

УДК 537.622

©1994

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ И СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ СЛАБЫХ ЗОННЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

А.С.Дунин, В.В.Тугушев

В рамках самосогласованного спин-флуктуационного подхода исследовались магнитные свойства слоистой системы, состоящей из монослоя слабого ферромагнетика на парамагнитной подложке. Рассчитаны температурная зависимость средней намагниченности $\langle M \rangle(T)$ и ее распределение по слоям, обратная восприимчивость $\chi^{-1}(T)$. Найден температура Кюри T_k , а также граница существования ферромагнитного режима T_{\max} ($T_{\max} > T_k$). Показано, что в рамках данной модели фазовый переход является переходом первого рода.

Самосогласованные спин-флуктуационные подходы за последние два десятилетия заняли доминирующее положение в теории зонного магнетизма металлов [1]. Одним из наиболее ранних методов самосогласованного расчета длинноволновых спиновых флуктуаций в слабых (ненасыщенных) магнетиках с коллективизированными электронами является реномировочная теория Мория-Кавабаты [2]. Первоначальный вариант этой теории содержал целый ряд недостатков, в частности неверно был предсказан род ферромагнитного перехода (первый вместо второго). Позднейшая модификация [3] с корректно проведенным самосогласованием гауссовских флуктуаций спиновой плотности устранила вышеуказанный недочет. Подчеркнем, что всюду речь идет только о трехмерных слабых зонных магнетиках, для которых на сегодняшний день проблему описания их магнитных свойств можно в целом считать решенной вполне удовлетворительно.

Гораздо менее оптимистично обстоит дело с построением теории зонного магнетизма (как слабого, так и сильного) неоднородных металлических структур (поверхностей раздела, сэндвичей, монослоев и сверхрешеток). По сути дела в литературе всерьез обсуждалась до настоящего времени только проблема их основного состояния при нулевой температуре с точки зрения обобщенного критерия Стонера-Хаббарда [4,5]. Большое внимание уделялось спин-поляризованным зонным расчетам конкретных приповерхностных структур магнитных переходных металлов (см., например, [6,7]), интерфейсов и монослоев магнитных переходных металлов на немагнитных подложках [8] в рамках стандартной схемы среднего поля. Что касается термодинамики

неоднородных зонных магнетиков, то она в настоящее время практически не разработана. Исключения составляют лишь работы по сильным зонным магнетикам [9], вызывающие целый ряд вопросов и претензий, но формально не относящиеся к обсуждаемой здесь проблематике слабого зонного магнетизма.

Предмет нашей работы в широком смысле можно определить как модификацию самосогласованного спин-флуктуационного подхода типа [2] для неоднородных магнитных систем с коллективизированными электронами. В настоящей статье, однако, мы ограничились лишь первым этапом решения этой проблемы. Именно в рамках полуфеноменологического функционального подхода [10], который можно в известном смысле [1] рассматривать как упрощенный вариант схемы [2], исследуется модельная задача о монослое одноосного ферромагнетика на подложке парамагнетика. Ниже рассчитываются температуры зависимости средней намагниченности $\langle M(T) \rangle$ и среднего квадрата намагниченности $\langle M^2(T) \rangle$ в монослое и подложке (имеется в виду распределение по слоям в глубь объема металла). Определяются характеристики фазового перехода в состояние поверхностного ферромагнетизма (род перехода, температуры Кюри, перегрева и переохлаждения).

Без особых трудностей можно распространить используемый подход и полученные результаты на ситуацию с ферромагнитной подложкой, частным случаем которой (при совпадающих внутрислоевых обменных константах монослоя и подложки) является простейшая модель магнитного упорядочения вблизи свободной поверхности объемного ферромагнетика.

1. Самосогласование гауссовских спиновых флуктуаций в слабом двумерном зонном ферромагнетике

Проиллюстрируем используемую методику самосогласования термодинамических спиновых флуктуаций на простой модели изолированного монослоя слабого одноосного зонного ферромагнетика. В рамках функционального подхода [10] эффективный гамильтониан модели записывается в виде

$$F(M) = \sum_q \alpha_q M_q M_{-q} + \beta \sum_{q, q', q''} M_q M_{-q'} M_{q''} M_{q' - q - q''}, \quad (1)$$

где M — одномерный параметр порядка (намагниченность); q — волновой вектор; коэффициенты α_q , β вычисляются из микроскопических параметров по известным соотношениям [2] и выражаются через обменную константу взаимодействия U , плотность состояний $N(\epsilon)$ и различные ее производные по энергии ϵ вблизи поверхности Ферми металла. Особенность модели (1) состоит в том, что во всем рассматриваемом интервале температур $\alpha_{q=0} < 0$, а $\beta > 0$, причем они практически не зависят от температуры [1]. Эта особенность определяет существенное отличие выражения (1) от стандартного функционала Гинзбурга–Ландау для системы с фазовым переходом второго рода, в котором коэффициент $\alpha_{q=0} \sim (T/T_c^{-1})$ меняет знак в точке перехода T_c .

Рассмотрим вначале парамагнитную ситуацию, когда средняя намагниченность $\langle M \rangle \equiv 0$. Применим, согласно [1], метод аппроксимирующего функционала Φ и построим гауссовскую квадратичную форму исходя из вариационного принципа. Запишем функционал Φ в виде

$$\Phi_p = \sum_q (\alpha_q + A) |M_q|^2 + B\beta \langle M^2 \rangle^2, \quad (2)$$

$$\langle M^2 \rangle = \sum_q \langle |M_q|^2 \rangle,$$

где A и B — коэффициенты, подлежащие определению; $\langle |M_q|^2 \rangle$ — среднеквадратичная флуктуация

$$\langle |M_q|^2 \rangle = \frac{\int |M_q|^2 \exp(-\Phi/T) dM}{\int \exp(-\Phi/T) dM}. \quad (3)$$

Необходимость введения двух коэффициентов A и B станет ясной чуть ниже. Используя условие минимизации свободной энергии для функционала (2) и условие выпуклости, получим очевидное для гауссовской аппроксимирующей формы соотношение

$$A = C\beta \langle M^2 \rangle, \quad B + C = 3. \quad (4)$$

Далее определим выражение для средней индукции. Варьируя функционал F по M и усредняя по гауссовскому распределению, получим

$$\langle B \rangle = 2\alpha_0 \langle M \rangle + 12\beta \langle M^2 \rangle \langle M \rangle. \quad (5)$$

В условиях равновесия $\langle B \rangle = 0$ и для парамагнитной фазы соотношение (5) выполняется тождественно.

Восприимчивость χ_q согласно флуктуационно-диссипационной теореме, определяется из параметров функционала (2) как

$$\chi_q^{-1} = 2(\alpha_q + A), \quad (6)$$

а, согласно соотношению (5), отклик на однородное поле

$$\chi_0^{-1} = 2(\alpha_0 + 6\beta \langle M^2 \rangle). \quad (7)$$

Совпадение выражения (7) с (6) при $q = 0$ достигается, если $A = 6\beta \langle M^2 \rangle$, т.е. при $C = 6$. Отсюда, согласно (4), следует, что $B = -3$.

В ферромагнитной фазе дело обстоит сложнее [3]. Выделяя в функционале (1) среднюю компоненту намагниченности $\langle M \rangle \neq 0$ и полагая $M(\rho) = \langle M \rangle + \delta M(\rho)$, где $\delta M(\rho)$ — флуктуация намагниченности в точке ρ , можно записать аппроксимирующий функционал в виде гауссовской квадратичной формы по δM_q

$$\Phi_f = \alpha_0 \langle M \rangle^2 + \beta \langle M \rangle^4 + \sum_q (\alpha_q + 6\beta \langle M \rangle^2 + A') \delta M_q^2 + B' \beta \langle \delta M^2 \rangle^2, \quad (8)$$

$$C' + B' = 3, \quad A' = C'\beta\langle\delta M^2\rangle.$$

Уравнение для средней индукции имеет вид

$$\langle B \rangle = 2\alpha_0\langle M \rangle + 4\beta\langle M \rangle^3 + 12\beta\langle\delta M^2\rangle\langle M \rangle. \quad (9)$$

Отклик на однородное поле при $\langle M \rangle \neq 0$ определяется так:

$$\chi_0^{-1} = \frac{\partial\langle B \rangle}{\partial\langle M \rangle} = 2\alpha_0 + 12\beta\langle M \rangle^2 + 12\beta\langle\delta M^2\rangle + 12\beta\langle M \rangle \frac{\partial\langle\delta M^2\rangle}{\partial\langle M \rangle}. \quad (10)$$

Сравнивая это соотношение с выражением для восприимчивости, следующим из (8)

$$\chi_q^{-1} = 2[\alpha_q + 6\beta\langle M \rangle^2 + A'], \quad (11)$$

видим, что из условия совпадения (10) с (11) при $q = 0$ следует, что

$$C' = 6 \left[1 + \frac{\langle M \rangle}{\langle\delta M^2\rangle} \frac{\partial\langle\delta M^2\rangle}{\partial\langle M \rangle} \right]. \quad (12)$$

Для нахождения равновесных значений $\langle M \rangle$ и $\langle\delta M^2\rangle$ получаем систему уравнений

$$0 = [\alpha_0 + 2\beta\langle M \rangle^2 + 6\beta\langle\delta M^2\rangle]\langle M \rangle, \quad (13)$$

$$\langle\delta M^2\rangle = T \sum_q \chi_q = \frac{T}{2} \sum_q [\alpha_q + 6\beta\langle M \rangle^2 + A']^{-1}, \quad (14)$$

где A' дается выражением (12). Уравнение (13) следует из (9) при $\langle B \rangle = 0$, а уравнение (14) — из известного вида среднеквадратичной флуктуации для гауссовского функционала (8). В парамагнитной фазе $\langle M \rangle \equiv 0$ и остается только уравнение (14), приобретающее вид

$$\langle M^2 \rangle = \frac{T}{2} \sum_q [\alpha_q + 6\beta\langle M^2 \rangle]^{-1}. \quad (15)$$

Здесь, очевидно, $\langle M^2 \rangle \equiv \langle\delta M^2\rangle$.

Подчеркнем, что дифференциальное уравнение (14) является существенно нелинейным и нахождение функциональной зависимости $\langle\delta M^2\rangle(\langle M \rangle)$ в аналитической форме невозможно. Однако ряд важных выводов о свойствах системы можно сделать сравнительно легко, не прибегая к расчету этой зависимости. Прежде всего проанализируем вопрос о существовании парамагнитного решения с $\langle M \rangle \equiv 0$. Задавая для конкретности зависимость α_q в простейшей форме

$$\alpha_q = \alpha_0 + \gamma q^2, \quad \gamma > 0, \quad (16)$$

после взятия интеграла (15) получаем уравнение

$$\chi_0^{-1} = 2\alpha_0 + \frac{T}{T_0} \ln \frac{W + \chi_0^{-1}}{\chi_0^{-1}}, \quad (17)$$

$$T_0 = 2\pi\gamma/3\beta, \quad W = 2\gamma q_0^2, \quad \alpha_0 = -|\alpha_0| < 0,$$

q_0 — граничный импульс, зависящий, вообще говоря, от T (см. подробнее [1]) и рассчитываемый в микроскопической теории. Уравнение (17) имеет только одно положительное решение при любой температуре T , в чем нетрудно убедиться из элементарного графического анализа. Аналитический вид зависимости $\chi_0^{-1}(T)$ получить не удастся, можно лишь указать асимптотические выражения. При $T \rightarrow 0$ зависимость $\chi_0^{-1}(T)$ экспоненциальна по (T^{-1})

$$\chi_0^{-1}(T) = W \exp(-2|\alpha_0|T_0/T). \quad (18)$$

При высокой температуре ($T/T_0 \gg W, \alpha_0^2/W$)

$$\chi_0^{-1}(T) = (TW/T_0)^{1/2}. \quad (19)$$

Формула (19) имеет чисто формальный характер, так как при столь высокой температуре (порядка энергии Ферми, если иметь в виду реальные значения коэффициентов в функционале (1)) наш подход вообще теряет смысл. В области температур $T \sim |\alpha_0|T_0$, наиболее интересной для рассмотрения, аналитическую зависимость $\chi_0^{-1}(T)$ найти не удастся. Численный расчет, проведенный в следующем разделе, дает форму $\chi_0^{-1}(T)$, близкую к линейной. Итак, парамагнитное решение с $\langle M \rangle \equiv 0$ существует во всей области температур вплоть до $T \rightarrow 0$. С другой стороны, очевидно, что основное состояние при $T = 0$ должно быть ферромагнитным и получается из (13)–(14) тривиально

$$\langle \delta M^2 \rangle(T = 0) = 0, \quad \langle M \rangle(T = 0) = (|\alpha_0|/2\beta)^{1/2}. \quad (20)$$

В трехмерной системе [3] парамагнитное решение становится неустойчивым в точке перехода второго рода, где восприимчивость χ_0^{-1} обращается в нуль и меняет знак. Система уравнений (13)–(14) дает в этом случае решение задачи ниже точки перехода, а уравнение (15) — выше точки перехода. В двумерной системе такого не происходит и оба решения (парамагнитное и ферромагнитное) сосуществуют, как показывает дальнейший анализ, ниже некоторой температуры T_{\max} . Заметим во избежание недоразумений, что речь идет о двумерной системе с одномерным параметром порядка, так что существование упорядоченной фазы в этом случае допустимо при конечной температуре. Однако тип перехода из неупорядоченной фазы в упорядоченную фазу и область существования последней в нашем случае могут быть определены лишь численным расчетом. Забегая вперед, отметим, что как для чисто двумерной, так и для более сложной трехмерной неоднородной приповерхностой структуры переход между ферро- и парамагнитными фазами является переходом первого рода. Таким образом, схема самосогласования спиновых флуктуаций, предложенная в [3] для коррекции [2] и приводящая к фазовому переходу второго рода в изотропной трехмерной системе, в нашем случае оставляет род перехода первым, т.е. таким же, как и в [2].

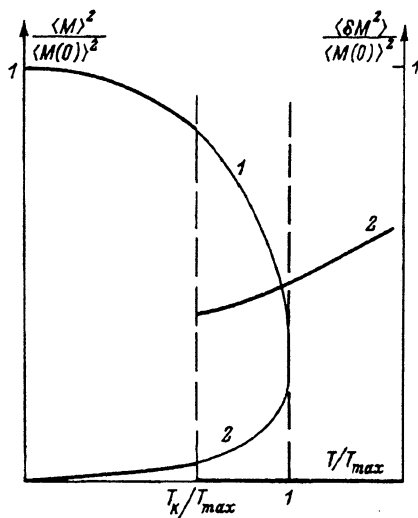


Рис. 1. Температурные зависимости средней намагниченности $\langle M \rangle^2(T)$ (1) и среднего квадрата флуктуаций $\langle \delta M^2 \rangle(T)$ (2).

На рис. 1 представлены зависимости $\langle M \rangle(T)$ и $\langle M^2 \rangle(T)$, рассчитанные численно; T_k — температура Кюри, которая определялась из условия равенства свободных энергий парамагнитной и ферромагнитной фаз; T_{max} — максимальная температура, при которой существует решение с $\langle M \rangle \neq 0$ (температура перегрева). Заметим, что в квазидвумерной системе, как показал анализ, парамагнитное решение устойчиво лишь выше некоторой температуры T_{min} (температура переохлаждения), а в чисто двумерном случае $T_{min} = 0$. Параметры функционала, использованные в расчете, сведены в таблицу.

Кратко остановимся на ситуации почти ферромагнитного монослоя с $\alpha_0 > 0$. Уравнение (17) описывает зависимость $\chi_0^{-1}(T)$ во всей области температур, и формально $\chi_0^{-1}(T) \rightarrow 2\alpha_0 + T\lambda(T)$, где слабая зависимость $\lambda(T)$ связана с зависимостью параметра обрезания $W(T)$. Если принять, следуя [1], $W(T) \sim T^\beta$ (β — численный коэффициент), то получим при $T \rightarrow 0$ температурную зависимость $\chi_0^{-1}(T) - \chi_0^{-1} \sim T \ln T$. Корректный микроскопический расчет $\chi_0^{-1}(T)$ в области малых T в рамках самосогласованной схемы ПХФ требует отдельного рассмотрения и здесь не приводится.

Численные параметры, используемые в расчетах (в первой строке — значения в поверхностном слое, во второй строке — в объемном).

| | α | β | γq_0^2 | J |
|-----|----------|---------|----------------|------|
| S | -1 | 0.05 | 2.5 | -0.3 |
| V | 1 | 0.05 | 2.5 | -0.3 |

2. Термодинамика спиновых флуктуаций в ферромагнитном монослое на парамагнитной подложке

В рамках модели, изложенной в разделе 1, рассмотрим магнитные свойства структуры, состоящей из ферромагнитного монослоя, нанесенного на парамагнитную подложку. Для конкретности имеется в виду грань (100) полубесконечного кристалла кубической симметрии. Параметры эффективного гамильтониана типа (1) зависят от номера слоя (верхний ферромагнитный монослой считаем «нулевым») из-за неоднородности кристаллической структуры и распределения электронной плотности вблизи поверхности кристалла. Рассмотрим для простоты ситуацию, в которой только «нулевой» монослой может спонтанно намагничиваться, тогда как в остальных слоях возможна лишь наведенная внешним источником (индуцированная) намагниченность. Подобная ситуация возможна не только для случая монослоя ферромагнетика, искусственно нанесенного на парамагнитную подложку, но и для собственного почти ферромагнитного материала (типа V), у которого в силу каких-либо структурных и электронных особенностей в приповерхностных слоях выполняется критерий Стонера для поверхностного слоя. Заметим, что теперь (в отличие от раздела 1) ферромагнитное упорядочение является трехмерным (хотя и анизотропным) эффектом и имеется распределение $\langle M \rangle(z, T)$ и $\langle M^2 \rangle(z, T)$ по слоям вдоль оси z , перпендикулярной грани (100).

Запишем эффективный гамильтониан системы в смешанной (импульсно-координатной форме), удобной для последующих расчетов

$$F = F_s + F_v + F_{\text{mix}}. \quad (21)$$

Здесь F_s — гамильтониан (1), коэффициенты которого будем нумеровать индексом s (α_q^s, β^s), описывает ферромагнитный («нулевой») монослой; F_v — гамильтониан ферромагнитной подложки

$$F = \sum_{l,n} \sum_q \dots + \sum_{l,n,d,p=1} \sum_{q,q''} \dots M_q^l M_{-q+q'}^n M_{q''}^d M_{-q''-q'}^p, \quad (22)$$

где l, n, p, d — индексы слоев, параллельных поверхности кристалла; слой с индексом 1 — ближайший к «нулевому» монослою; q — волновой вектор вдоль поверхности. Коэффициенты α_q^{ln} и β^{lndp} выберем в простейшей форме, учитывающей только внутрислоевое взаимодействие в слагаемых второго и четвертого порядка, а ближайших слоев — только в слагаемых второго порядка

$$\beta^{lndp} = \beta^v \delta_{ln} \delta_{dp} \delta_{lp},$$

$$\alpha_q^{ln} = \alpha_q \delta_{ln} + J^v / 2 \delta_{ln \pm 1}. \quad (23)$$

Далее считаем

$$\alpha_q^v > 0, \quad J^v < 0, \quad \beta^v > 0.$$

Гамильтониан взаимодействия монослоя с подложкой имеет вид

$$F_{\text{mix}} = \sum_{l=1;q}^{\infty} J_l M_q^s M_q^l, \quad (24)$$

и в приближении взаимодействия с ближайшим слоем будем считать $J_l = J\delta_{l1}$. Заметим, что в случае следующего выбора коэффициентов $\alpha_q^s = \alpha_q^v$, $J^v = J$, $\beta^v = \beta^s$ мы фактически имеем гамильтониан полубесконечного кристалла с идеальной поверхностью (параметры поверхностного слоя совпадают с объемными).

Применим метод аппроксимирующего функционала по аналогии с использованным в предыдущем разделе. Для парамагнитной фазы (с нулевой средней намагниченностью во всех слоях) соответствующая гауссовская квадратичная форма имеет вид

$$\Phi_p = \Phi_{p(s)} + \Phi_{p(v)} + F_{p(\text{mix})}, \quad (25)$$

$$\Phi_{p(s)} = \sum_q (\alpha_q^s + A_q^v) |M_q^s|^2 + B^s \beta^s \langle (M^s)^2 \rangle^2, \quad (26)$$

$$\Phi_{p(v)} = \sum_{l=1;q}^{\infty} [(\alpha_q^v + A_l^v) |M_q^l|^2 + J^v M_q^l M_q^{l\pm 1} + B^v \beta^v \langle (M^l)^2 \rangle^2], \quad (27)$$

$$\Phi_{p(\text{mix})} = \sum_q J M_q^s M_{-q}^1. \quad (28)$$

Как и раньше, соотношения между коэффициентами A и B следующие:

$$\begin{aligned} A^s &= C^s \beta^s \langle (M^s)^2 \rangle, & B^s + C^s &= 3, \\ A^v &= C^v \beta^v \langle (M^l)^2 \rangle, & B^v + C^v &= 3. \end{aligned} \quad (29)$$

Вводя матрицу обратных восприимчивостей

$$(\chi_q^{-1})_{pl} = \frac{\partial \langle B_q \rangle^p}{\partial M_{-q}^l} \quad (30)$$

по индексам слоев p, l и используя условие самосогласованности для $(\chi_0)^{-1}$ на нулевом векторе q , получим для парамагнитной фазы почти очевидные соотношения

$$C^s = C^v = 6, \quad B^v = B^s = -3.$$

Явные выражения для $\langle (M^s)^2 \rangle$ и $\langle (M^l)^2 \rangle$ получить аналитически точно в замкнутом виде не удастся, поскольку для этого необходимо рассчитать матрицу восприимчивостей χ_q для бесконечного числа слоев, т.е. найти матрицу, обратную матрице $(\chi_q^{-1})_{pl}$, имеющей вид

$$(\chi_q^{-1})_{ss} = 2(\alpha_q^s + A^s), \quad (\chi_q^{-1})_{s1} = (\chi_q^{-1})_{1s} = J, \quad (31)$$

$$(\chi_q^{-1})_{ll} = (2\alpha_q^v + A_l^v), \quad (\chi_q^{-1})_{ll+1} = (\chi_q^{-1}) = J^v. \quad (32)$$

Символически система уравнений самосогласования для среднеквадратичных флуктуаций записывается в виде

$$\begin{aligned} \langle (M^s)^2 \rangle &= T \sum_q (\chi_q)_{ss}, \\ \langle (M^l)^2 \rangle &= T \sum_q (\chi_q)_{ll}. \end{aligned} \quad (33)$$

Реальный способ расчета $\langle (M^s)^2 \rangle$ и $\langle (M^l)^2 \rangle$ состоит в замене бесконечной суммы (27) на конечную с некоторым граничным значением N_{\max} и в аппроксимации корреляторов с высокими индексами $l > N_{\max}$ в оставшейся части функционала их объемными значениями. Эта процедура весьма громоздка и содержит ряд тонкостей, которые мы в целях экономии места опускаем. Выбор N_{\max} определяется задаваемой точностью численного расчета (качественно требуется, чтобы $|\langle (M_{\max}^N)^2 \rangle - \langle M_v^2 \rangle| / \langle M_v^2 \rangle \ll 1$, где $\langle M_v^2 \rangle$ — объемное значение среднеквадратичной намагниченности). Ясно, что подобный метод может быть эффективно использован лишь для слабой связи монослоя с подложкой (качественный критерий этой слабости $J^2/4\alpha_0^v \ll |\alpha_0^s|$).

В итоге задача сводится к рассмотрению функционала

$$\Phi_{(p)}(N_{\max}) = \Phi_{s(p)} + \Phi_{v(p)}(N_{\max}) + \Phi_{\text{mix}(p)}, \quad (34)$$

где $\Phi_{s(p)}$ и $\Phi_{\text{mix}(p)}$ — те же, что и в (26)–(28), а

$$\begin{aligned} \Phi_{v(p)}(N_{\max}) &= \sum_{l=1; q}^{N_{\max}-1} \{(\alpha_q^v + A_l^v)|M_q^l|^2 + J^v M_q^l M_{-q}^{l+1}\} (1 - \delta_{N_{\max} 1}) + \\ &+ \sum_q (\tilde{\alpha}_q + A_{N_{\max}}^v - A_\infty^v) |M_q^{N_{\max}}|^2 + \sum_{l=1}^{N_{\max}} B^v \beta^v \langle (M^l)^2 \rangle^2, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\tilde{\alpha}_q = \frac{\alpha_q^\infty}{2} \left[1 + \left(1 - \frac{(J^v)^2}{4\alpha_q^\infty} \right)^{1/2} \right], \quad (36)$$

$$\alpha_q^\infty = \alpha_q^v + A_\infty^v, \quad A_\infty^v = 6\beta^v \langle M^2 \rangle_\infty, \quad (37)$$

где $\langle M^2 \rangle_\infty$ — объемное значение среднеквадратичной флуктуации $\langle (M^l)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle_\infty$ при $l > N_{\max}$. Влияние слагаемых с $l > N_{\max}$ сводится, таким образом, к перенормировке коэффициента при $|M_q^{N_{\max}}|^2$ в функционале (34).

Для ферромагнитного режима, характеризуемого отличными от нуля средними $\langle M^l \rangle \neq 0$, аппроксимирующий функционал записывается в виде

$$\bar{\Phi}_f = \bar{\Phi}_f + \delta \Phi_f, \quad (38)$$

где $\bar{\Phi}_f$ — среднеполевая часть

$$\bar{\Phi}_f = \sum_{l=1}^{\infty} [\alpha_0^v \langle M^l \rangle^2 + J^v \langle M^l \rangle \langle M^{l+1} \rangle + \beta^v \langle M^l \rangle^4] + \alpha_0^s \langle M^s \rangle^2 + J \langle M^s \rangle \langle M^l \rangle, \quad (39)$$

а $\delta\Phi_f$ — флуктуационная часть

$$\delta\bar{\Phi}_f = \delta\Phi_{f(s)} + \delta\Phi_{f(v)} + \delta\Phi_{f(\text{mix})},$$

$$\delta\Phi_{f(s)} = \sum_q [\alpha_q^s + 6\beta^s \langle M^s \rangle^2 + A^{s'}] |\delta M_q^s|^2 + B^{s'} \beta^s \langle (\delta M^s)^2 \rangle^2, \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \delta\Phi_{f(v)} = \sum_{l=1, q}^{\infty} \{ [\alpha_q^v + 6\beta^v \langle M^l \rangle^2 + A_l^{v'}] |\delta M_q^l|^2 + J^v \delta M_q^l \delta M_{-q}^{l+1} \} + \\ + \sum_{l=1}^{\infty} B_l^{v'} \beta^v \langle (\delta M^l)^2 \rangle^2, \end{aligned} \quad (41)$$

$$\delta\Phi_{f(\text{mix})} = J \sum_q \delta M_q^s \delta M_{-q}^l. \quad (42)$$

Связь между коэффициентами A' и B' следующая:

$$\begin{aligned} A^{s'} &= C^{s'} \beta^s \langle (\delta M^s)^2 \rangle, \quad C^{s'} + B^{s'} = 3, \\ C^{s'} &= 6 \left[1 + \frac{\langle M^s \rangle}{\langle (\delta M^s)^2 \rangle} \frac{\partial \langle (\delta M^s)^2 \rangle}{\partial \langle M^s \rangle} \right], \\ A_l^{v'} &= C_l^{v'} \beta^v \langle (\delta M^l)^2 \rangle, \quad C_l^{v'} + B_l^{v'} = 3, \\ C_l^{v'} &= 6 \left[1 + \frac{\langle M^l \rangle}{\langle (\delta M^l)^2 \rangle} \frac{\partial \langle (\delta M^l)^2 \rangle}{\partial \langle M^l \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (43)$$

Расчет величин $\langle M^s \rangle$, $\langle M^l \rangle$, $\langle (\delta M^s)^2 \rangle$ проводится путем решения системы уравнений самосогласования, получаемых аналогично (13) и (14)

$$\begin{aligned} 0 &= [\alpha_0^v + 2\beta^v \langle M^l \rangle^2 + 6\beta^v \langle (\delta M^l)^2 \rangle] \langle M^l \rangle + \frac{J^v}{2} [\langle M^{l+1} \rangle + \langle M^{l-1} \rangle], \quad l > 1 \\ 0 &= [\alpha_0^v + 2\beta^v \langle M^l \rangle^2 + 6\beta^v \langle (\delta M^l)^2 \rangle] \langle M^l \rangle + \frac{J^v}{2} [\langle M^2 \rangle + \langle M^s \rangle], \\ 0 &= [\alpha_0^v + 2\beta^s \langle M^s \rangle^2 + 6\beta^s \langle (\delta M^s)^2 \rangle] \langle M^s \rangle + \frac{J}{2} \langle M^l \rangle, \end{aligned} \quad (44)$$

$$\langle (\delta M^l)^2 \rangle = T \sum_q (\chi_q)_{ll}, \quad \langle (\delta M^s)^2 \rangle = T \sum_q (\chi_q)_{ss}, \quad (45)$$

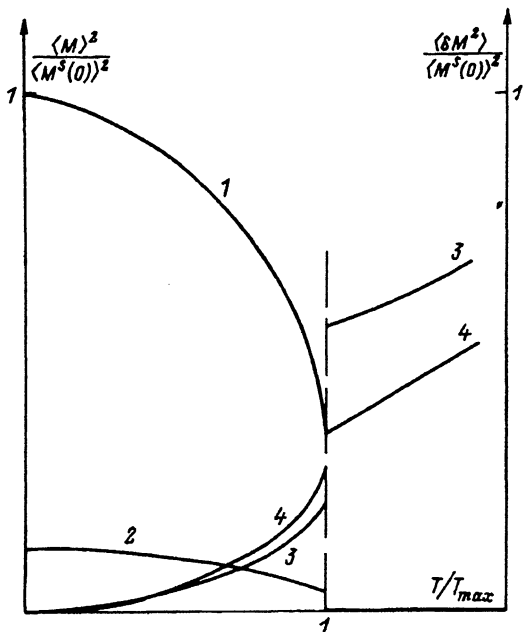


Рис. 2. Температурные зависимости средней намагниченности на поверхностном слое $\langle M^s \rangle^2(T)$ (1), на ближайшем к поверхности $\langle M^l \rangle^2(T)$ (2), среднего квадрата намагниченности на поверхностном слое $\langle (\delta M^s)^2 \rangle(T)$ (3), на ближайшем к поверхности $\langle (\delta M^l)^2 \rangle(T)$ (4).

$\langle M^s(0) \rangle^2$ — средняя намагниченность на поверхностном слое при $T = 0$.

где $\hat{\chi}_q$ — матрица восприимчивостей, обратная матрице $(\hat{\chi}_q^{-1})$ по словесным индексам

$$(\chi_q^{-1})_{ss} = 2[\alpha_q^s + 6\beta^s \langle M^s \rangle^2 + A^{s'}],$$

$$(\chi_q^{-1})_{ll} = 2[\alpha_q^l + 6\beta^l \langle M^l \rangle^2 + A^{l'}],$$

$$(\chi_q^{-1})_{s1} = (\chi_q^{-1})_{1s} = J, \quad (\chi_q^{-1})_{ll+1} = (\chi_q^{-1})_{l+1l} = J^v. \quad (46)$$

Процедура обрезания бесконечной суммы и аппроксимации функционала конечной суммой полностью аналогична процедуре для парамагнитного случая, так как по условию задачи в объеме $\langle M^l \rangle \equiv 0$ и $\langle (\delta M^l)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle_\infty$, т.е. подложка не может быть ферромагнитной.

На рис. 2 представлены температурные зависимости $\langle M^s \rangle$, $\langle M^l \rangle$, $\langle (M^s)^2 \rangle$ и $\langle (M^l)^2 \rangle$ для простейшего приближения «жесткой» парамагнитной подложки ($N_{max} = 1$). Параметры монослоя те же, что и раньше. Параметры подложки приведены во второй строке таблицы. Расчеты с $N_{max} = 2$ также были проведены и для выбранных параметров отклонения от случая с $N_{max} = 1$ оказались весьма незначительными. Более сложные расчеты с $N_{max} > 2$ не проводились.

Таким образом, к сожалению, остается открытым вопрос: в какой мере вывод о том, что фазовый переход в ферромагнитном монослое является переходом первого рода, связан с выбором аппроксимации? Авторы отдают себе в этом отчет. Качественный анализ показал, что

и для квазидвумерной модели с малой дисперсией α_q вдоль оси, нормальной к плоскости, вывод о первом роде перехода сохраняется, так как имеется область неоднозначности решения для $\langle M \rangle$ и $\langle \delta M^2 \rangle$ в некоторой области температур. В то же время парамагнитное решение существует не при любой температуре, как в чисто двумерном случае, а лишь при $T > T_K^*$, где $T_K^* \sim (\ln \gamma / \gamma_{\perp})^{-1} \rightarrow 0$ в меру усиления поперечной анизотропии ($\gamma / \gamma_{\perp} \rightarrow \infty$ в чисто двумерной системе). При $T < T_K^*$ парамагнитная восприимчивость становится отрицательной, а решение с $\langle M \rangle \equiv 0$ абсолютно неустойчивым. Только в изотропной трехмерной модели неоднозначность решений в уравнениях для $\langle M \rangle$ и $\langle \delta M^2 \rangle$ пропадает, и переход происходит вторым родом, как указано в [3].

Приближенный метод расчета с введением максимального номера слоя N_{\max} , используемый в разделе 2, справедлив только в случае достаточно «жесткой» (относительно возможно спонтанного перехода в ферромагнитную фазу) подложки. Если же корреляционная длина спиновых флуктуаций в подложке (а именно она определяет выбор N_{\max}) достаточно велика (десятки и сотни слоев), т.е. система является «мягкой», данный метод расчета становится неэффективным.

Работа частично поддержана грантом Фонда Сороса, выделенным Американским физическим обществом.

Список литературы

- [1] Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М., 1988.
- [2] Moriya T., Kawabata A. // J. Phys. Soc. Japan. 1973. V. 34. P. 639; 1973. V. 35. P. 669.
- [3] Lonzarich G., Taillefer L. // J. Phys. C. 1985. V. 18. P. 4339–4371.
- [4] Борман В.Д., Максимов Л.А., Попов А.П. // ЖЭТФ, 1986. Т. 90. № 2. С. 697.
- [5] Allan G. Magnetic properties of low-dimensional systems / Ed. L.M. Falicov and F.L. Moran-Lopez. Springer, 1986. P. 2–9.
- [6] Mathon F. // Rep. Progr. Phys. 1988. V. 51. N 1. P. 1–56.
- [7] Bennemann K.H. // [5]. P. 10–15.
- [8] Freeman A.J., Fu C.L. // [5]. P. 16–24.
- [9] Hasegawa H. // J. Phys. F. 1986. V. 16. P. 347.
- [10] Murata K.K., Doniach S. // Phys. Rev. 1972. V. 29. P. 285.

РНИЦ «Курчатовский институт»
Москва

Поступило в Редакцию
12 июля 1993 г.