

## ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАТОНКИХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СЛОЕВ

*М. Ш. Ерухимов, Г. М. Ерухимов*

Теоретически исследованы основное состояние и термодинамические свойства ультратонких ферромагнитных слоев с поверхностной одноионной анизотропией. В ферромагнитной фазе вычислено значение среднего спина каждого атомного слоя для поверхностной анизотропии типа «легкая плоскость» и типа «легкая ось». В первом случае намагниченность всегда максимальна в центре пленки и убывает при приближении к ее поверхности. Во втором случае характер распределения меняется при изменении константы поверхностной анизотропии. Определена температура Кюри как функция величины поверхностной анизотропии при произвольном числе атомных слоев. Показано, что температура Кюри анизотропных тонких слоев может быть больше, чем в массивных кристаллах.

В последнее время возрос интерес к квантовомеханическому исследованию анизотропных гейзенберговских магнетиков. На основе точного учета одноионной анизотропии установлено, что в ферро- и антиферромагнетиках с одноионной анизотропией имеют место новые квантовые эффекты. Они проявляются в существовании новых ветвей коллективных возбуждений, в «сокращении величины спина» даже при нулевой температуре, в существенной перестройке фазовых диаграмм, в возникновении нового типа доменных стенок и т. д. (см., например, [1-8]). Все эти эффекты характерны для однородных систем. Ряд новых специфических эффектов возникает в неоднородных анизотропных магнетиках.

Примером таких систем являются, в частности, ферромагнитные пленки с поверхностной анизотропией. Отличие поверхностной и объемной анизотропии может приводить к неоднородному распределению намагниченности в основном состоянии вдоль толщины пленки, причем переход от одного атомного слоя к другому сопровождается поворотом вектора магнитного момента [9-12]. В связи с прогрессом в области получения ультратонких пленок монокристаллического совершенства особый интерес вызывают исследования более тонких эффектов в ферромагнитных пленках, проявляющиеся, например, в изменении длины среднего спина при переходе от одного атомного слоя к другому.

В данной работе теоретически исследуются основное состояние и термодинамические свойства ультратонких ферромагнитных слоев с поверхностной одноионной анизотропией. В ферромагнитной фазе вычислено значение среднего спина для каждого атомного слоя образца как для случая поверхностной анизотропии типа «легкая ось», так и для случая типа «легкая плоскость». Определена температура Кюри как функция величины поверхностной анизотропии при произвольном числе атомных слоев. Конкретные расчеты проведены для локализованного спина  $S=1$ .

1. Ферромагнитная пленка с поверхностной  
одноионной анизотропией  
типа «легкая ось»

Рассмотрим ферромагнитную пленку, состоящую из  $N$  атомных слоев. Константу обменного взаимодействия между ближайшими локализованными спинами гейзенберговского кубического ферромагнетика обозначим через  $\mathcal{J}$ . Пусть плоскость пленки совпадает с плоскостью (100) кристалла. Объемной анизотропией для простоты будем пренебрегать, а гамильтониан поверхностной одноионной анизотропии выберем в простейшей форме  $\mathcal{H}_A = -D (\hat{S}^z)^2$ , где константа  $D > 0$ , а ось  $z$  есть [100]. В ферромагнитной фазе вектор спонтанной намагниченности каждого атомного слоя будет ориентирован вдоль оси  $Oz$ , т. е.  $\sigma_n = \langle \hat{S}_n \rangle \equiv \langle \hat{S}_n^z \rangle$  ( $n=1, 2, 3, \dots, N$ ).

В нулевом приближении самосогласованного поля система уравнений для  $\sigma_n$  имеет вид ( $S=1, k_B=1$ )

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \frac{2 \operatorname{sh}(h_1/T)}{\exp(-D/T) + 2 \operatorname{ch}(h_1/T)}, \\ \sigma_n &= \frac{2 \operatorname{sh}(h_n/T)}{1 + 2 \operatorname{ch}(h_n/T)}, \quad n = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sigma_N &= \frac{2 \operatorname{sh}(h_N/T)}{\exp(-D/T) + 2 \operatorname{ch}(h_N/T)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $h_n = \mathcal{J}(4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1})$ ;  $h_1 = \mathcal{J}(4\sigma_1 + \sigma_2)$ ;  $h_N = \mathcal{J}(4\sigma_N + \sigma_{N-1})$  — молекулярное поле, действующее соответственно на объемные и поверхностные спины.

Молекулярное поле в (1) зависит от номера атомного слоя  $n$ , поэтому при  $0 < T < T_c$  однородное решение системы (1) отсутствует. Оно существует лишь только в двух точках: при температуре  $T=0$ , когда все  $\sigma_1 = \sigma_n = \sigma_N = 1$ , и при температуре Кюри  $T \geq T_c$ , когда  $\sigma_1 = \sigma_n = \sigma_N = 0$ .

Остановимся сначала на обсуждении  $T_c$ . Устремляя  $\sigma_n$  к нулю, находим следующее точное выражение для  $T_c$ :

$$T_c = \frac{4\mathcal{J}}{3}(2 + \cos q), \quad (2)$$

где параметр  $q$  определяется из трансцендентного уравнения

$$\sin q \operatorname{tg} \frac{q(N-1)}{2} + 2 = \frac{2 + \cos q}{3} \left[ 1 + 2 \exp\left(-\frac{3D}{4\mathcal{J}(2 + \cos q)}\right) \right]. \quad (3)$$

Формулы (2), (3) определяют в параметрической форме зависимость  $T_c$  от константы поверхностной анизотропии  $D$  при произвольном  $N$ .

В пределе  $D=0$  из (2), (3) получаем известный результат

$$T_c = \frac{4\mathcal{J}}{3} \left( 2 + \cos \frac{\pi}{N+1} \right). \quad (4)$$

В другом предельном случае  $D=\infty$  выражение (3) принимает более простой вид

$$\cos \frac{q(N+1)}{2} = \frac{2}{3} (2 + \cos q) \cos \frac{q(N-1)}{2}. \quad (5)$$

В соответствии с формулами (2)–(5) на рис. 1 представлена зависимость  $T_c$  от  $N$  для различных значений  $D$ . Видно, что при всех  $N$  температура Кюри возрастает с ростом константы анизотропии  $D$ . При  $D=0$   $T_c$  тем больше, чем больше  $N$  (кривая 1). В пределе  $N=\infty$   $T_c=4\mathcal{J}$ , что совпадает со значением  $T_c$  для массивного кубического ферромагнетика. При увеличении  $D$  производная  $(dT_c/dN)_{N=\text{const}}$  уменьшается, для некоторого  $D$  она обращается в нуль, а при дальнейшем увеличении  $D$  она даже меняет

знак (ср. кривые 1—4). Для  $D = \infty$   $T_c$  тем меньше, чем больше  $N$  (кривая 4), и при  $N \rightarrow \infty$   $T_c$  стремится к значению  $T_c = \mathcal{J} (2 + \sqrt{6})$ .

Среднее значение спина  $\sigma_n$  каждого атомного слоя  $n$  и его температурная зависимость находятся из системы уравнений самосогласования (1). В силу симметрии между решениями системы (1) имеют место соотношения  $\sigma_n = \sigma_{N+1-n}$  ( $n$  — любое). На рис. 2 показана температурная зависимость намагниченности первого  $\sigma_1 = \sigma_6$  (сплошные), второго  $\sigma_2 = \sigma_5$  (штриховые) и третьего  $\sigma_3 = \sigma_4$  (штрихпунктирные) атомных слоев ферромагнитной пленки ( $N=6$ ) для трех значений константы поверхностной анизотропии

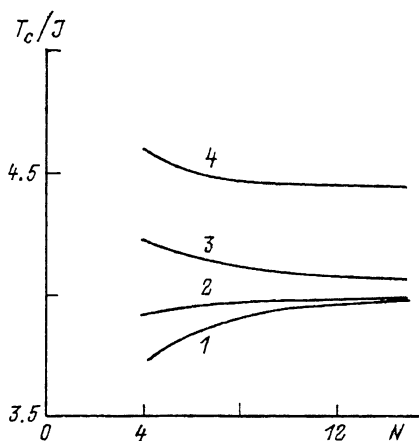


Рис. 1. Зависимость температуры Кюри от числа атомных слоев.

Кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют константам поверхностной анизотропии  $D$ : 0,  $2\mathcal{J}$ ,  $4\mathcal{J}$ ,  $\infty$ .

тропии  $D$ :  $D=0$  (кривые 1),  $D=2\mathcal{J}$  (кривые 2),  $D=10\mathcal{J}$  (кривые 3). Видно, что при анизотропии  $D=0$  величина среднего спина максимальна в центре пленки, постепенно убывает при удалении от центра и минимальна на поверхности пленки. Причем при некоторых значениях температуры спин на поверхности может быть по величине более чем в два раза меньше спина в центре пленки. С ростом  $D$  разность величин спинов

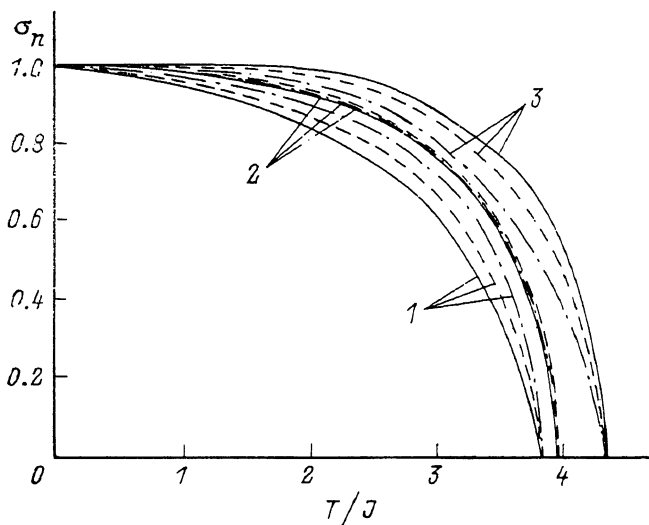


Рис. 2.

на поверхности и в объеме пленки уменьшается (кривые 2). При больших значениях  $D$  ситуация даже меняется: величина спина на поверхности пленки становится больше, чем в объеме слоя. Физически это связано с тем, что при больших  $D$  эффективное поле на поверхности пленки, представляющее собой сумму поля анизотропии и молекулярного поля и формирующее величину спина, оказывается больше соответствующего эффективного (молекулярного) поля в объеме образца.

2. Ферромагнитная пленка с поверхностной одноионной анизотропией типа «легкая плоскость»

Для поверхностной анизотропии типа «легкая плоскость» константа  $D < 0$ . В ферромагнитной фазе вектор спонтанной намагниченности каждого атомного слоя будет ориентирован в плоскости пленки (примем это направление, например, за ось  $Ox$ ). Такую же ориентацию имеют молекулярные поля  $h_n$ , действующие на спины  $\sigma_n$ . На основе точного решения задачи о спектре одноионных состояний в этом случае легко найти следующую систему уравнений самосогласования для средних спинов на поверхности и в объеме пленки:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \frac{h_1}{\sqrt{h_1^2 + d^2}} \frac{2 \operatorname{sh}(\sqrt{h_1^2 + d^2}/T)}{\exp(-d/T) + 2 \operatorname{ch}(\sqrt{h_1^2 + d^2}/T)}, \\ \sigma_n &= \frac{2 \operatorname{sh}(h_n/T)}{1 + 2 \operatorname{ch}(h_n/T)}, \quad n = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sigma_N &= \frac{h_N}{\sqrt{h_N^2 + d^2}} \frac{2 \operatorname{sh}(\sqrt{h_N^2 + d^2}/T)}{\exp(-d/T) + 2 \operatorname{ch}(\sqrt{h_N^2 + d^2}/T)}, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $d = |D|/2$ , а поля  $h_1$ ,  $h_n$  и  $h_N$  по-прежнему определяются выражениями (1).

В основном состоянии ( $T=0$ ) намагниченность всех атомов в объеме пленки достигает насыщения  $\sigma_n = 1$ . Исключение составляет намагниченность атомов на поверхности пленки, для которой из (6) имеем

$$\sigma_1 = \frac{\mathcal{J}(1 + 4\sigma_1)}{\sqrt{d^2 + \mathcal{J}^2(1 + 4\sigma_1)^2}}, \quad \sigma_1 = \sigma_N. \quad (7)$$

Отсюда следует, что при  $d=0$   $\sigma_1 = 1$ , для всех же других значений константы анизотропии  $d$  насыщение спинов  $\sigma_1$  отсутствует. Другим важным моментом является то, что  $\sigma_1$  отлично от нуля при любых (в том числе и больших)  $d$ . С ростом  $d$   $\sigma_1$  убывает, и при  $d \rightarrow \infty$   $\sigma_1 \rightarrow 0$ .

Для  $d \ll 4\mathcal{J}$  из (7) находим

$$\sigma_1 = 1 - d^2/50\mathcal{J}^2. \quad (8)$$

В другом предельном случае  $d \gg 4\mathcal{J}$  имеем

$$\sigma_1 = \mathcal{J}/d. \quad (9)$$

Заметим, что в массивном кубическом ферромагнетике с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» спонтанная намагниченность существует лишь при  $|D| \leq 12\mathcal{J}$ . Отличие от этого случая нашего результата связано с неоднородностью анизотропии вдоль толщины пленки. Полностью упорядоченные спины в объеме пленки посредством обменного молекулярного поля действуют на поверхностные спины, вызывая их подмагничивание и приводя к «хвосту» функции  $\sigma_1(d)$  в область больших  $d$ .

Рассмотрим теперь зависимость  $T_c$  от  $d$  и  $N$ . Устремляя  $\sigma_n$  к нулю, получаем уравнение для  $T_c$

$$\begin{aligned} T_c &= \frac{4\mathcal{J}}{3}(2 + \cos q), \\ \cos \frac{q(N-3)}{2} + \cos \frac{q(N-1)}{2} \left(4 - \frac{d}{\mathcal{J}} \frac{1+2f}{1-f}\right) &= 0, \\ f &= \exp\left[-\frac{3d}{2\mathcal{J}(2 + \cos q)}\right]. \end{aligned} \quad (10)$$

В пределе  $d=0$  из (10) естественно получаем выражение, совпадающее с (4). Для  $d=\infty$  решение (10) равно

$$T_c = \frac{4\mathcal{J}}{3} \left( 2 + \cos \frac{\pi}{N-1} \right). \quad (11)$$

Формула (11) получается из (4), если сделать замену  $N$  на  $N-2$ . Это означает, что эффективно толщина ферромагнитной пленки «уменьшилась» на два атомных слоя, так как в пределе  $d=\infty$  средний спин на обеих поверхностях пленки стал равным нулю  $\sigma_1 = \sigma_N = 0$  (см. (9)).

Зависимость температуры Кюри от числа атомных слоев для трех значений константы поверхностной анизотропии показана на рис. 3. Для всех

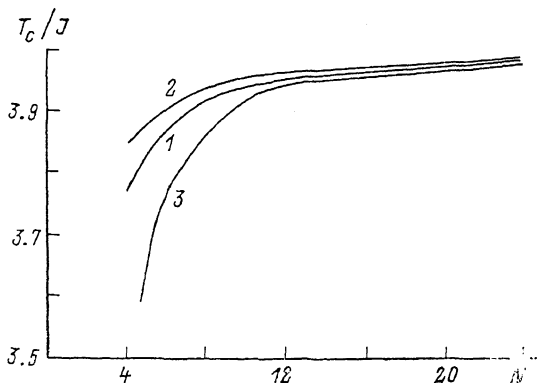


Рис. 3. Зависимость температуры Кюри от числа атомных слоев.

Кривые 1, 2, 3 соответствуют константам поверхностной анизотропии  $D$ : 0,  $-4\mathcal{J}$ ,  $-\infty$ .

$d T_c$  увеличивается с ростом толщины пленки. В пределе  $N=\infty$   $T_c$  совпадает со значением температуры Кюри для массивного кубического ферромагнетика  $T_c = 4\mathcal{J}$ . Из анализа системы (10) и рис. 3 видно, что зависимость  $T_c$  от  $d$  оказывается немонотонной. Сначала с ростом  $d$  температура Кюри возрастает, достигает максимума, а затем начинает убывать. Этот эффект имеет место при всех  $N$ . Однако проявляется он тем сильнее, чем меньше  $N$ .

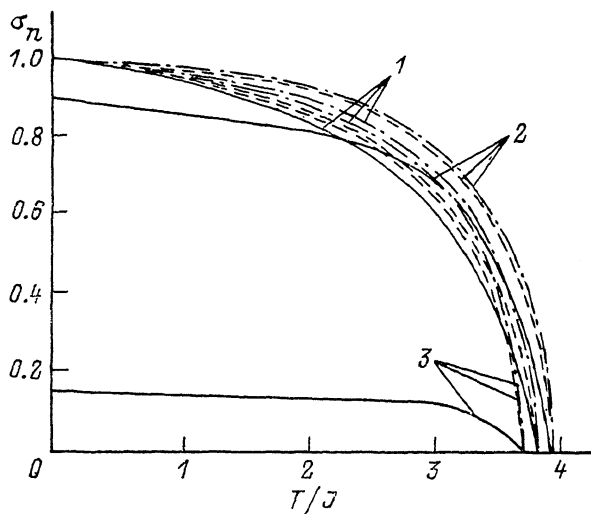


Рис. 4. Температурная зависимость среднего спина каждого атомного слоя для анизотропной ферромагнитной пленки с  $N=6$ .

Сплошные линии отвечают первому атомному слою  $\sigma_1 = \sigma_6$ , штриховые — второму  $\sigma_2 = \sigma_5$ , а штрихпунктирные — третьему атомному слою  $\sigma_3 = \sigma_4$ .

На рис. 4 представлена температурная зависимость намагниченности атомных слоев  $\sigma_n$  ферромагнитной пленки для трех значений константы поверхностной анизотропии  $D$ :  $D=0$  (кривые 1),  $-4\mathcal{J}$  (кривые 2) и  $-10\mathcal{J}$  (кривые 3). Видно, что для анизотропии типа «легкая плоскость» намагниченность максимальна в центре пленки и постепенно убывает при удалении от центра к поверхности пленки. С ростом анизотропии  $|D|$ , как и отмечалось выше, намагниченность поверхностного слоя непрерывно

уменьшается в области низких температур, а температура Кюри ведет себя немонотонно, сначала возрастает и после достижения максимума начинает быстро убывать. Убытие  $T_c$  характерно и для массивных ферромагнетиков с объемной анизотропией типа «легкая плоскость».

#### Список литературы

- [1] Соорег В. Р. // Phys. Rev. 1967. V. 163. № 1. С. 444—459.
- [2] Зайцев Р. О. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 1. С. 207—215.
- [3] Гайдидей Ю. Б., Локтев В. М. // ФНТ. 1977. Т. 3. № 4. С. 507—513.
- [4] Онуфриева Ф. П. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 6. С. 2372—2379.
- [5] Вальков В. В., Валькова Т. А. // ТМФ. 1984. Т. 59. № 3. С. 453—464.
- [6] Вальков В. В., Валькова Т. А., Овчинников С. Г. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 2. С. 550—561.
- [7] Переверзев Ю. В., Борисенко В. Г. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 4. С. 1249—1252.
- [8] Локтев В. М., Островский В. С. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3026—3029.
- [9] Захаров Ю. В., Игнатченко В. А. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 3. С. 951—956.
- [10] Барьяхтар В. Г., Клепиков В. Ф., Соболев В. А. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 5. С. 1454—1462.
- [11] Зуев А. В., Ерухимов М. Ш., Семенцов Д. И. // ФММ. 1975. Т. 40. № 2. С. 439—442.
- [12] Саланский Н. М., Ерухимов М. Ш. Физические свойства и применение магнитных пленок. Новосибирск: Наука, 1975. 220 с.

Пензенский  
сельскохозяйственный институт

Поступило в Редакцию  
26 октября 1990 г.