

УДК 538.1

©1995

СПИНОВАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И ДИНАМИКА СЛОИСТЫХ ПЛЕНОК ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

А.И.Мицек, В.Н.Пушкарь

Институт металлофизики Академии наук Украины,
252680, Киев, Украина
(Поступила в Редакцию 22 февраля 1994 г.
В окончательной редакции 26 июля 1994 г.)

Методом многоэлектронных операторных спинов для локализованных состояний переходных ионов рассчитывается неоднородная поляризация s ; монослоев j немагнитных субпленок в ферромагнитных сверхрешетках. Ближний и дальний обмен получается как составляющая ковалентной связи ионов с одинаковыми (n) или разными числами ковалентных d -дырок. Немонотонна зависимость энергии связи $E_{in}(N)$ от числа N моноатомных слоев в немагнитной субплентке. Спектры магнонов, ФМР и АФМР расщепляются на величины $\sim E_{in}$. Рассматривается кроссинг объемных и поверхностных на интерфейсе ветвей магнонов. Вклад поляризации s ; в намагниченность сверхрешетки $M(T)$ важен при $T < T_1 \sim A_1/k_B$, где A_1 — параметр обмена через интерфейс. Зависимость $M(T)$ имеет аномалии вблизи T_1 и при $T \sim T_c/N_j^2$, где N_j^2 — число моноатомных слоев в ферромагнитной субплентке.

Тонкие ферромагнитные (ФМ) слои (субплентки), разделенные немагнитными, образуют широкий класс материалов [1–6]. Основные электротехнические параметры зависят от природы немагнитной субплентки. Если она содержит переходные элементы $3d$ -(Cu, Cr, ...), $5d$ -(Pt, ...) и других групп, ее обменная и магнитная жесткость определяются составом и структурой немагнитной субплентки. Чем тоньше субплентки (до 1 nm), тем большую роль играет состояние интерфейса. Его окрестность — сплав составляющих субпленток, поэтому в общем случае ее следует рассматривать как добавочную субплентку. Ее описание не укладывается в общепринятую модель плоских моноатомных слоев. В случае ГПК-субпленток данную модель можно обосновать, когда монослой плотно упакованы. Проблема усложняется для рыхлых решеток, упорядочивающихся сплавов и т.п.

Роль интерфейса различна в следующих случаях: 1) когда параметры плотноупакованных монослоев решеток субпленток мало отличаются; 2) субплентки имеют более рыхлые решетки (ОПК и др.); 3) когда симметрия субпленток различна. В рыхлых решетках (случай 2) окрестность интерфейса имеет заметную толщину и может рассматриваться как третья фаза (субплентка). Стыковка субпленток разной симметрии в случае 3 должна приводить к напряжениям на интерфейсе.

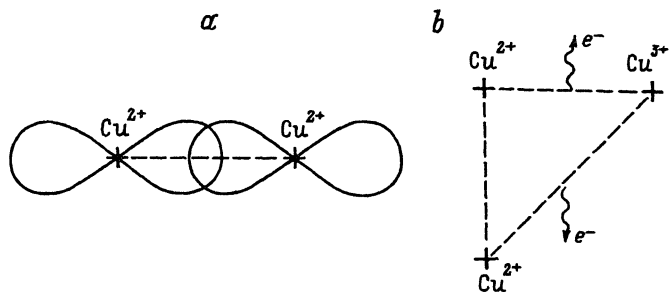


Рис. 1. Квазихимическая модель ковалентного взаимодействия 3d-электронов для ионов с одинаковым их числом (n) (а) и взаимодействие 3d-ионов с разными $n = 1$ и $p = 2$ числами ковалентных 3d-дырок (б).

Химические и обменные связи на интерфейсах разных типов должны моделироваться по-разному. В простейшем случае 1 можно рассматривать обрыв химических и обменных связей между магнитными ионами (локализованными спинами) и их замену на связи между разными (магнитными и немагнитными) ионами.

В этой статье мы ограничимся изложением теории обменных и ковалентных связей между субплёнками (Co и Cu, Pt) с одинаковыми ГЦК-решётками (случай 1), детально остановимся на взаимодействиях между немагнитными ионами, учтём спиновую часть ковалентного взаимодействия. Предполагаем переменную валентность ионов Cu. Взаимодействие между ионами с одинаковым числом n ковалентных электронов близкодействующее. Оно возникает в результате перекрытия 3d- (или 5d-) волновых функций соседних ионов (рис. 1,а). Ионы с разными числами $n \neq n'$ ковалентных электронов (например, Cu^{2+} и Cu^{3+}) взаимодействуют через коллективные электроны (рис. 1,б). Оно оказывается дальнедействующим. Его зависящая от спина часть приводит к осциллирующему обмену.

Форму дальнедействующего обмена (раздел 1) мы моделируем в разделе 2 и решаем задачу о неоднородности спиновых моментов в немагнитной субплёнке. Распределение симметрично при ФМ и антисимметрично при антиферромагнитном (АФМ) основном состоянии чередующихся ФМ-субплёнок. Зависимость эффективной обменной энергии между ФМ-субплёнками E_{in} от числа N немагнитных монослоев выражается через параметры квазихимической связи $\hat{\Gamma}$. Зависимость от флуктуаций химических связей (ФХС) входит через перенормировку параметров $\hat{\Gamma}$.

Спектры ФМР (АФМР) и магнонов $E(k)$ рассчитываются в разделе 3 из спиновых гамильтонианов, полученных по принципу соответствия для обменной энергии раздела 1. Прямое обменное взаимодействие между магнитными (Co) и немагнитными (Cu, Pt) ионами в окрестности интерфейса определяет высокочастотную часть спектров. Обосновываются спектроскопические методы исследования интерфейса (комбинационного рассеяния и т.п.). Температурные зависимости магнитных характеристик получаем в виде разложений по $1/N_f$ в разделе 4 (аналогичные зависимости для T_c). Результаты позволяют с единых позиций интерпретировать данные эксперимента и свойства сверхрешеток.

1. Магнетохимия переходного металла. Спинорная волновая функция

Разнообразие химических связей металла требует детализации его электронной структуры. Разделим электронную систему на три подсистемы: первая образует ферми-газ (или ферми-жидкость при учете корреляционных эффектов) коллективных электронов; вторая и третья подсистемы локализованы в области ионного остова. Магнитные электроны образуют спин S остова.

Ферми-газ электронов (дырок) описываем амплитудами $f_{k\sigma}^+$ вторичного квантования (k — волновой вектор, σ — спин фермиона). Магнитные d -электроны описываем многоэлектронными операторными спинорами (МЭОС) [7]. МЭОС факторизованы по одноэлектронным ферми-операторам $a_{r\mu\sigma}^+$ d -электронов (дырок) в узлах решетки r и орбитальном состоянии μ . Спин иона S . По первому правилу Хунда в незаполненной d -оболочке иона имеем $2S$ магнитных фермионов. Тогда МЭОС имеет вид

$$\hat{D}_r^S = \{D_{r\sigma}^S\}, \quad D_{r\sigma}^S = c_{r\sigma} d_{r\sigma}^S, \quad d_{r\sigma}^S = (\bar{d}_{r\sigma}^S)^+ = \prod_{\mu=1}^{2S} a_{r\mu\sigma}^+. \quad (1)$$

Волновым функциям (1) соответствуют операторы заряда

$$\{N_{r\sigma}^S\}, \quad N_{r\sigma}^S = |c_{r\sigma}|^2 d_{r\sigma}^S \bar{d}_{r\sigma}^S, \quad \sum_{\sigma} |c_{r\sigma}|^2 = 1 \quad (2)$$

и операторы изменения знака спина (обобщенные операторы Хаббарда)

$$X_r^{\sigma\sigma'} = D_{r\sigma}^S \bar{D}_{r\sigma'}^S = c_{r\sigma} c_{r\sigma'}^+ d_{r\sigma}^S \bar{d}_{r\sigma'}^S, \quad (3)$$

билинейные по коэффициентам спинового смешивания $c_{r\sigma}$.

Для полного определения R -пространства, в котором действуют МЭОС и определены правила их умножения и сложения (1)–(3), требуется задание соотношений коммутации МЭОС. Определяющую роль здесь играет условие локальности фермионов

$$a_P^+ a_P = 1 = d_{r\sigma}^S \bar{d}_{r\sigma}^S = D_{r\sigma}^S \bar{D}_{r\sigma}^S, \quad S_r = 2S \sum_{\sigma} |c_{r\sigma}|^2, \quad (4)$$

которое обобщает метод локальных электронов Боголюбова. Теперь МЭОС подчиняются точным коммутационным соотношениям

$$[d_{r\sigma}^S, d_{r'\sigma'}^S]_{+,-} = \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5)$$

для целых (–) или полупелых (+) S , что полностью определяет пространства Фока для МЭОС. В этих R -пространствах точно диагонализуются бинарные квазихимические гамильтонианы (см. [8]).

В условиях переменной валентности элементов $3d$ - ($5d$ -) групп предполагается, что часть d -фермионов (n) участвует в гомеоплярной связи. Для них аналогично (1) вводим ковалентные МЭОС

$$\hat{D}_{\mathbf{r}}^n = \{D_{\mathbf{r}\sigma}^n\}, \quad D_{\mathbf{r}\sigma}^n = c_{\mathbf{r}\sigma} d_{\mathbf{r}\sigma}^n, \quad 2S + n = n_1, \quad d_{\mathbf{r}\sigma}^n = \prod_{\mu}^n a_{\mathbf{r}\mu\sigma}^+ \quad (6)$$

Здесь $(2S + 1) \leq \mu \leq n_1$, где n_1 — полное число фермионов в незаполненной d -оболочке иона. Это $3d$ -электроны (для легких) или $3d$ -дырки (для тяжелых ионов группы Fe). Имеем $n_1 = 4$ (для Fe^{2+}), 3 (Co^{2+}), 2 (Ni^{2+}) или 1 (Cu^{2+}) и т.д. Числа ковалентных дырок $n = 2$ (для Fe^{2+}) или 1 (для ионов Co, Ni). При условии локальности (4) соотношения (5) применимы для R -пространств Фока, в которых действуют ковалентные МЭОС (6).

Условие локальности (4) позволяет также обобщить теорию Хольстейна–Примакова для локальных магнитных электронов на $S \geq 1$. Разделяем пространства: координатные R -пространства Фока (для МЭОС $d_{\mathbf{r}\sigma}^S$ и $d_{\mathbf{r}\sigma}^n$) и спиновые S -пространства, в которых определены операторы $c_{\mathbf{r}\sigma}$. На S -пространстве проектируем компоненты $S_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ спиновых операторов ($\alpha = -, +, z$). В них определяем соотношения коммутации для спиновых амплитуд

$$[c_{\mathbf{r}\sigma}, c_{\mathbf{r}\sigma'}^+]_+ = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (7)$$

Теперь можем в S -пространстве ввести обобщенное представление Хольстейна–Примакова

$$S_{\mathbf{r}}^z = 2S \sum \sigma c_{\mathbf{r}\sigma} c_{\mathbf{r}\sigma}^+, \quad S_{\mathbf{r}}^+ = \sqrt{2S} c_{\mathbf{r}+} c_{\mathbf{r}-}^+, \quad X_{\mathbf{r}}^{+-} = S_{\mathbf{r}}^+ d_{\mathbf{r}+}^S d_{\mathbf{r}-}^S, \quad (8)$$

что далее позволит рассмотреть спиновую динамику.

Вариационные расчеты магнитных моментов проводим в классическом приближении. Для ковалентной подсистемы фермионов воспользуемся принципом соответствия классических и квантовых состояний. Спиновые коэффициенты $c_{\mathbf{r}\sigma}$ из (6) при расчете фазовых диаграмм рассматриваем как классические функции и ограничиваемся приближением среднего поля [9]. На основе первого правила Хунда имеем целочисленные значения $2S = 2$ (для Fe^{2+} и Co^{2+}), 3 (Fe^{3+}) или 1 (Ni^{2+} и Cu^{2+}). В данной теории дробность моментов возникает прежде всего как результат подмагничивания ковалентных фермионов. Внутрионный обмен между S - и n -дырками имеет разный знак для ОПК-Fe (+), т.е. ФМ, и ГПК-Co, Ni (-).

Проиллюстрируем метод на примере ковалентного вклада $s_{\mathbf{r}}$ в момент $3d$ -иона. Следуя Андерсону, вводим кулоновскую энергию как функционал зарядов (2)

$$H^C(\mathbf{r}) = \sum Q^{\sigma\sigma'} N_{\mathbf{r}\sigma}^n N_{\mathbf{r}\sigma'}^n, \quad Q^{\sigma\sigma'} = Q, \quad Q^{+-} = V, \quad (9)$$

а хундовский обмен как

$$H^{\text{ex}} = -A_i S_{\mathbf{r}} s_{\mathbf{r}}, \quad |c_{\mathbf{r}\sigma}|^2 = \frac{1}{2}(1 + 2\sigma s_{\mathbf{r}}). \quad (10)$$

Варьируем сумму (9), (10) по s_r и получаем

$$s_r = (A_i/K)S_r, \quad K = Q - (V/2), \quad s_r \parallel S_r, \quad |A_i| \ll K. \quad (11)$$

Оценим результат (11). Обычно полагают $|A_i|/K \sim 0.1$, что дает $s_r \sim 0.1$. Это согласуется обозначением момента $2.2\mu_B$ для ОЦК-Fe ($A_i > 0$) или 1.8 для ГЦК-Co ($A_i < 0$). В сплавах Co-(Pt, Pd) аналогично рассматриваем поляризацию $5d$ -электронов s_r . Получаем ее в форме (11) за счет межзонного обмена Co-Pt (параметр A), куда входит спин S_r иона Co^{2+} (см. далее).

2. Поляризация немагнитной субплемки

Обобщим (11) и рассчитаем неоднородную спиновую поляризацию s_r немагнитной (Pt) субплемки, помещенной между двумя ФМ-субплемками (Co). Ее моноатомные слои, параллельные поверхности пленки, нумеруем индексом $1 \leq j \leq N$. Нескомпенсированные спины Co-субплемки S_{-1} и S_{N+1} на интерфейсах поляризуют спины s_j соседствующих с ними монослоев Pt. Обмен между ними имеет вид

$$H_s^{ex} = -A(S_{-1}s_1 + s_N S_{N+1}). \quad (12)$$

Количественно исследуем случай одинаковых ФМ-субплемок.

В случае ФМ-связи $S_{N+1} \uparrow \uparrow S_{-1} \uparrow \uparrow s_j$. При АФМ-связи (поле $H = 0$) спины $S_{N+1} \uparrow \downarrow S_{-1}$. Полагаем $S_{N+1} = -S_{-1}$, тогда знаки s_j будут зависеть от j . Квазихимический гамильтониан в билинейном по МЭОС приближении имеет вид

$$H_{ch} = - \sum \Gamma_{np} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) D_{r\sigma}^n (f_{r\sigma}^+)^{p-n} \bar{D}_{r\sigma}^p, \quad p \geq n. \quad (13)$$

Для одинаковых ионов $n = p$. Подставляя (10) в (13) и усредняя по ФХС [9], разлагаем получившуюся квазихимическую энергию по s_r . Квадратичное приближение дает

$$F_{ch}^{nn} = F_{ch}(0) + \Gamma \sum s_j s_{j\pm 1} + \dots \quad (14)$$

Близкодействующий обмен спинов внутри моноатомной плоскости также имеет вид (14). Учет взаимодействия в этой плоскости представляет самостоятельную проблему.

Дальнодействующий обмен получаем из (13) для $n \neq p$. Вид дальнодействующего обменного интеграла $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ моделируем, следуя модели РККИ. Общее выражение для дальней (l) обменной энергии есть

$$F_i^{ex} = \sum J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) s_r s_{r'} \rightarrow \sum J(p) s_j s_{j+p}, \quad J(p) = (-1)^p J/p^2 \quad (15)$$

с параметром $J(p)$ переменного знака. Плоскостная симметрия позволяет предположить, что величина s_j усредняется и не зависит от n . Для количественных расчетов берем зависимость $J(p)$ в виде РККИ (15). Добавляя к (12)–(15) кулоновскую энергию (9), вариационным

методом находим зависимость $s_j(j)$. Конкуренция ФМ ближнего и знакопеременного дальнего обмена приводит к зависимости энергии связи $E_{in}(N)$; s_j ограничен сверху величиной (11). Суммарную энергию ФМ- или АФМ-состояний сверхрешетки рассчитываем, вводя знаки + или - для S_{N+1} .

Вариационные уравнения

$$\partial F / \partial s_j = K s_j - \Gamma(s_{j+1} + s_{j-1}) + \sum J(p) s_{j+p} - \tilde{A}(\delta_{j1} \pm \delta_{jN}) = 0, \quad \tilde{A} = AS \quad (16)$$

решаем в матричной форме. Ограничиваемся точностью $\sim J_p^2$. Отметим предельный случай слабого дальнего обмена $J \ll \Gamma$, который, возможно, реализуется в субпенке Pt. Здесь выгодной оказывается ФМ-конфигурация

$$s_j \cong (A/K)(\Gamma/K)^{j-1} > 0, \quad (\Gamma/K)^{N/2} > (J/K)(2/N)^3. \quad (17)$$

Неравенство (17) означает наличие критической толщины немагнитной субпенки N_{cr} : при $N > N_{cr}$ возможна АФМ-конфигурация ФМ-субпенек. Мы оцениваем $N_{cr} \leq 10$ при $3J < \Gamma < 0.3K$.

Для $N = 1$ решения (16) резко различны в ФМ- (+) или АФМ- (-) случаях:

$$s_1 = 2\tilde{A}/K \quad \text{или} \quad s_1 = 0 \quad (18)$$

при ФМ- или АФМ-конфигурации соответственно. Энергии состояний (+) или (-) при $N = 1$ равны

$$\Phi^+ = -2\tilde{A}^2/K \quad \text{или} \quad \Phi^- = 0. \quad (19)$$

Отсюда следует, что выгодна ФМ-связь субпенек. В случае $N = 2$

$$s_1^{+,-} = \tilde{A}/(K \pm J) = \pm s_2^{+,-}, \quad \Phi^{+,-} = -\tilde{A}^2/(K \pm J). \quad (20)$$

Важен знак энергии связи ФМ-субпенек $E_{in}(N)$, поэтому определим ее как разность

$$E_{in}(2) = \Phi^+ - \Phi^- = 2\tilde{A}^2\tilde{J}/(K^2 - \tilde{J}^2), \quad \tilde{J} = \Gamma - J > 0. \quad (21)$$

Итак, приходим к выводу о том, что знак связи определяется соотношением энергий химического (ближнего) Γ и обменного (дальнего) J взаимодействий. При $\Gamma > J$ для $N = 2$ выгодна ФМ-конфигурация субпенек ($E_{in}(2) < 0$).

В случае $N = 3$ имеем

$$s_1^{+,-} \cong (\tilde{A}/K) \left\{ 1 \mp (J_2/K) - 2(\tilde{J}/K) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} = \pm s_3^{+,-}, \quad s_2^{+,-} \cong -(A\tilde{J}/K^2) \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

и энергии ФМ- (+) и АФМ- (-) конфигураций

$$\Phi^{+,-} = -(\tilde{A}/K)^2 \left\{ K + (\tilde{J}^2/K)(1 \mp J_2/K) \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \pm J_2 \right\}, \quad (23)$$

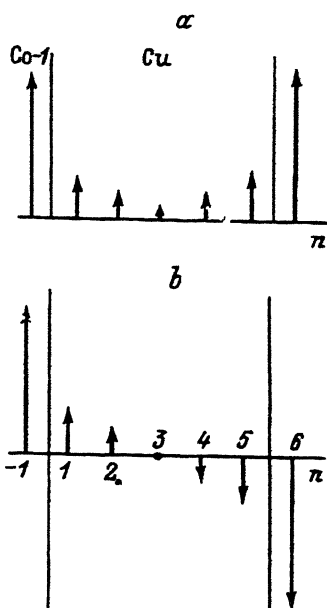
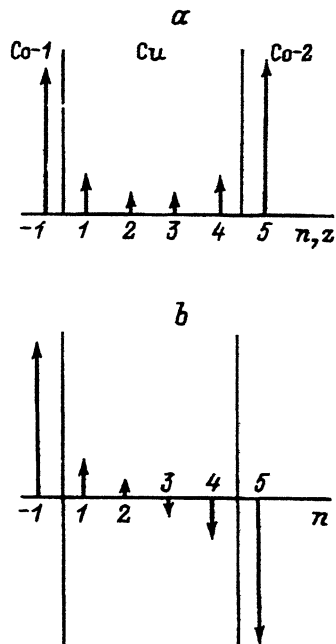


Рис. 2. Распределение спиновой полярizations (стрелки) в немагнитной суббленке Cu с четным $N = 4$ числом моноатомных слоев для ферромагнитной (а) и для антиферромагнитной (б) конфигурации намагниченностей ФМ-суббленок.

Рис. 3. То же, что на рис. 2, для нечетного ($N = 5$) числа моноатомных слоев.

а энергия связи

$$E_{in}(3) = 2(\tilde{A}/K)^2 \left\{ -(\tilde{J}^2/K) + J_2 \right\}. \quad (24)$$

Согласно неравенству (21), имеем $E_{in}(3) > 0$, т.е. АФМ-связь.

Для четного $N = 4$ получаем (рис. 2)

$$s_1^{+,-} \cong (\tilde{A}/K)(1 \mp J_3/K) = \pm s_4^{+,-}, \quad s_2^{+,-} \cong -(\tilde{A}/K^2)(\tilde{J} \pm J_2), \quad (25)$$

$$\Phi^{+,-} = (\tilde{A}/K)^2 \left\{ -K - (\tilde{J}^2/K) \pm \left[(\tilde{J}^3/K^2) + (\tilde{J} \pm J_2) + J_3 \right] \right\}. \quad (26)$$

Отсюда получаем АФМ-знак связи

$$E_{in}(4) = 2(\tilde{A}/K)^2 \left\{ (\tilde{J}^3/K^2) + 2(\tilde{J}J_2/K) + J_3 \right\} > 0. \quad (27)$$

АФМ-знак (+) энергии связи (27) обусловлен двумя последними членами в фигурной скобке. Для нечетного $N = 5$ (рис. 3) получаем

$$s_1^{+,-} \cong (\tilde{A}/\tilde{K}) \left\{ 1 - (\tilde{J}/\tilde{K})^2 \mp J_4/K \right\} = \pm s_5^{+,-}, \quad \tilde{K}^2 = K^2 - \tilde{J}^2,$$

$$s_2^{+,-} = (\tilde{A}/\tilde{K})^2 \left\{ -\tilde{J} + (\tilde{J}J_2/K) \mp J_3 \right\} = \pm s_4^{+,-}, \quad s_3^{+,-} = -(A J_2 / \tilde{K}^2) \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

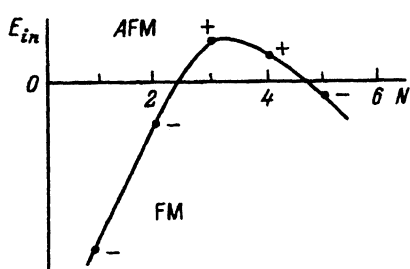


Рис. 4. Энергия взаимодействия $E_{in}(N)$ двух ФМ-суббленок, разделенных немагнитной суббленкой толщиной $D_n = Na_n$. $E_{in} < 0$ соответствует ФМ-конфигурации спинов сверхрешетки.

Энергии конфигураций равны

$$\Phi^{+,-} = (\tilde{A}/\tilde{K})^2 \left\{ -K - 2(J_2\tilde{J}/K) - 2(J_2^2/K) \binom{1}{0} + \right. \\ \left. + 6(\tilde{J}^2 J_2/K^2) \binom{1}{0} \mp (J_3\tilde{J}/K) \pm J_4 \right\}. \quad (28a)$$

Энергия связи

$$E_{in} \cong (\tilde{A}/\tilde{K})^2 \left\{ -2(J_2^2/K) - 4(J_3\tilde{J}/K) + 6(\tilde{J}^2 J_2/K^2) + 2J_4 \right\} < 0 \quad (29)$$

отрицательна, что означает ФМ-основное состояние (рис. 4).

Зависимость энергии связи $E_{in}(N)$ носит, вообще говоря, немонотонный характер. Период изменения ее знака больше периода решетки (рис. 4). Он зависит от отношений Γ/K и J/Γ . Поляризация s_j линейна по взаимодействию на интерфейсе и $\sim \tilde{A}/K$. Энергия связи квадратична $\sim (A/K)^2$ и быстро убывает с ростом N . Ход $E_{in}(N)$ сильно отличается от координатной зависимости дальнедействующего обмена $J_p(p\alpha)$ для $p = N/2$.

Нетрудно обобщить результат на $N \geq 6$. Однако для этого мы должны в функции J_p учесть детали поверхности Ферми сверхрешетки.

3. Магноны в сверхрешетке

Рассмотрим сверхрешетку типа Co/Cu. Расщепление спектра магнонов не зависит от релятивистских щелей в ФМ-случае. При расчете ФМР следует учитывать немалую магнитную анизотропию (эффективное поле H_{eff}). Для малых чисел N_z монослоев важнее дискретность нормальной компоненты волнового вектора k_z . Используя результаты раздела 2, вводим обменные гамильтонианы

$$H^{ex} = - \sum A_0 \mathbf{S}_r \mathbf{S}_{r'} - \sum A_{in} \mathbf{S}_r \mathbf{S}_R + \sum \tilde{J} \mathbf{s}_R \mathbf{s}_{R+\Delta} + \sum J_p \mathbf{s}_R \mathbf{s}_{R+p\Delta}. \quad (30)$$

Разлагаем операторы спина в ряды Фурье

$$\mathbf{s}_R = \mathbf{s}_0 + \sum \mathbf{s}_k \exp(ik\mathbf{R}), \quad \mathbf{s}_k = (1/N_{\perp}) \sum \mathbf{s}_R \exp(-ik\mathbf{R}), \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\perp}. \quad (31)$$

В спиновом подпространстве моноатомного слоя полагаем

$$\mathbf{s}_R = s_j \sigma_R, \quad \sigma = 1, \quad N_n = N_\perp N, \quad N_f = N_\perp N_z^f. \quad (32)$$

Переходим в \mathbf{k} -представление. Обменное взаимодействие на интерфейсе равно

$$H_{in} = -N_\perp \left\{ \sum_j A_p S_{p0} \sigma_{p0} + \sum_j A_p(\mathbf{k}) S_{p\mathbf{k}} \sigma_{p\mathbf{k}} \right\}, \quad p = 1, 2, \quad (33)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\perp$, $A_p = A_{in}|s_1|$. Обмен внутри ФМ-суббленок -1 и -2 есть

$$H_f = -N_f \left\{ \sum A_{p0}(0) S_{p0} S_{p0} + \sum A_{p0}(\mathbf{k}) - S_{p\mathbf{k}} S_{p,-\mathbf{k}} \right\}. \quad (34)$$

Гамильтониан обменной связи внутри немагнитной суббленки (Cu) получаем из (30), подставляя (32) и (31) и суммируя по монослоям j . Используем результат раздела 2 и получим

$$H_{+,-} \cong \Phi^\pm [s_j] N_\perp \left\{ \sigma_{10} \sigma_{20} + \sum \sigma_{1\mathbf{k}} \sigma_{2,-\mathbf{k}} \right\}, \quad [\sigma_{j\mathbf{k}}^+, \sigma_{j'\mathbf{k}'}^-] = \frac{4}{N_\perp} \sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^z \delta_{jj'}, \quad (35)$$

причем поляризуемую суббленку разбиваем также на две подрешетки, примыкающие к разным ФМ-суббленкам. Она рассматривается в ФМ-(+) или АФМ-(-) состояниях. Уточнение приближения (35) усложняет расчеты, однако при расчете магнонных ветвей и величины $M(T)$ приближение (35) оказывается вполне адекватным.

Проиллюстрируем метод на примере однородных колебаний (ФМР и АФМР). Сначала рассмотрим симметричную ФМ-конфигурацию спинов и учтем щели ε_{0j} (поля H_{eff}) для j -суббленок. Введем однородные функции Грина

$$G_{j0}^S = \langle\langle S_{j0}^+ | S_{10}^- \rangle\rangle, \quad G_{j0}^\sigma = \langle\langle \sigma_{j0}^+ | S_{10}^- \rangle\rangle, \quad [S_{j\mathbf{k}}^+, S_{j'\mathbf{k}'}^-] = \frac{2}{N_f} S_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^z \delta_{jj'}. \quad (36)$$

Уравнения имеют вид

$$\begin{pmatrix} E - \tilde{\varepsilon}_1 & \kappa S_{1T} A_1 & 0 & 0 \\ A_1 S_{1T} & E - \Phi_1 & \Phi_s^+ \sigma_{1T} & 0 \\ 0 & \Phi_s^+ \sigma_{2T} & E - \Phi_2 & A_2 \sigma_{2T} \\ 0 & 0 & \kappa A_2 S_{2T} & E - \tilde{\varepsilon}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{10}^S \\ G_{10}^\sigma \\ G_{20}^\sigma \\ G_{20}^S \end{pmatrix} = \frac{2S_{1T}}{N_f} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (37)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_j = \varepsilon_{j0} + \kappa \sigma_{jT} A_j, \quad S_{jT} = \langle S_{j0}^z \rangle, \quad \Phi_j = \Phi_s^\sigma + S_{jT} A_j. \quad (38)$$

Дисперсионное уравнение

$$\prod_j \left\{ (E - \tilde{\varepsilon}_j)(E - \Phi_j) - \kappa A^2 S_{jT} \right\} - (\Phi_s^+)^2 \prod_i \sigma_{iT} (E - \tilde{\varepsilon}_i) = 0, \quad j = 1, 2 \quad (39)$$

имеет четыре решения. Они упрощаются для одинаковых ФМ-суббленок, поскольку (39) вырождается тогда в пару квадратных уравнений.

«Акустические» частоты ФМР (используем малость $\kappa\sigma_T \ll 1$)

$$E_a^{(1,2)} = g\mu_B H_{\text{эф}}(1 - 2\kappa\sigma_T/S_T) + \binom{2}{0} \kappa\Phi_s^+ \sigma_T^2/S_T \quad (40)$$

разбиты на «обычную» ветвь $E_a^{(1)}$, перенормированную поляризацией немагнитной суббленки, и обменно-сдвинутую $E_a^{(2)}$, полученную в [10] для пар ФМ-суббленок. Частоты «оптических» ветвей

$$E_0^{(1,2)} = A_1(S_T + \kappa\sigma_T) + \binom{2}{0} S_T\Phi_s^+, \quad \kappa = a_f/D_f \quad (41)$$

зависят от характеристик интерфейса (A_1), толщины ФМ-суббленки D_f (т.е. κ) и поляризации σ_T буферной суббленки (Cu). Измерение этих частот (рис. 5) дает независимый метод исследования сверхрешеток.

Аналогично рассчитаем основное АФМ-состояние и АФМР. Отличие от (37) заключается в слагаемом гамильтониана (35)

$$\sigma_1\sigma_2 = \sigma_1^z\sigma_2^z + (\sigma_1^+\sigma_2^+ + \text{h.c.}). \quad (42)$$

Используем двухвременные функции Грина (36) и

$$G_{j_0}^{\sigma^-} = \langle\langle G_{j_0}^- | S_{10}^- \rangle\rangle, \quad G_{j\mathbf{k}}^{S,\sigma} = \langle\langle S_{j\mathbf{k}}^+(\sigma_{j\mathbf{k}}^+) | S_{1\mathbf{k}}^- \rangle\rangle. \quad (42a)$$

Уравнения движения имеют вид

$$\begin{pmatrix} E - \tilde{\epsilon}_1 & \kappa S_{1T} A_1 & 0 & 0 \\ \sigma_{1T} A_1 & E - \Phi_1 & \sigma_{1T} \Phi_s^- & 0 \\ 0 & \Phi_s^- \sigma_{2T} & E + \Phi_2 & -\sigma_{2T} A_2 \\ 0 & 0 & -\kappa S_{2T} A_2 & E + \tilde{\epsilon}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{10}^{S+} \\ G_{10}^{\sigma+} \\ G_{20}^{\sigma-} \\ G_{20}^{S-} \end{pmatrix} = \frac{2S_{1T}}{N_f} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

а дисперсионное уравнение

$$\prod_j \left\{ [E + (-1)^j \tilde{\epsilon}_j] [E + (-1)^j \Phi_j] - \kappa A_j^2 S_j T \sigma_j T \right\} + (\Phi_s^-)^2 \sigma_{1T} \sigma_{2T} (E - \tilde{\epsilon}_1)(E + \tilde{\epsilon}_2) = 0.$$

Для одинаковых ФМ-суббленок получаем (в отличие от (41)) дважды вырожденные «акустическую» и «оптическую» частоты АФМР

$$E_a \cong g\mu_B H_{\text{эф}}, \quad E_0 \cong A_1(S_T + \kappa\sigma_T). \quad (44)$$

Продольное (вдоль оси анизотропии) магнитное поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{H}_{\text{эф}}$ снимает вырождение (44). Сдвиги частот АФМР, обусловленные косвенным

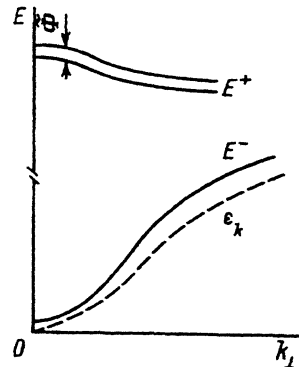


Рис. 5. Континуальные ветви ферромагнонов $E(k_{\perp})$.

E^- — «акустическая», E^+ — «оптическая» (обменная), ϵ_k — спектр магнонов ФМ-монокристалла, $\tilde{\Phi}$ — расщепление обменных (верхних) ветвей.

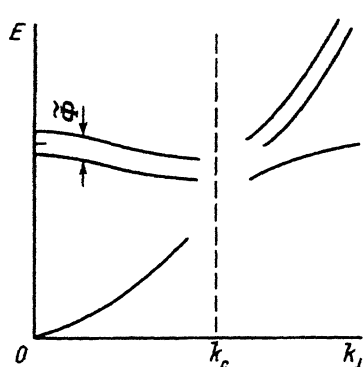


Рис. 6. Кроссинг ветвей магнонов при малом обменном взаимодействии на интерфейсе ($A_1 \ll A_0$).

взаимодействием Φ_s^σ через буферную субплёнку, оказываются в АФМ-конфигурации более высокого порядка, чем в ФМ-состоянии (ср. (44) и (40), (41)).

Спектры магнонов рассчитываем для ФМ-конфигурации спинов. Аналогично (42а) вводим функции Грина $G_{jk}^{S,\sigma}$. Уравнения движения получаем в матричной форме (42), где в диагональных матричных элементах вместо $\tilde{\epsilon}_j$ имеем

$$\tilde{\epsilon}_{jk} = \epsilon_{jk} + \kappa \sigma_{1T} A_j(0), \quad \epsilon_{jk} = g\mu_B H_{\text{эф}} + 2S_{jT} [A_{0j}(0) - A_{0j}(\mathbf{k})]. \quad (45)$$

Недиагональные матричные элементы равны

$$\kappa S_{iT} A_j(\mathbf{k}), \quad \sigma_{jT} A_j(\mathbf{k}), \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\perp} = \{k_x, k_y, 0\}. \quad (46)$$

Дисперсионное уравнение

$$\prod_j \left\{ (E - \tilde{\epsilon}_{jk})(E - \Phi_j) - \kappa \sigma_{jT} S_{jT} A_j^2(\mathbf{k}) \right\} - (\Phi_s^2)^2 \prod_j \sigma_{jT} (E - \tilde{\epsilon}_{jk}) \quad (47)$$

имеет четыре ветви решений. Для одинаковых ФМ-субплёнок имеем

$$E_{1,2}^{+,-} = (1/2) \left\{ \tilde{\epsilon}_k + \Phi_1 \pm \sigma_T \Phi_s^+ \pm \left[(\Phi_1 - \tilde{\epsilon}_k \pm \sigma_T \Phi_s^+)^2 + 4\kappa S_T A_1^2(\mathbf{k}) \right]^{1/2} \right\}. \quad (48)$$

Разлагаем радикал в (47) в ряд по $\kappa \sigma_T$. Получаем для малых волновых векторов $k \ll 1$: 1) нижнюю (дважды вырожденную «акустическую») ветвь

$$E_{\mathbf{k}}^- \cong \epsilon_{\mathbf{k}} + (\kappa \sigma_T) A_1(0) \left\{ 1 - [A_1^2(\mathbf{k})/A_1^2(0)] \right\}, \quad A_{0j} \rightarrow A_0, \quad (49)$$

которая имеет увеличенную обменную жесткость (рис. 5)

$$D_{\perp}(\sigma_T) = D_{\perp}(0) \left\{ 1 + \kappa \sigma_T |\partial^2 A_1 / \partial k^2| / D(0) \right\}, \quad (50)$$

2) две верхние («оптические») ветви

$$E_{\mathbf{k}}^+ = A_1(0) \left\{ S_T + \kappa \sigma_T [A_1(\mathbf{k})/A_1(0)]^2 \right\} \pm \sigma_T \Phi_s^+. \quad (51)$$

В случае $A_1 \ll \varepsilon_{\mathbf{k}}$ получаем другие выражения для частот

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}}^+ &\cong \varepsilon_{\mathbf{k}} + (\kappa \sigma_T) [A_1(0) + S_T A_1^2(\mathbf{k})/\varepsilon_{\mathbf{k}}] \pm \sigma_T \Phi_s^+, & \varepsilon_{\mathbf{k}} \gg \Phi_1, \\ E_{\mathbf{k}}^- &\cong S_T A_1(0) - (\kappa \sigma_T) S_T A_1^2(\mathbf{k})/\varepsilon_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (52)$$

В случае 2 обменные частоты интерфейса попадают в сплошной спектр магнонов, который в окрестности кроссинга ветвей E^+ и E^- искажается (рис. 6). Точка кроссинга $k^2 = k_c^2 \cong A_1/A_0$. В точке кроссинга сходятся по три ветви справа от точки $k = k_c$ и слева от нее. Сложную спектральную картину в точке кроссинга можно проследить, если учесть затухание всех ветвей и их неоднородное уширение. Наблюдение малого расщепления $\sim \Phi_s^+$ возможно в сверхрешетках с минимальными периодами $D_f + D_n < 1$ нм.

4. Температурные зависимости магнитных характеристик

Намагниченность сверхрешетки складывается из ФМ-части S_T и поляризации $\sim \kappa \sigma_T$

$$M(T) = M_0 \{ S_T + \kappa \sigma_T s(N)/2 \}, \quad M_0 = g \mu_B N_f, \quad s(N) = \sum s_j. \quad (53)$$

Суммарная поляризация немагнитной субплемки, согласно (20)–(29), равна

$$s(N) \cong 2(A_1/K) S_T \{ 1 + (\Gamma - J)/K \}, \quad N > 1. \quad (54)$$

Основной вклад в поляризацию S_u (54) дают слои интерфейса, т.е. $j = 1$ и N . Внутренние слои немагнитной субплемки поляризованы слабо, и их вклад относительно мал, что обосновывает двухподрешеточную модель для магнонов раздела 3. Эксперимент [1–6] позволяет оценить $(A_1/K) \sim 0.1$ и $\Gamma/K \lesssim 1/3$. Вклад поляризации (54) составляет $\lesssim 0.1$, и важна она при низких температурах T . Рассчитаем T -зависимость поляризации

$$\sigma_T \cong 1 - (1/2) \sum \langle \sigma_{\mathbf{k}}^- \sigma_{\mathbf{k}}^+ \rangle, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\perp}. \quad (55)$$

В приближении (52) находим

$$G_{1\mathbf{k}}^S \cong (2S_T/N_f)/(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad \langle \sigma_{\mathbf{k}}^+ | \sigma_{\mathbf{k}}^- \rangle \cong (2\sigma_T/N_{\perp})/(E - S_T A_1), \quad (56)$$

откуда следует

$$\langle \sigma_{\mathbf{k}}^- \sigma_{\mathbf{k}}^+ \rangle \cong (2/N_{\perp}) \exp(-\beta S_T A_1). \quad (57)$$

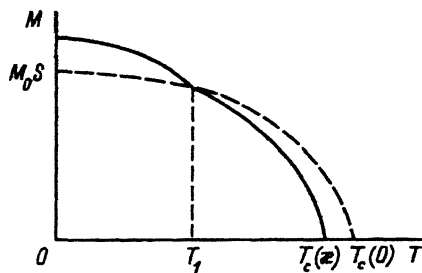


Рис. 7. Магнитный момент $M(T)$ сверхрешетки, приходящийся на один магнитный ион (сплошная кривая).

Штриховая кривая — намагниченность ФМ-монокристалла, T_c — его точка Кюри. $\kappa = a_f/D_f$, где D_f — толщина ФМ-субплёнки.

Подставляем (57) в (55) и получаем для поляризации приближение среднего поля

$$\sigma_T \cong 1 - \exp(-\beta S_T A_1) \rightarrow S_T A_1 / k_B T, \quad T > T_1 = A_1 / k_B. \quad (58)$$

Намагниченность сверхрешетки при $T > T_1$ практически не зависит от поляризации немагнитной части сверхрешетки (рис. 7). Рассчитывая S_T , учтем дискретность нормальной компоненты k_z волнового вектора

$$S_T = S - \Delta S_T, \quad \Delta S_T \cong \sum \langle S_{\mathbf{k}}^- S_{\mathbf{k}}^+ \rangle / 2S, \quad T < 3T_c/4. \quad (59)$$

Из (56) получаем

$$\Delta S_T \cong \xi_0 \sum \exp\left\{-\beta (D_{\perp} k_{\perp}^2 + D_z k_z^2)\right\}. \quad (60)$$

Компоненты тензора магнитной жесткости \hat{D} по-разному меняются в сверхрешетке. Поляризация немагнитной части увеличивает $D_{\perp}(\sigma_T)$ (50). Нормальная компонента

$$D_z(\kappa) \cong 2S \sum A_0(\rho_z) \rho_z^2 \cong D(0)(1 - \kappa/2), \quad \kappa = 1/N_f^z \sim D_f^{-1} \quad (61)$$

уменьшена за счет обрыва обменных связей Co-Co на интерфейсах. Доля оборванных связей определяется толщиной ФМ-субплёнки D_f .

Из (59) получаем при низких температурах

$$\Delta S_T(T) \cong \xi_1(T/T_c), \quad T < \kappa T_c, \quad \xi_0, \quad \xi_1 = \text{const}. \quad (62)$$

В промежуточной области температур имеем

$$\Delta S_T(T) \cong \xi_{3/2}(\kappa)(T/T_c)^{3/2}, \quad \xi_{3/2}(\kappa) = \xi_{3/2}(0)(1 - \kappa)^{-1/2}. \quad (63)$$

Увеличение коэффициента $\xi_{3/2}$ в законе Блоха (63) обусловлено эффективным уменьшением T_c за счет обрыва связей Co-Co (см. рис. 7, где показана температурная зависимость момента M , приходящегося на один ион Co). Энергия связи ФМ-субплёнок

$$\Phi_s^{+,-}(T) = \Phi_s^{+,-}(0) \sigma_T^2 \quad (64)$$

имеет классическую зависимость от температуры T .

Сравним некоторые выводы многоэлектронной теории с экспериментом для сверхрешеток. Теория химических связей в представлении МЭОС предсказывает сильную поляризацию s_j ($\gtrsim 0.1\mu_B$) немагнитных ионов. Связь ионов с одинаковыми числами n ковалентных электронов имеет слагаемое в форме ближнего обмена. В связи ионов с разными n участвуют коллективные электроны, что приводит к дальнедействующему обмену. Распределение s_j по атомным монослоям в глубь немагнитной субплёнки разное для одинаковых ионов (Pt) и для разных (Cu^{2+} и Cu^{3+}).

Наблюдалось увеличение намагниченности M в Co/Pt при уменьшении периода $D = D_f + D_n$, что авторы [3] объясняют ростом ФМ-поляризации Pt. Этот вывод согласуется с результатами раздела 2 данной статьи, как и прямое наблюдение [11] ФМ-поляризации s_j ионов Pt в Co (4 \AA)/Pt (30 \AA) и Co (2)/Pt (13). ФМ-поляризация Pt подтверждается увеличением M в Co/Pt при отжиге [4]. Большие поля анизотропии H_A и коэрцитивность $H_c \sim 1\text{ Т}$ сверхрешетки Co/Pt с малым $D \sim 1\text{ nm}$ [1,2,6] согласуются с выводами об упорядочении на интерфейсе [12], учитываемом теорией.

Субплёнки из ионов с переменной валентностью (Cu, Cr, ...) обнаруживают осцилляции поляризации s_j ; период осцилляций $\Lambda \gg a$ (параметра решетки) в Co/Cu и Fe/Cu [13]. Данные [14] показывают, что изменение величины и знака обменной связи между ФМ-субплёнками сложным образом зависит от толщины D_n (числа N монослоев Cu). Результат раздела 2 (рис. 4) качественно согласуется с данными [14]. Количественное сравнение требует детализации координатных зависимостей обменных параметров. Для этого требуется решение задачи об электронной структуре интерфейсов.

Результаты расчетов магнитных ветвей (раздел 3) и температурных зависимостей магнитных характеристик (раздел 4) согласуются с наблюдаемыми различиями между линейной зависимостью $M(T)$ (для $D_f < 1\text{ nm}$) и законом Блоха ($D_f \gtrsim 1\text{ nm}$). Коэффициент в законе Блоха явно зависит от D_f в согласии с (63).

Список литературы

- [1] Hashimoto S., Ochiai J. J. Magn. Magn. Mater. **88**, 1-2, 211 (1990).
- [2] Lacey E.T.M., Grundy P.J. IEEE Trans. Magn. **26**, 5, 2356 (1990).
- [3] Honda S., Tanimoto H., Kusuda T. IEEE Trans. Magn. **26**, 5, 2730 (1990).
- [4] Morita N., Hawate M., Honda S. J. Magn. Soc. Jap. **16**, 2, 325 (1992).
- [5] Li Z.G., Garcia P.F. J. Appl. Phys. **71**, 2, 842 (1992).
- [6] Zeper W.B., van Kesteren H.W., Jacobs B.A.J., Spruit J.H.M., Garcia P.F. J. Appl. Phys. **70**, 4, 2264 (1991).
- [7] Мицек А.И. Фазовые переходы в кристаллах с магнитной структурой. Киев (1989). 320 с.
- [8] Mitsek A.I. Phys. Stat. Sol. (b) **156**, 2, 507 (1989).
- [9] Мицек А.И. Сверхпроводимость **4**, 2, 256 (1991).
- [10] Мицек А.И., Гуслиенко К.Ю. ФММ **64**, 1, 43 (1987).
- [11] Schütz G., Stähler S., Knülle M., Fisher P., Parkin S., Ebert H. J. Appl. Phys. **73**, 10, pt. 11B, 6430 (1993).
- [12] Mitsek A.I., Pushkar V.N. Abstracts of the European Conf. «Physics of Magnetism-93» (Poznań, Poland). P. 207.
- [13] Coehoorn R. Phys. Rev. **B 44**, 17, 9331 (1991).
- [14] Bloemen P.J.H., van Dalen R., de Jonge W.J.M., Johnson M.T., Stegge J. aan de. J. Appl. Phys. **73**, 10, pt 11 A, 5972 (1992).