние, на котором значение χ_n убывает в e раз, составляет

$$r_c = \frac{d}{|\ln|\varkappa||} \tag{15}$$

и по порядку величины равно толщине блоховской доменной стенки в данном материале. При малом α радиус корреляции равен

$$r_c = \frac{d}{\sqrt{6\alpha}}. \tag{16}$$

Величину χ_1 находим из уравнения (7) при $n = 1$

$$\chi_1 = -\frac{3\alpha\theta_0}{\sqrt{9\alpha^2 + 6\alpha} + 3\alpha}. \tag{17}$$

Отрицательный знак χ_1, т. е. уменьшение угла скоса в поверхностной атомной плоскости, связан с упомянутым выше ростом в ней относительного вклада энергии анизотропии.

При $\alpha \ll 1$ выражение (17) упрощается и принимает вид

$$\chi_1 = -\frac{\sqrt{6\alpha}}{2}\,\theta_0. \tag{18}$$

Полученное выражение легко обобщается при учете отличия константы анизотропии в поверхностном слое от ее объемного значения [16,17].

Средний магнитный момент атома в объеме образца направлен перпендикулярно легкой оси и равен

$$\mu_v = m_1\theta_0, \tag{19}$$

где m_1 — модуль магнитного момента атома.

Найдем дополнительный магнитный момент, возникающий вблизи поверхности.

Перпендикулярная легкой оси компонента этого момента равна

$$M_\perp = m_1 N \sum_{j=1}^{\infty} \chi_j = \frac{m_1 N \chi_1}{1-\varkappa}. \tag{20}$$

При $\alpha \ll 1$

$$M_\perp = -\frac{1}{4}\, m_1 N \sqrt{6\alpha}\,\theta_0. \tag{21}$$

Отрицательный поверхностный вклад в слабоферромагнитный момент имеет ту же природу, что и отрицательный знак χ_1.

Параллельная легкой оси составляющая дополнительного магнитного момента

$$M_\parallel = m_1 N \sum_{j}^{\infty} \left[\cos\Big(\theta_0 + \chi_{(2j-1)}\Big) + \cos\Big(\pi - (\theta_0 + \chi_{2j})\Big)\right]$$
$$= -\frac{1}{2}\,\chi_1 m_1 \left[\frac{2\theta_0}{1+\varkappa} + \chi_1\,\frac{1}{1+\varkappa^2}\right]. \tag{22}$$

При $\alpha \ll 1$ получаем

$$M_\parallel = \frac{1}{2}\, m_1 N \theta_0^2. \tag{23}$$

Направление $M_\parallel$ совпадает с направлением намагниченности поверхностной атомной плоскости (без учета скоса), поэтому она имеет противоположные знаки по разные стороны атомной ступени на поверхности слабого ферромагнетика, изменяющей число атомных плоскостей на единицу. С этим связана возможность ее измерения методами магнитной силовой и спин-поляризационной сканирующей туннельной микроскопии.

3. Гладкая компенсированная поверхность полубесконечного образца

В случае компенсированной поверхности в каждом атомном слое, параллельном поверхности, в равном количестве присутствуют спины, принадлежащие обеим магнитным подрешеткам, в дальнейшем обозначаемым A и B. Пронумеруем атомные плоскости, параллельные поверхности, индексом j, начиная с поверхности. Разворот спинов, как и в случае некомпенсированной поверхности, будет происходить в плоскостях (111). Положение спина в такой плоскости слоя будем задавать углом $\theta_{A(B),j}$, который магнитный момент, соответствующий спину, образует с легкой осью.

Энергия гейзенберговского обменного взаимодействия W_{ex}, энергия анизотропии W_{an} и энергия антисимметричного обмена W_{DM} задаются следующими выражениями:

$$W_{\text{ex}} = \frac{N|J|}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \Big[b\cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j})$$
$$+ \frac{a}{2}(1-\delta_{1,j})\cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j-1}) + \frac{a}{2}\cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j+1})$$
$$+ \frac{a}{2}(1-\delta_{1,j})\cos(\theta_{B,j} - \theta_{A,j-1}) + \frac{a}{2}\cos(\theta_{B,j} - \theta_{A,j+1})\Big], \tag{24}$$

$$W_{\text{an}} = -\frac{AN}{2} \sum_{j=1}^{\infty} (\cos 6\theta_{A,j} + \cos 6\theta_{B,j}), \tag{25}$$

$$W_{\text{DM}} = \frac{ND}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \Big[b\sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j})$$
$$+ \frac{a}{2}(1-\delta_{1,j})\sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j-1}) + \frac{a}{2}\sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j+1})$$
$$- \frac{a}{2}(1-\delta_{1,j})\sin(\theta_{B,j} - \theta_{A,j-1}) - \frac{a}{2}\sin(\theta_{B,j} - \theta_{A,j+1})\Big], \tag{26}$$

где b и a — числа ближайших к данному спину соседей, лежащих в той же и соседней атомной плоскости соответственно. Для среза (100) простой кубической решетки $a = 1$, $b = 4$.

Минимизируя суммарную энергию $W = W_{\mathrm{ex}} + W_{\mathrm{an}} + W_{\mathrm{DM}}$ относительно переменных $\theta_{A(B),j}$, получаем бесконечную систему уравнений

$$b\sin(\theta_{A,j}-\theta_{B,j}) + a(1-\delta_{1,j})\sin(\theta_{A,j}-\theta_{B,j-1}) + a\sin(\theta_{A,j}-\theta_{B,j+1}) = \frac{z\alpha}{2}\sin 6\theta_{A,j} + \xi\big[b\cos(\theta_{A,j}-\theta_{B,j}) + a(1-\delta_{1,j})\cos(\theta_{A,j}-\theta_{B,j-1}) + a\cos(\theta_{A,j}-\theta_{B,j+1})\big], \tag{27}$$

$$b\sin(\theta_{B,j}-\theta_{A,j}) + a(1-\delta_{1,j})\sin(\theta_{B,j}-\theta_{A,j-1}) + a\sin(\theta_{B,j}-\theta_{A,j+1}) = \frac{z\alpha}{2}\sin 6\theta_{B,j} - \xi[b\cos(\theta_{B,j}-\theta_{A,j}) + a(1-\delta_{1,j})\cos(\theta_{B,j}-\theta_{A,j-1}) + a\cos(\theta_{B,j}-\theta_{A,j+1})], \tag{28}$$

где α и ξ определены соотношениями (8) и (9) соответственно.

Из симметрии задачи следует, что $\theta_{A,j} = \theta_j$, $\theta_{B,j} = \pi - \theta_j$. После этой подстановки система (27), (28) при малых θ линеаризуется в виде

$$2b\theta_j + a(1-\delta_{1,j})(\theta_j + \theta_{j-1}) + a(\theta_j + \theta_{j+1}) + 3z\alpha\theta_j = \xi[b + a(1-\delta_{1,j}) + a]. \tag{29}$$

Вдали от поверхности, учитывая, что $z = b + 2a$, получаем решение для объемного угла скоса намагниченностей подрешеток (10).

В результате замены переменных $\theta_j = \theta_0 + \chi_j$ уравнение (29) приводит для $j > 1$ к рекуррентному соотношению

$$\chi_j(2b + 2a + 3z\alpha) + a\chi_{j-1} + a\chi_{j+1} = 0. \tag{30}$$

Его решение будем искать в виде (13).

Как и в случае некомпенсированного среза, из двух корней получающегося квадратного уравнения выбирается по модулю меньший единицы

$$\varkappa = -1 - \frac{b}{a} - \frac{3z\alpha}{2a} + \sqrt{\left(1 + \frac{b}{a} + \frac{3z\alpha}{2a}\right)^2 - 1}. \tag{31}$$

В случае компенсированного среза отличие параметра $\varkappa$ от -1 определяется не малым параметром, равным отношению энергий анизотропии и обмена, а составляет величину порядка единицы и зависит от типа кристаллической решетки.

Величину χ_1 находим из уравнения (29) при $j = 1$

$$\chi_1 = -\frac{3\alpha\theta_0}{\frac{b}{a} + \frac{3z\alpha}{2a} + \sqrt{\left(1 + \frac{b}{a} + \frac{3z\alpha}{2a}\right)^2 - 1}}. \tag{32}$$

Дополнительный поверхностный магнитный момент в случае компенсированной поверхности перпендикулярен легкой оси и дается формулой (20).

4. Заключение

Угол скоса намагниченностей подрешеток, обусловленный взаимодействием Дзялошинского–Мория, вблизи поверхности кристалла отличается от его объемного значения. Отличия максимальны на поверхности и, осциллируя, экспоненциально спадают в глубь образца, причем в случае компенсированного среза они убывают быстрее, чем в случае некомпенсированного. Характерный пространственный размер спада искажений в случае некомпенсированного среза составляет величину порядка толщины блоховской доменной стенки в данном материале, а для компенсированного среза — порядка межатомного расстояния. В случае компенсированной поверхности имеется только перпендикулярная легкой оси составляющая дополнительного поверхностного момента $M_\perp \propto D$, которая при малых α пропорциональна α. В случае некомпенсированной поверхности существует еще и параллельная составляющая $M_\parallel \propto D^2$, а значение $M_\perp \propto D$ при малых α пропорционально корню из α.

Список литературы

[1] А.С. Боровик-Романов, М.П. Орлова. ЖЭТФ **31**, 579 (1956).
[2] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **32**, 1547 (1957).
[3] T. Moriya. Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
[4] R. Thomas, J.S. Scott, D.N. Bose, R.S. Katiyar. J. Phys.: Cond. Matter. **22**, 423 201 (2010).
[5] G. Catalan, J.F. Scott. Adv. Mater **21**, 2463 (2009).
[6] G. Lawes, G. Srinivasan. J. Phys. D **44**, 243 001 (2011).
[7] I. Sosnowska, T.P. Neumaier, E. Steichele. J. Phys. C **15**, 4835 (1982).
[8] F. Bai, J. Wang, M. Wuttig, J.F. Li, N. Wang, A.P. Pyatakov, A.K. Zvezdin, L.E. Cross, D. Viehland. Appl. Phys. Lett. **86**, 032 511 (2005).
[9] В.С. Покатилов, А.С. Сигов, В.В. Покатилов, А.О. Коновалова. Изв. РАН. Сер. физ. **74**, 1166 (2010).
[10] P. Uniyal, K.L. Yadav. J. Phys.: Cond. Matter. **21**, 012 205 (2009).
[11] J.A.M. Cagigas, D.S. Candela, E. Bagio-Saitovitch. J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 012 134 (2010).
[12] В.С. Покатилов, В.В. Покатилов, А.С. Сигов. ФТТ **51**, 518 (2009).
[13] C. Dearer, N.A. Spaldin. Phys. Rev. B **71**, 060 401 (R) (2005).
[14] M.B. Holcomb, L.W. Martin, A. Scholl, Q. He, P. Yu, C.-H. Yang, S.Y. Yang, P.-A. Glans, M. Valvidares, M. Huijben, J.B. Kortright, J. Guo, Y.-H. Chu, R. Ramesh. Phys. Rev. B **81**, 134 406 (2010).
[15] А.И. Морозов, А.С. Сигов. УФН **180**, 709 (2010).
[16] Г.С. Кринчик, В.Е. Зубов. ЖЭТФ **69**, 707 (1975).
[17] E.M. Maksimova, I.A. Nauhatsky, M.B. Strugatsky, V.E. Zubov. J. Magn. Magn. Mater. **322**, 477 (2010).