

УДК 538.221

© 1991

МАГНОННЫЕ СПЕКТРЫ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК
С ПРОИЗВОЛЬНЫМ СПИНОМ

Л. Т. Крецишина, Э. Л. Нагаев

Рассчитана сглаженная плотность магнонных уровней в ферромагнитных пленках с произвольным спином. Сглаживание плотности уровней объемной магнонной зоны приводит к появлению в плотности уровней поверхностной добавки. В нее также дают вклад состояния поверхностных зон. В случае больших спинов существенны зоны, лежащие выше потолка объемной, критерии существования которых указаны в работе. В пренебрежении анизотропией в приближении ближайших соседей формально получаются также поверхностные зоны, лежащие целиком внутри объемной зоны. Однако при учете следующих по дальности соседей должно происходить смешивание объемных и поверхностных состояний. Наличие поверхностной добавки к плотности уровней вызывает размерную зависимость намагниченности и других физических свойств пленок.

В нашей работе рассчитана плотность магнонных уровней в тонкой ферромагнитной пленке при произвольных магнонных частотах. В частности, исследована возможность появления поверхностных магнонных зон и резонансов вблизи экстремумов объемной магнонной зоны. Хотя плотности магнонных уровней в пленках посвящена весьма значительная по объему литература, до сих пор плотность уровней рассчитывалась только в области применимости квадратичного закона дисперсии для магнонов. Если при малых спинах S эта область практически совпадает с областью применимости спин-волнового приближения, при больших S первая составляет лишь малую часть второй. Поэтому наши результаты в отличие от предшествующих позволяют описать термодинамику ферромагнитных пленок с произвольным значением спина во всей спин-волновой области.

Размерная зависимость плотности магнонных уровней в пленке обусловлена пространственным квантованием уровней в теле конечных размеров [1]. В нашей работе фактически вычисляется не истинная плотность уровней, а сглаженная по интервалам частот, малым по сравнению с kT , но большим по сравнению с расстоянием между квантованными уровнями. В отличие от истинной сглаженная плотность уровней — непрерывная функция частоты. Следы пространственного квантования проявляются в ней как добавка поверхностной части к стандартному выражению для объемной ее части. Для частиц с простым квадратичным законом дисперсии сглаженная плотность уровней была введена еще в начале века Вейллем. Наиболее исчерпывающе она проанализирована Блохом и Бальяном [2] при произвольной линейной связи на поверхности между волновой функцией и ее производной. Естественно, результаты этого анализа автоматически переносятся и на квазичастицы с квадратичным законом дисперсии. В частности, остается в силе критерий применимости сглаженной плотности уровней $(kL)^{-1} \ll 1$, где k — магнонный импульс, L — толщина пленки (по существу — это критерий квазиклассичности).

Фактически такая сглаженная плотность уровней для длинноволновых магнонов и вычислялась в предшествующих работах [3, 4], хотя критерий ее применимости не указывались. Однако результаты этих работ, по-видимому, не во всем согласуются с результатами [2]. Так, в [3] утвержда-

ется, что при учете обмена не только между первыми, но еще и вторыми по дальности соседями вблизи дна объемной магнонной зоны появляется поверхностная магнонная зона. Однако в длинноволновом пределе граничное условие для магнонов независимо от радиуса обменных сил соответствует пучности их волновой функции на поверхности. При таком граничном условии, согласно [2], существует только поверхностный резонанс, а не поверхностная зона.

Поставленная нами задача требует учета зонной структуры магнонного спектра, а следовательно, и иной методики, нежели использованная в [3, 4]. В работах [5, 6] была развита методика для расчета плотности уровней электронов проводимости в пленке с учетом зонной структуры спектра. Ниже эта методика будет обобщена с тем, чтобы учесть отличие друг от друга обмена на поверхности и внутри объема. Рассмотрены два случая: 1) изменен интеграл обмена между атомами из поверхностного и следующего за ним слоев, 2) изменен интеграл обмена между поверхностными атомами. В первом случае вычислена намагниченность и исследовано влияние поверхности на положение точки Кюри T_c .

Отличие поверхностного обмена от объемного весьма существенно для структуры спектра. В частности, из-за него в спектре появляются поверхностные зоны и резонансы вблизи потолка объемной магнонной зоны, которые при малых спинах несут существенны, но при больших спинах обязательно должны учитываться. Насколько нам известно, до нашей работы это не делалось. Что же касается поверхностных зон вблизи дна, то в приближении ближайших соседей в первом случае они отсутствуют и у нас, и в [3], но резонансные уровни возможны. Во втором случае они формально возможны, но они должны замениться резонансами при выходе за приближение ближайших соседей.

1. Расчет плотности уровней при измененном обмене перпендикулярно поверхности

Для определенности решетка кристалла, построенного из магнитных атомов, считается простой кубической. Рассматривается пленка толщины $L = (2l+1)a$, где a — постоянная решетки, ограниченная плоскостями (100). Обменное взаимодействие описывается гамильтонианом Гейзенберга в приближении ближайших соседей, причем интеграл обмена между поверхностным и ближайшим к нему слоем считается отличным от объемного (например, из-за поверхностной релаксации). Магнитная анизотропия в явном виде не учитывается. Волновое уравнение для магнонов в узельном представлении записывается тогда в виде

$$(\omega - U) \Psi_{f,g} = -\mathcal{J} \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta,g} - \mathcal{J} (\Psi_{f,g+1} + \Psi_{f,g-1}), \quad |g| < l-1,$$

$$(\omega - U_1) \Psi_{f,\pm(l-1)} = -\mathcal{J} \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta,\pm(l-1)} - \mathcal{J} \Psi_{f,\pm(l-2)} - K \Psi_{f,\pm l},$$

$$(\omega - U_0) \Psi_{f,\pm l} = -\mathcal{J} \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta,\pm l} - K \Psi_{f,\pm(l-1)}, \quad (1)$$

где величины U_0, U_1, U выражаются через объемный \mathcal{J} и поверхностный K интегралы обмена (последний описывает обмен между атомами из поверхностного и следующего за ним слоя): $U = 6\mathcal{J}$, $U_1 = 5\mathcal{J} + K$, $U_0 = 4\mathcal{J} + K$; индекс f нумерует атомы в плоскостях (x, y) , параллельных поверхности кристалла; δ — вектор, соединяющий ближайших соседей в этих плоскостях; g — номер плоскости. Оба интеграла обмена \mathcal{J} и K считаются положительными.

Представляя волновую функцию $\Psi_{f,g}$ в виде

$$\Psi_{f,g} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_f} \begin{cases} \sin p_g g, \\ \cos p_g g, \end{cases} \quad (2)$$

получаем уравнения для определения дозволённых значений волнового числа p

$$\operatorname{ctg} p_s(l-1) = R(p_s), \quad \operatorname{tg} p_c(l-1) = -R(p_c),$$

$$R(p) = (1 - \cos p)[2(1 - \cos p) - 3\beta] / \sin p [2(1 - \cos p) - \beta], \quad \beta = K/\mathcal{J}. \quad (3)$$

Из (3) получаются следующие выражения для p_s и p_c :

$$p_s = \frac{1}{l} \operatorname{arctg} F(p_s) + \frac{\pi n_s}{l}, \quad p_c = -\frac{1}{l} \operatorname{arctg} F(p_c) + \frac{\pi n_c}{l},$$

$$F(p) = -\left\{ 1 + \frac{2\beta}{2(1-\beta)(1-\cos p) - \beta} \right\} \operatorname{tg} \frac{p}{2}. \quad (4)$$

Энергия магнона в объемной зоне дается выражением (в единицах $2\mathcal{J}$)

$$\omega_{q,p} = 3 - \cos q_x - \cos q_y - \cos p. \quad (5)$$

Кроме «объемных» мод (2), вообще говоря, возможны и поверхностные моды, лежащие выше потолка объемной зоны

$$\Psi_{\mathbf{t},g} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{t} + i\pi g} \begin{cases} \operatorname{sh} \kappa_s g, \\ \operatorname{ch} \kappa_c g, \end{cases} \quad |g| \leq l-1. \quad (6)$$

Энергия поверхностного магнона записывается в виде

$$\omega_s = 3 + \operatorname{ch} \kappa - \cos q_x - \cos q_y, \quad (7)$$

где параметр κ определяется из уравнения

$$(\nu - 1 - \beta)(\nu - \beta) - \beta^2 - e^{-\nu}(\nu - \beta) = 0, \quad \nu = 2(1 + \operatorname{ch} \kappa). \quad (8)$$

Согласно (8), поверхностные магноны существуют, если $\beta > 4/3$, и при $\beta \gg 1$ асимптотически $\kappa \approx \ln 2\beta$. С учетом (2)–(8) плотность магنونных уровней дается суммой вкладов от объемной и поверхностной зон

$$g(\omega) = g_v(\omega) + g_s(\omega),$$

$$g_v(\omega) = \sum_{\mathbf{q}p_s} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q},p_s}) + \sum_{\mathbf{q}p_c} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q},p_c}), \quad (9)$$

$$g_s(\omega) = 2 \sum_{\mathbf{q}} \delta(\omega - \omega_s) \Theta(\beta - 4/3), \quad (10)$$

где $\Theta(x)$ — функция единичного скачка, равная 1 при $x > 0$, 1/2 при $x=0$ и 0 при $x < 0$. Коэффициент 2 в формуле (10) возникает из-за равенства вкладов в g_s от четного и нечетного решений (6) для поверхностной зоны при $\kappa l \gg 1$. В случае, когда длина волны квазичастицы λ мала по сравнению с толщиной пленки L , воспользуемся для расчета g_v и g_s методикой, развитой в работе [5]. Используя интегральное представление для δ -функции, разделим суммирование по разным компонентам квазиимпульса

$$\sum_{\mathbf{q},p} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q},p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-3)t} \sum_{q_x} e^{-it \cos q_x} \sum_{q_y} e^{-it \cos q_y} \sum_p e^{-it \cos p}. \quad (11)$$

Суммирование по квазиимпульсу \mathbf{q} вдоль поверхности заменяется интегрированием, что приводит к следующим выражениям для g_v и g_s :

$$g_v(\omega) = \frac{D^2}{2\pi a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega-3)t} \mathcal{J}_0^2(t) \sum_p e^{-it \cos p}, \quad (12)$$

$$g_s(\omega) = (2D^2/\pi^2 a^2) \Theta(\beta - 4/3) \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - (\omega - 3 - \operatorname{ch} \kappa)^2/4} \right\}, \quad (13)$$

$$\tilde{K}(\sqrt{x}) \equiv |K(\sqrt{x}) \Theta(x),$$

где $K(x)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, D — размер пленки по осям x и y , $\mathcal{J}_0(t)$ — функция Бесселя, $p=(p_s, p_c)$. Влияние поверхности на плотность уровней проявляется не только через $g_s(\omega)$ (13), но и через плотность уровней g_v в объемной магнитной зоне, которая оказывается зависящей от толщины пленки. Использование формулы

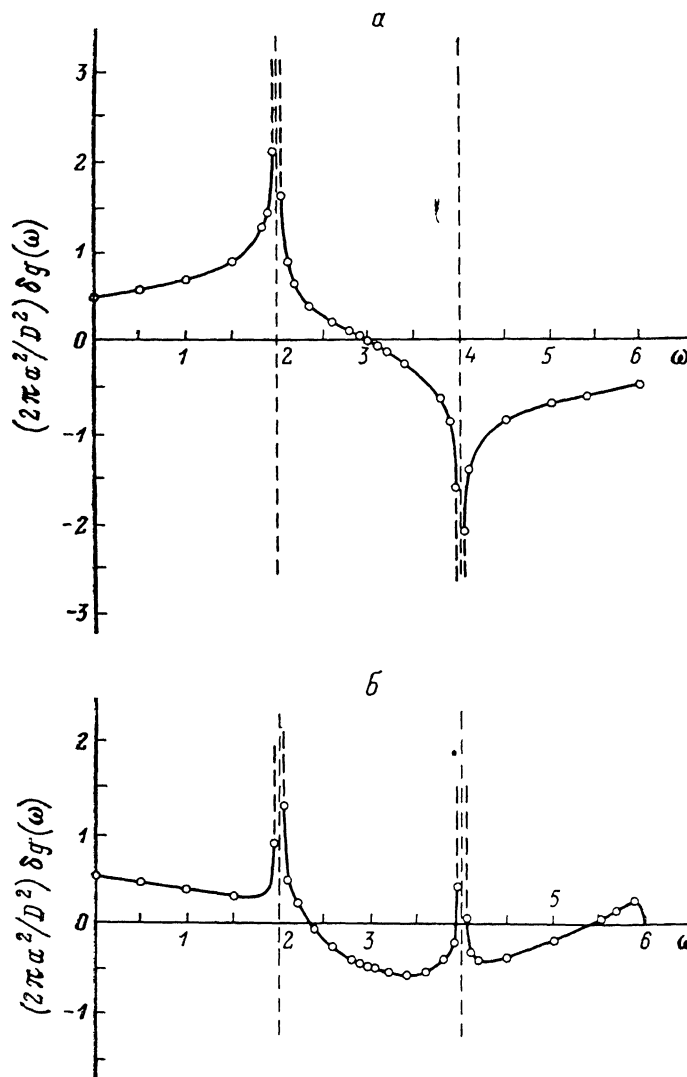


Рис. 1. Плотность магнитных уровней в ферромагнитной пленке при $\beta=1$ (а), $4/3$ (б)

Эйлера—Маклорена при вычислении суммы по дискретному квазимпульсу p в формуле (12) дает возможность в первом приближении по λ/L разделить $g_v(\omega)$ на объемную и поверхностную части в полной аналогии с тем, как это сделано в [6]

$$g_v(\omega) = g_0(\omega) + g_1(\omega), \quad (14)$$

$$g_0(\omega) = (D^2 L / 2\pi a^3) \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{J}_0^2(t) e^{-i(\omega-3)t}, \quad (15)$$

где $g_0(\omega)$ имеет ту же структуру, что и в кристалле неограниченного размера, а $g_1(\omega)$ определяется граничными условиями на поверхности и в силу специфики формулы Эйлера—Маклорена зависит от минимального

p_{\min}^i и максимального p_{\max}^i значения волновых векторов из интервала $[0, \pi]$, являющихся решением уравнения (4) ($i=s, c$).

Математический анализ уравнения (4) показывает, что для всех значений β

$$p_s^{\min} = \pi/2L, p_s^{\max} = \pi - \pi/L, p_c^{\min} = 0, p_c^{\max} = \pi - \pi/2L. \quad (16)$$

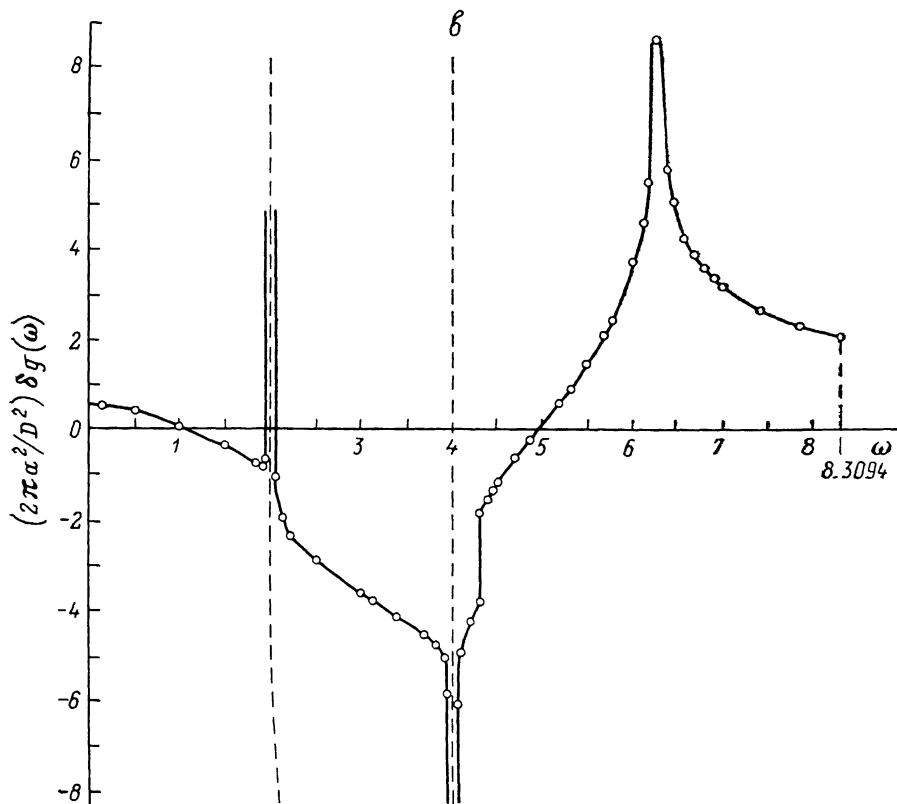


Рис. 1 (продолжение).

Воспользовавшись результатами (16), получаем

$$g_1(\omega) = \frac{D^2}{2\pi a^2} \left\{ \frac{2}{\pi^2} \int_0^\pi dp \left[\frac{\{2\beta(2-\beta) - 4\beta(1-\beta)\cos p\}}{4(1-\beta)(1-\cos p)(1-\beta-\cos p) + \beta^2} - 2 \right] \times \right. \\ \times \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-3+\cos p)^2}{4}} \right\} - \frac{1}{\pi} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-4)^2}{4}} \right\} + \\ \left. + \frac{1}{\pi} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} \right\}. \quad (17)$$

Для частного случая $\beta=1$ интеграцию в (17) удастся провести в явном виде. Соответствующее выражение совпадает с (32) при $a=0$. При наличии поверхностной зоны вклад поверхности в физические величины определяется частью плотности состояний

$$\delta g(\omega) = g_s(\omega) + g_1(\omega). \quad (18)$$

Результаты численного расчета $\delta g(\omega)$ для $\beta=1, 4/3, 4$ представлены на рис. 1, $a-s$. Прежде всего видно, что зависимость δg от ω при любых граничных условиях носит сложный немонотонный характер. Формально из (17) следует, что δg обращается в $(+\infty)$ в точке $\omega=2$ и в $(-\infty)$ в точке $\omega=4$. Однако в этих точках магнитного спектра объемная часть плот-

ности состояний g_0 обнаруживает особенности Ван Хова, что делает процедуру разложения g по $1/pl$ некорректной. Следовательно, в них нельзя ввести поверхностную плотность состояний. Однако такие области, где чувствуется влияние особенностей Ван Хова, экспоненциально узки и потому несущественны. Отличительной особенностью в поведении δg при наличии поверхностной зоны (рис. 1, ϵ) является то, что плотность уровней отлична от нуля вне объемной зоны, т. е. при $\omega > 6$. Она испытывает скачок внутри объемной зоны при некотором значении ω , которое отвечает минимуму поверхностной зоны ($\omega = 4.3$ при $\beta = 4$), и обнаруживает максимум из-за суперпозиции объемной и поверхностной зон ($\omega = 6.35$ при $\beta = 4$).

2. Расчет плотности уровней при измененном обмене параллельно поверхности

В рамках той же модели рассмотрим случай, когда интеграл обмена в поверхностном двумерном слое атомов \mathcal{J}_1 отличен от объемного \mathcal{J} , а $K = \mathcal{J}$. При этом волновое уравнение (1) принимает вид

$$(\omega - U) \Psi_{f, g} = -\mathcal{J} \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta, g} - \mathcal{J} (\Psi_{f, g+1} + \Psi_{f, g-1}), \quad |g| < l,$$

$$(\omega - U_0) \Psi_{f, \pm l} = -\mathcal{J}_1 \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta, \pm l} - \mathcal{J} \Psi_{f, \pm(l-1)}, \quad (19)$$

где $U = 6\mathcal{J}$, $U_0 = 4\mathcal{J}_1 + \mathcal{J}$.

При рассмотрении объемных мод вида (2) получаем следующие уравнения для определения волнового вектора:

$$\text{ctg } p_s l = (A - \cos p_s) / \sin p_s, \quad \text{tg } p_c l = -(A - \cos p_c) / \sin p_c, \quad (20)$$

где

$$A \equiv 5 - 4\tilde{\beta} + 2(\tilde{\beta} - 1)\Gamma_q = 1 + 2(1 - \tilde{\beta})(2 - \Gamma_q),$$

$$\tilde{\beta} = \mathcal{J}_1 / \mathcal{J}, \quad \Gamma_q = \cos q_x + \cos q_y. \quad (21)$$

Теперь максимальное p_{\max} и минимальное p_{\min} значения p в интервале $[0, \pi]$ при всех $\tilde{\beta}$ даются соотношениями ($A \neq 1$)

$$p_s^{\min} = \pi/L, \quad p_s^{\max} = \pi - \pi/L, \quad p_c^{\min} = \pi/2L, \quad p_c^{\max} = \pi - \pi/2L. \quad (22)$$

Как видно из (20), (21), значения p_s и p_c здесь зависят от q_x и q_y . Кроме того (см. (16)), здесь при $A \neq 1$ минимальное значение p_c в (22) отлично от нуля (при $A = 1$ оно равно нулю).

Наряду с объемными состояниями типа (2) в магнотном спектре здесь, вообще говоря, имеются поверхностные состояния. Прежде всего при достаточно больших значениях $\tilde{\beta}$ возможна поверхностная зона, лежащая выше потолка объемной. Ее состояния и энергии по-прежнему даются (6), (7), однако в данном случае величина χ зависит от q_x и q_y , будучи определяемой при $\chi l \gg 1$ из уравнения

$$\chi = \ln |A(q_x, q_y)|. \quad (23)$$

Уравнение (23) может иметь решение $\chi \geq 0$, соответствующее поверхностным состояниям, только при достаточно больших q_x и q_y , удовлетворяющих условию

$$\Gamma_q < 2 - 1/(\tilde{\beta} - 1). \quad (24)$$

В этом случае, согласно (7), поверхностные состояния лежат выше потолка объемной зоны. Как следует из (24), они возможны лишь при $\tilde{\beta} > 5/4$.

В интервале $1 < \tilde{\beta} < 5/4$ осуществляются лишь объемные состояния, а при $\tilde{\beta} < 1$ вновь появляются поверхностные состояния, но другого типа, чем при $\tilde{\beta} > 5/4$. Они описываются волновыми функциями

$$\Psi_{f,g} = e^{iqf} \begin{cases} \text{sh } \kappa_s g, \\ \text{ch } \kappa_s g, \end{cases}$$

их энергия дается выражением

$$\omega_s = 3 - \text{ch } \kappa - \cos q_x - \cos q_y, \quad (25)$$

где κ при $\kappa l \gg 1$ по-прежнему дается (23). Невзирая на изменение знака перед $\text{sh } \kappa$ по сравнению с (7), магنونные частоты (25) оказываются неотрицательными, что вызвано зависимостью κ от q_x и q_y , приводящей к обращению κ в нуль при $q_x = q_y = 0$.

Следует подчеркнуть, что поверхностная зона (25), лежащая внутри объемной зоны, получилась в приближении ближайших соседей. Аналогичный результат был получен в [3] с учетом взаимодействия и между вторыми по дальности соседями. Учет взаимодействия между более удаленными друг от друга соседями должен привести к смешиванию состояний объемной и поверхностной зон, что эквивалентно появлению поверхностного резонанса. Этим будет снято кажущееся противоречие между результатами [2] и [3].

В рассматриваемом в данном разделе случае при $\beta < 1$ влияние поверхности на плотность уровней в соответствии с (18) проявляется через поверхностную плотность $g_S(\omega)$

$$g_S(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega-3)t} \sum_{qxqy} \Theta[A^2 - 1] e^{-it\Gamma_q} e^{-it(A^2+1)/2A} \quad (26)$$

и через часть g_1 объемной плотности уровней g_V (9), зависящую от толщины пленки (см. (14), (15)).

$$g_1(\omega) = \bar{J}(\omega) - \frac{N_x N_y}{2\pi^2} \left[\bar{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} + \bar{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-4)^2}{4}} \right\} \right], \quad (27)$$

где

$$\bar{J}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega-3)t} \sum_{qxqy} e^{-it\Gamma_q} G(\Gamma_q), \quad (28)$$

$$G(\Gamma_q) = \int_0^{\pi} \frac{(1-A^2) e^{-it \cos p} dp}{[1 - 2 \cos p A + A^2]}. \quad (29)$$

Выражение (26) написано с учетом (23), (25) и интегрального представления для δ -функции. При написании (27)–(29), кроме этого представления, использована формула Эйлера–Маклорена и (22).

Вычислим интеграл $\bar{J}(\omega)$ для двух случаев $\tilde{\beta} = 1 \pm \alpha$, где α — малый параметр ($\alpha > 0$), когда $A = 1 \mp 2\alpha$ ($2 - \Gamma_q$). Видно, что при A , близком к единице, основной вклад в интеграл $G(\Gamma_q)$ будет давать область импульсов p , близких к нулю, и потому в первом порядке по α

$$G(\Gamma_q) = \pm e^{-it} (\pi - 2ab_0/\pi), \quad (30')$$

где $b_0 = 2(2 - \Gamma_q)$. Соответственно интеграл $\bar{J}(\omega)$ примет вид

$$\bar{J}(\omega) = \pm \frac{N_x N_y}{\pi^2} \bar{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} \left(1 - \frac{4a\omega}{\pi^2} \right). \quad (31)$$

Согласно (27), используя (31), имеем

$$g_1(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{N_x N_y}{\pi^2} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} - \frac{4a\omega N_x N_y}{\pi^4} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} - \\ - \frac{N_x N_y}{2\pi^2} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-4)^2}{4}} \right\}, \quad \tilde{\beta} = 1 + \alpha, \\ - \frac{3}{2} \frac{N_x N_y}{\pi^2} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} + \frac{4a\omega N_x N_y}{\pi^4} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} - \\ - \frac{N_x N_y}{2\pi^2} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-4)^2}{4}} \right\}, \quad \tilde{\beta} = 1 - \alpha. \end{cases} \quad (32)$$

Помимо этого образуются поверхностные уровни, плотность которых задается следующим выражением:

$$g_S(\omega) = \Theta(\alpha) \frac{2N_x N_y}{\pi^2} \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\}, \quad (33)$$

где

$$\Theta(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha \geq 0, \\ 0, & \alpha < 0. \end{cases}$$

Из выражения (32) видно, что появление поверхностных уровней приводит к скачку объемной плотности состояний g_1 , сопровождающемуся ее понижением. Однако, согласно (32), (33), суммарная поверхностная плотность уровней δg (18), как и должно быть, при изменении знака α скачка не испытывает. Выражение для δg логарифмически расходится при $\omega=2$ и $\omega=4$, что является проявлением особенностей Ван Хофа в объемном магнотном спектре.

При параметре $\tilde{\beta}$, удовлетворяющем неравенству (24), происходит отщепление поверхностных уровней от потолка объемной магнотной зоны. В этом случае выражение для g_S , аналогичное (26), записывается в виде

$$g_S(\omega) = \frac{N_x N_y}{\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega-3)t} \int_0^{\pi} dq_x \int_0^{\pi} dq_y e^{-it\Gamma_q} e^{-it \frac{A^2+1}{2A}} \Theta\left(\tilde{\beta} - 1 - \frac{1}{2-\Gamma_q}\right), \quad (34)$$

где A определено соотношением (21).

Рассмотрим случай $\tilde{\beta} = 5/4 + \tilde{\delta}$, где $0 < \tilde{\delta} \ll 1$, что отвечает зарождению поверхностной зоны у потолка объемной зоны. Согласно (34), вклад в $g_S(\omega)$ будет давать область импульсов q_x, q_y , близких к π , что дает возможность воспользоваться разложением $\cos q_i$ ($i=x, y$) по малому параметру $\tilde{q}_i = \pi - q_i$. Тогда, используя близость A к -1 , выражение (34) можно записать в виде

$$g_S(\omega) = (N_x N_y / \pi) \Theta(6 + 32\tilde{\delta}^2 - \omega) \Theta(\omega - 6 - 32\tilde{\delta}^2 + 16\tilde{\delta}), \quad (35)$$

т. е. поверхностные состояния порождают ступеньку в плотности состояний, выходящую за пределы потолка объемной зоны.

3. Средняя намагниченность

Воспользовавшись выражением для плотности магнотных уровней δg (18), рассмотрим зависимость намагниченности $M(T)$ и точки Кюри T_c от граничных условий на поверхности пленки. Ограничимся ситуацией, обсужденной в разделе 1. Средняя намагниченность кристалла в расчете на один атом в спин-волновом приближении дается выражением

$$M = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, p} m_{\mathbf{q}, p} \equiv S - \bar{m}(T), \quad (36)$$

$$\bar{m}(T) = \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{q}, p} m_{\mathbf{q}, p}, \quad (37)$$

где S — спин атома, $m_{\mathbf{q}, p}$ — функция распределения магнов, p включает в себя p_x, p_y и κ . Штрих под знаком суммы означает, что в ней опущен полностью симметричный магнот. Если спин атома большой $2S \gg 1$, спин-волновое приближение имеет область применимости и при $T > \mathcal{J}$.

Поскольку в этом случае магнотная функция распределения равна $T/\omega_{\mathbf{q}, p}$, размагниченность $\bar{m}(T)$ в этой области пропорциональна темпе-

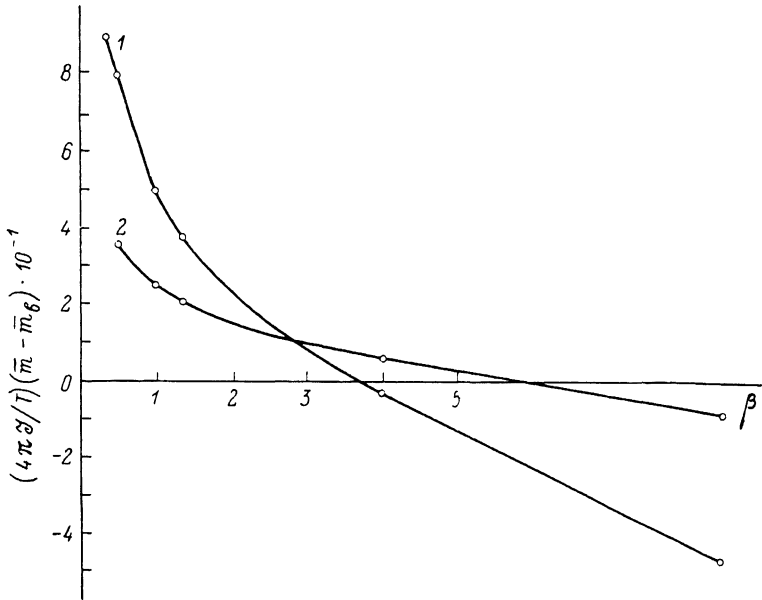


Рис. 2. Зависимость $\Delta m = \bar{m} - \bar{m}_b$ от параметра β .

ратуре. В частности, для нашей задачи выражение для размагниченности с учетом (13)—(18) может быть записано в виде

$$\bar{m} = \frac{1}{2\mathcal{J}N} \int_{\omega_0}^{\beta} \frac{T}{\omega} g(\omega) d\omega = \frac{T}{4\pi\mathcal{J}} \left(\mathcal{J}_b + \frac{1}{N_z} \mathcal{J}_z \right) = \bar{m}_b + \frac{T}{4\pi\mathcal{J}} \frac{1}{N_z} \mathcal{J}_z, \quad (38)$$

где

$$\mathcal{J}_b = \int_0^{\beta} \frac{d\omega}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{J}_0^3(t) e^{-i(\omega-3)t} dt,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_z = & \frac{1}{\pi} \int_{\omega_0}^{\beta} \frac{d\omega}{\omega} \left[\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} dp \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-3+\cos p)^2}{4}} \right\} \times \right. \\ & \times \left[\frac{2\beta(2-\beta) - 4\beta(1-\beta)\cos p}{4(1-\beta)(1-\cos p)(1-\beta-\cos p) + \beta^2} - 2 \right] - \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-4)^2}{4}} \right\} + \\ & \left. + \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-2)^2}{4}} \right\} + \Theta\left(\beta - \frac{4}{3}\right) \tilde{K} \left\{ \sqrt{1 - \frac{(\omega-3-\text{ch } \kappa)^2}{4}} \right\} \right], \end{aligned}$$

\bar{m}_b — размагниченность неограниченного кристалла, $N_z = L/a$ — число атомных слоев в пленке по нормали к поверхности.

Необходимость обрезания интеграла \mathcal{J}_z на нижнем пределе ω_0 обусловлена тем, что поверхностная плотность магнетонных уровней (17) при $\omega \rightarrow 0$ стремится к постоянной величине и потому \mathcal{J}_z логарифмически расходится. Между тем, как уже обсуждалось, введение $\delta g(\omega)$ в этом пределе незаконно, так как нарушено условие квазиклассичности. Естественным параметром обрезания является первый квантовый уровень, т. е. $\omega_0 \approx a^2/L_0^2$.

На рис. 2 представлены результаты численного расчета зависимости $\Delta m = \bar{m} - \bar{m}_b$ от параметра β для $N_z = 5$ (1) и 14 (2). Прежде всего видно, что для случая, когда обменные взаимодействия не возмущаются поверхностью $\beta = 1$, средняя размагниченность в пленке \bar{m} больше, чем в массивном образце \bar{m}_b . При этом чем толще пленка, тем меньше Δm по абсолютной величине, но размерная зависимость Δm , строго говоря, не сводится

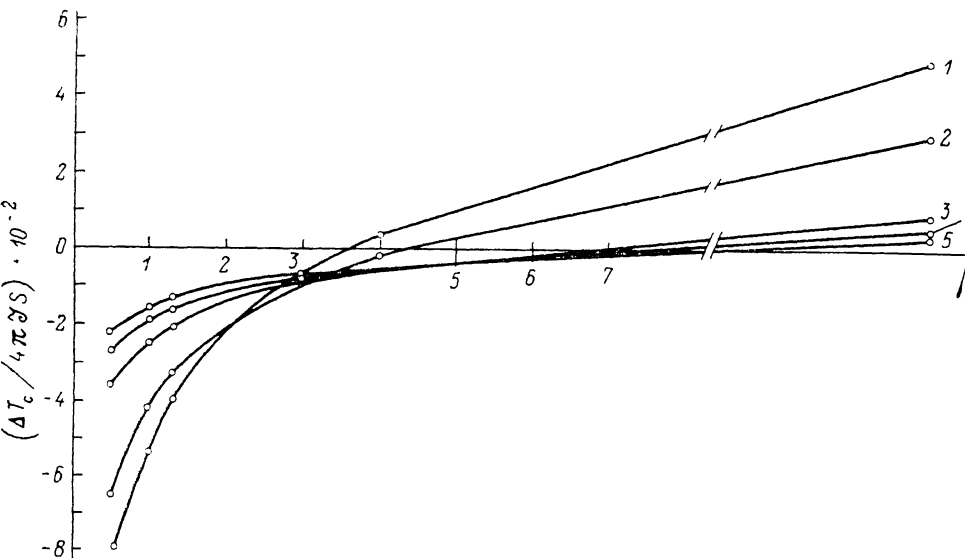


Рис. 3. Зависимость точки Кюри от граничных условий на поверхности для пленок разной толщины. $N_z = 5$ (1), 7 (2), 14 (3), 20 (4), 25 (5).

к обратной пропорциональности $1/L$ из-за размерной зависимости параметра обрезания. При ослаблении поверхностного обмена ($\beta < 1$) смещение средней размагниченности в пленке относительно объемного ее значения растет. В противоположном случае усиленного поверхностного обмена по сравнению с объемным ($\beta > 1$) Δm будет уменьшаться с ростом β и начиная с некоторого критического значения $\beta = \beta_c(L)$ поменяет знак на обратный, т. е. средняя размагниченность в пленке станет меньше размагниченности массивного образца. Для каждой конкретной толщины пленки L будет существовать свое критическое β_c . Так, например, для пленки, толщина которой отвечает $N_z = 5$, величина $\beta_c = 3.7$.

Для приближенной оценки температуры Кюри T_c как функции L будем исходить из метода, состоящего в приравнивании среднего числа магнетонов на атом величине спина магнитного атома. Для больших спинов температура Кюри дается выражением

$$T_c \simeq S \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, p} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}, p}} \right]^{-1} = \frac{ST}{\bar{m}}. \quad (39)$$

Воспользовавшись для \bar{m} выражением (38), получаем сдвиг температуры Кюри T_c в тонких ферромагнитных пленках по сравнению с ее значением в массивных образцах T_c^b

$$\Delta T_c / 4\pi JS = (-1/N_z) (\mathcal{J}_z / \mathcal{J}_z^b), \quad \Delta T_c = T_c - T_c^b. \quad (40)$$

Зависимость точки Кюри от граничных условий на поверхности пленки представлена на рис. 3 для пленок разной толщины. Видно, что при $\beta=1$, когда граничное условие соответствует просто обрыву связи на поверхности, температура Кюри T_c в пленке меньше ее значения в массивном образце T_c^b (т. е. $\Delta T_c = T_c - T_c^b$ отрицательна). При этом чем толще пленка, тем меньше ΔT_c по абсолютной величине. Аналогичная картина будет при $\beta < 1$. Однако здесь следует отметить, что с уменьшением β (ослабление поверхностного обмена) размерный сдвиг температуры Кюри ΔT_c будет расти по абсолютной величине. При $\beta > 1$ обрыв связи на поверхности пленки компенсируется увеличением обменного интеграла в приповерхностном слое. В силу этого будет существовать такое значение $\beta_c(L)$, при котором температура Кюри пленки T_c будет равна температуре Кюри массивного образца T_c^b . Следовательно, при $\beta = \beta_c$ величина ΔT_c будет менять знак. Для области β , где $\Delta T_c > 0$, наблюдается противоположная зависимость ΔT_c от обмена на поверхности: с ростом β сдвиг ΔT_c будет расти. Разумеется, сказанное выше предполагает, что у образца есть только объемная точка Кюри, но нет точки Кюри поверхностной. Детальный анализ этой проблемы выходит за пределы нашей работы, однако в отсутствие анизотропии существование поверхностной намагниченности в отсутствие объемной по крайней мере не самоочевидно.

4. Поверхностная намагниченность

Самостоятельный интерес представляет рассмотрение поверхностной намагниченности, определенной через среднюю размагниченность атома на поверхности

$$\langle b_{\mathbf{f}, i}^{\dagger}, b_{\mathbf{f}, i} \rangle = \sum_{\mathbf{q}, p} \Psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}(\mathbf{q}) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) m_{\mathbf{q}, p}, \quad (41)$$

где $b_{\mathbf{f}, g}^{\dagger}$, $b_{\mathbf{f}, g}$ — магنونные операторы

$$b_{\mathbf{f}, g} = \sum_{\mathbf{q}, p} \Psi_{\mathbf{f}, g}(\mathbf{q}, p) b_{\mathbf{q}, p}, \quad (42)$$

$\Psi_{\mathbf{f}, g}(\mathbf{q}, p)$ — нормированные волновые функции (2) или (6); индекс « p » включает в себя p_c, p_s, x_c и x_s . Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle b_{\mathbf{f}, i}^{\dagger}, b_{\mathbf{f}, i} \rangle = & \frac{2a^3}{D^2 L} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{p_s} \sin^2 p_s l m_{\mathbf{q}, p_s} + \sum_{p_c} \cos^2 p_c l m_{\mathbf{q}, p_c} \right) + \\ & + \frac{a^2}{D^2} \sum_{\mathbf{q}} (x_s \operatorname{th} x_s l m_{\mathbf{q}, x_s} + x_c \operatorname{cth} x_c l m_{\mathbf{q}, x_c}) \Theta \left(\beta - \frac{4}{3} \right). \end{aligned} \quad (43)$$

Пользуясь (3), (8), определяем

$$\begin{aligned} \sin^2 p_s l = \cos^2 p_c l = 1 \left[1 + \frac{(1 - \cos p_i)^2}{\sin^2 p_i} \left(1 + \frac{2\beta}{2(1 - \beta)(1 - \cos p_i) - \beta} \right)^2 \right] \equiv \\ \equiv \varphi(p_i, \beta), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\operatorname{th} x_s l = \operatorname{cth} x_c l = 1 \left[\frac{1 + \operatorname{ch} x_i}{\operatorname{sh} x_i} \left(1 + \frac{2\beta}{2(1 + \operatorname{ch} x_i)(1 - \beta) - \beta} \right) \right] \equiv \varphi(x_i, \beta), \quad (45)$$

где $i=(s, c)$. Учитывая, что при $xl \gg 1$, согласно (8), $x_c = x_s = x$, получаем при низких температурах $T \ll T_c/S$, ограничиваясь квадратичными членами в магنونном спектре, следующее выражение для поверхностной размагниченности:

$$\langle b_{\mathbf{f}, i}^{\dagger}, b_{\mathbf{f}, i} \rangle \simeq 2 \left(\frac{T}{4\pi\sigma^2} \right)^{3/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{3/2}}. \quad (46)$$

Из формулы (46) следует, что для квадратичного магنونного спектра в приближении низких температур поверхностная размагниченность

в два раза больше объемной независимо от граничных условий. Этот результат совпадает с полученным ранее в [1, 3], но не совпадает с результатом [4], где вместо двойки получилась тройка.

В высокотемпературном пределе $T_c/S \ll T \ll T_c$ поверхностная намагниченность записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle b_{\bar{i}}^{\dagger}, i b_{\bar{i}}, i \rangle &= \frac{a^2 T}{D^2 \mathcal{J}} \sum_{q_x, q_y} \left\{ \frac{2a}{L} \sum_p \frac{\varphi(p, \beta)}{3 - \cos q_x - \cos q_y - \cos p} + \right. \\ &\quad \left. + \Theta\left(\beta - \frac{4}{3}\right) \frac{\chi\varphi(x, \beta)}{3 - \cos q_x - \cos q_y + \text{ch } x} \right\} = \\ &= \frac{2T}{\mathcal{J}\pi} \left[\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} dp \frac{1}{3 - \cos p} \tilde{K} \left\{ \frac{2}{3 - \cos p} \right\} \varphi(p, \beta) + \right. \\ &\quad \left. + \Theta\left(\beta - \frac{4}{3}\right) \chi\varphi(x, \beta) \frac{1}{3 + \text{ch } x} \tilde{K} \left\{ \frac{2}{3 + \text{ch } x} \right\} \right] = \frac{T}{2\pi\mathcal{J}} J_L. \end{aligned} \quad (47)$$

Как видно из (47), в отличие от низкотемпературного предела поверхностная намагниченность существенно зависит от граничных условий. Результаты численного расчета зависимости поверхностной намагниченности от β в высокотемпературном приближении следующие.

β	1	4/3	1.6	3	4
J_L	6.2704	6.0264	5.0473	3.6474	3.4642

Видно, что с ростом β , соответствующим усилению поверхностного обмена, поверхностная намагниченность уменьшается и при $\beta \approx 5 \div 6$ сравнивается с объемной. При больших β , если $S \gg 1$, с повышением температуры еще в спин-волновой области происходит изменение знака разности поверхностной и объемной намагниченности.

Список литературы

- [1] Rado G. T. // Bull. Am. Phys. Soc. 1957. V. 2. P. 127—130.
- [2] Balian R., Bloch C. // Ann. Phys. 1970. V. 60. P. 401—447.
- [3] Mills D., Maradudin A. // J. Phys. Chem. Sol. 1967. V. 28. P. 1855—1874.
- [4] Mathon J., Ahmad S. B. // Phys. Rev. 1988. V. B 37. N 1. P. 660—663.
- [5] Григорьева Л. К., Лидоренко Н. С., Нагаев Э. Л., Чижик С. П. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 3 (9). С. 1050—1062.
- [6] Крещина Л. Т., Нагаев Э. Л. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1763—1772.

НПО «Квант»
Москва

Поступило в Редакцию
26 июля 1990 г.