

АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ СВЯЗЬ НА ПОВЕРХНОСТИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО МЕТАЛЛА

А.В.Анисимов, В.Д.Борман, А.П.Попов

Московский инженерно-физический институт
115409, Москва

Поступила в редакцию 15 июля 1991 г.

В рамках простой $s(f)$ -модели получен критерий антипараллельности поверхностного и объемного магнитных моментов редкоземельного металла.

Недавние эксперименты, выполненные с использованием спин-поляризованных электронов и магнитооптического эффекта Керра^{1,2} показали, что момент поверхностного атомного слоя Gd(0001) антипараллелен моменту объема при $T < T_{cv} = 293$ К (T_{cv} -температура Кюри для объема). До сих пор для описания этого эффекта использовалась модель Изинга, в которой обменный интеграл между атомом поверхности и ближайшим к нему атомом второго слоя J_{12} просто полагался отрицательным³. Такой подход, очевидно, не вскрывает механизма явления. В настоящей статье дается физическая интерпретация экспериментальных данных^{1,2} в рамках простой $s(f)$ -модели, в которой взаимодействие между сильно локализованными жесткими $4f$ -моментами осуществляется через s -зону. Мы полагаем, что основной причиной изменения взаимодействия $4f$ -моментов вблизи поверхности и, как следствие, явления антиферромагнитной связи на поверхности металла является зависимость восприимчивости s -электронов от номера атомного слоя и уровня Ферми вследствие интерференции падающих и отраженных от поверхности волн s -электронов.

Ферромагнитный объем, т.е. $4f$ -моменты начиная со второго слоя, индуцирует в линейном приближении по JS (J - контактное обменное взаимодействие $4f$ -моментов с s -электронами, S - величина спина $4f$ -момента) момент S -электронов на поверхности m_1 , приходящийся на один узел, равный

$$m_1 = \sum_{l=2} m_{1l} = 2JS(g_1(\mu) - \varphi_1(\mu)). \quad (1)$$

Здесь m_{1l} - момент s -электронов на первом слое, наведенный $4f$ -моментами l -го слоя, $g_1(\mu)$ - невозмущенная плотность состояний или паулиевская восприимчивость s -электронов первого слоя, $\varphi_1(\mu)$ - невозмущенная восприимчивость s -электронов первого слоя, если поле приложено только к этому слою. Выражение для момента s -электронов на поверхности m_1 , наведенного объемными $4f$ -моментами можно пояснить следующим образом. Ко всему кристаллу включая поверхность прикладывается поле JS от ФМ-упорядоченных "вверх" $4f$ -моментов, что дает момент s -электронов на поверхности, равный $m_1^{\uparrow} = 2JSg_1(\mu)$, а затем вычитается вклад $2JS\varphi_1(\mu)$ от локального поля, создаваемого $4f$ -моментами только поверхностного атомного слоя. Из (1) следует, что при выполнении условия

$$\varphi_1(\mu) > g_1(\mu), \quad (2)$$

индуцированный объемом момент s -электронов на первом атомном слое антипараллелен моменту в объеме ($m_{1v} = 2JSg_v(\mu)$, $g_v(\mu)$ - плотность состояний

s -электронов в объеме). Будем для простоты считать, что при обращении поверхностного $4f$ -момента "вниз", т.е. при поверхностном возмущении $-2JS$ не возникают поверхностные состояния s -электронов типа таммовских, т.к. в силу малости J в них может быть сосредоточена лишь незначительная часть s -электронов и их влияние на величину φ_1 мало. Тогда момент s -электронов на поверхности становится равным $m_1^\dagger = 2JS(g_1(\mu) - 2\varphi_1(\mu))$, а поправка к энергии системы, определяемая разностью диагональных элементов взаимодействия s -электронов и $4f$ -моментов при антипараллельной и параллельной ориентации поверхностных и объемных $4f$ -моментов принимает вид

$$\Delta E = E^{\dagger\dagger} - E^{\dagger\dagger} = JSN(m_1^\dagger + m_1^\dagger) = 4J^2S^2N(g_1(\mu) - \varphi_1(\mu)). \quad (3)$$

Здесь N - число узлов в слое. Из (3) видно, что выполнение (2) приводит к выигрышу энергии системы при антипараллельной ориентации. Таким образом, условие (2) есть критерий антипараллельности поверхностного и объемного моментов $4f$ -металла. Конечно, при этом должно быть выполнено условие энергетической выгоды ферромагнитного состояния в объеме, как это имеет место для Gd.

Различные электронные состояния из-за интерференции дают вклад в $\varphi_1(\mu)$, пропорциональный $\sin^2(\kappa\Delta)$, где Δ - межплоскостное расстояние, κ - волновое число поперечной моды. Наибольший вклад вносят состояния, для которых $\kappa\Delta \sim \frac{\pi}{2}$. Они же повышают по сравнению с объемом $g_v(\mu)$ поверхностную $g_1(\mu)$ плотность состояний. Поэтому при выполнении условия (2) одновременно следует ожидать

$$g_1(\mu) \gtrsim g_v(\mu). \quad (4)$$

Это приводит к тому, что разница энергий в ФМ и парамагнитном состоянии всего кристалла, приходящаяся на один узел поверхности, равная $E = -J^2S^2g_1(\mu)$, меньше аналогичной в объеме $E_{\text{ФМ}} = -J^2S^2g_v(\mu)$. Энергия же эффективного взаимодействия атома первого слоя с остальными, начиная со второго слоя, при ФМ состоянии положительна и равна $E_{1v} = -\frac{\Delta E}{2N}$. Поэтому превышение $g_1(\mu)$ относительно $g_v(\mu)$ с учетом меньшего числа соседей на поверхности указывает на увеличение значений эффективных параметров обмена на поверхности по сравнению с объемными, что использовалось авторами работ ³⁻⁵ для описания в модели Изинга явления поверхностного магнетизма Gd(0001): $T_{cs} = 315 \text{ K} > T_{cv} = 293 \text{ K}$.

Чтобы убедиться в возможности выполнения критерия (2) будем трактовать s -электроны в модели сильной связи, что позволяет последовательно учесть наличие границы у кристалла. В этом случае гамильтониан s -электронов без взаимодействия может быть легко диагонализирован при переходе от узельного к представлению бегущих и стоячих волн. Рассмотрим простой куб с поверхностью, отвечающей грани (100), для которой в рассматриваемом нами случае условие возникновения таммовских состояний имеет вид $|2JS| > |B|$, где B - амплитуда перескока s -электрона между ближайшими узлами. Считая это условие невыполненным можно определить невозмущенную локальную восприимчивость

$$\begin{aligned} \varphi_1(\mu) &= \frac{4}{(L+1)^2} \sum_{q_1 q_2} \sin^2 \frac{\pi q_1}{L+1} \sin^2 \frac{\pi q_2}{L+1} \frac{n_{q_2} - n_{q_1}}{2B(\cos \frac{\pi q_1}{L+1} - \cos \frac{\pi q_2}{L+2})} = \\ &= \frac{-4}{B(L+1)} \sum_q \sin^2 \frac{\pi q}{L+1} \cos \frac{\pi q}{L+1} n_q. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь q - номер мода стоячей волны ($q = 1, 2, \dots, L$), L - число слоев, $n_q = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}q}$, \vec{k} - квазиимпульс из двумерной зоны Бриллюэна. Нетрудно получить и выражение для искомой энергии ΔE , которое при разложении до J^2 совпадает с (3), где $\varphi_1(\mu)$ определяется из (5). Плотности состояний равны

$$g_1(\mu) = \frac{2}{L+1} \sum_q \sin^2 \frac{\pi q}{L+1} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta(\mu - \epsilon_{\vec{k}q}), \quad g_v(\mu) = \frac{1}{LN} \sum_{q\vec{k}} \delta(\mu - \epsilon_{\vec{k}q}),$$

$$\epsilon_{\vec{k}q} = 2B(\cos k_x \Delta + \cos k_y \Delta + \cos \frac{\pi q}{L+1}).$$

Графики зависимостей $g_1(\mu)$, $\varphi_1(\mu)$, $g_v(\mu)$ представлены на рисунке, из которого видно, что антипараллельная ориентация энергетически выгодна при $1 \lesssim |\mu| \lesssim 2$ и $|\mu| \lesssim 0,6$, причем действительно выполняется (4). Из рисунка следует, что $|\frac{E_{1v}}{2E}| = |\frac{\varphi_1 - g_1}{g_1}| \ll 1$. Это указывает на слабую связь 4f-моментов первого слоя с объемными.

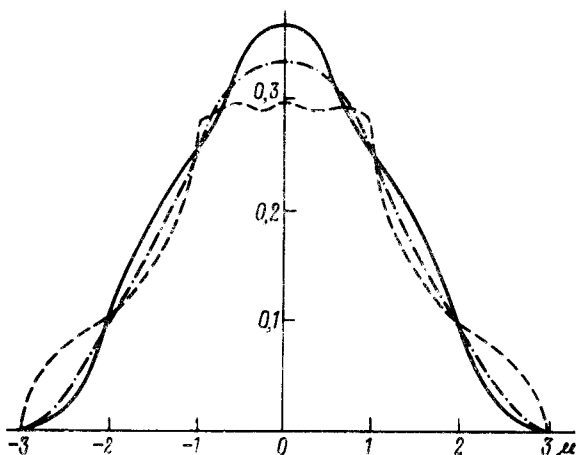


Рис. 1. Зависимости объемной g_v - (---), и поверхностной g_1 - (- · - · -) плотностей состояний и локальной восприимчивости поверхности φ_1 - — от положения уровня Ферми μ в s -зоне. Все величины в единицах $2|B|$

Подробный анализ энергетической выгодности ФМ состояния объема по отношению к другим состояниям при конечных JS сложен и выходит за рамки данной работы, однако отметим, что при $|\mu| \lesssim 0,6$ энергетически выгоднее антиферромагнитное состояние объема. Действительно, в квадратичном приближении по J энергия состояния на узел равна $E_{\Lambda\Phi} = -J^2 S^2 \chi(\vec{k}_0)$, $\vec{k}_0 = \frac{\pi}{\Delta}(1, 1, 1)$, и поскольку $\chi(\vec{k}_0) = -\int_{\epsilon}^{\mu} g_v(\epsilon) d\epsilon$ логарифмически расходится при $|\mu| \rightarrow 0$, что приводит при конечных JS к разрыву зоны и образованию антиферромагнитной щели шириной $2JS$, то при малых $|\mu| g_v(\mu) < \chi(\vec{k}_0)$ и, следовательно, $E_{\Lambda\Phi} < E_{\Phi M}$. Так что реально антипараллельная ориентация поверхностного и объемного моментов, по-видимому, возможна лишь в области $1 \lesssim |\mu| \lesssim 2$.

1. Weller D., Alvarado S.F., Gudat W. et al. Phys. Rev. Lett., 1985, 54, 1555.
2. Weller D., Alvarado S.F., Campagna M. et al. J. Less-Comm. Met., 1985, 111, 277.
3. Aguilera-Granja F., Moran-Lopez J.L. Phys. Rev. B, 1985, 1, 7146.
4. Sanchez J.M., Moran-Lopez J.L. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1120.
5. Aguilera-Granja F., Moran-Lopez J.L. Sol. St. Comm., 1990, 74, 155.