

# Влияние пространственного квантования электронного спектра на обменное взаимодействие в мультислоях

© Ю.П. Ирхин

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 8 июня 1999 г.)

Установлено сильное влияние квантования электронного спектра в немагнитных прослойках в мультислоях на зависимость обменного взаимодействия от толщины прослойки. В простейшей модели РККИ оказывается возможным объяснение антиферромагнитного провала при малых толщинах, наблюдаемого экспериментально в мультислоях Fe/Cr.

В настоящей работе рассмотрено влияние пространственного квантования электронов проводимости немагнитного слоя в мультислоях (МС) на магнитную восприимчивость  $\chi$  и обменное взаимодействие  $I(R)$  ( $R$  — толщина слоя).

В литературе было предложено несколько механизмов, объясняющих возникновение упорядоченной магнитной структуры в МС. Исходным обычно является РККИ взаимодействие, усложненное учетом дискретности решетки и реальной геометрии поверхности Ферми.

Несмотря на существенные успехи в качественном понимании природы наблюдаемых магнитных эффектов, в количественном отношении их однозначное теоретическое объяснение еще отсутствует. Последнее относится к оценке величины периодов осцилляций, значений их амплитуд и зависимости от толщины пленки, являющихся основными характеристиками магнитной структуры МС (см., например, [1]).

Особенно значительные трудности возникают при объяснении длиннопериодных осцилляций, соответствующих малым значениям волнового вектора  $\mathbf{k}$ , которые вряд ли можно объяснить реальными значениями импульса Ферми  $\mathbf{k}_F$  или другими характерными волновыми векторами электронной структуры при одновременном требовании достаточно большой амплитуды этих осцилляций.

Ярким примером этого является так называемый антиферромагнитный (АФМ) провал в МС Fe/Cr, наблюдаемый при малых толщинах слоев Cr [2] (рис. 1). Этот провал может быть интерпретирован как появление интенсивной длиннопериодной гармоникой во взаимодействии между магнитными слоями.

Насколько нам известно, в литературе существует только одна попытка объяснения АФМ провала. В работе [3] предлагается помимо обычного РККИ взаимодействия ввести в рассмотрение на основе  $sd$ -Фридель-андерсоновской модели добавочный механизм, соответствующий четвертому порядку теории возмущений по  $sd$ -взаимодействию. Авторам [3] удалось получить за счет конкуренции указанных механизмов удовлетворительное согласие с экспериментом. Однако при этом необходимо предполагать большую величину членов четвертого порядка. Предлагаемый нами механизм может служить альтернативой работы [3].

## 1. Расчет $I(R)$ в МС

Косвенное обменное взаимодействие  $I(R)$  между магнитными слоями, разделенными немагнитной прослойкой толщиной  $R$ , осуществляемое электронами проводимости прослоек, может быть описано в модели РККИ следующим образом:

$$I(\mathbf{R}) = (V/(2\pi)^3)^2 \iint I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}) d\mathbf{k}d\mathbf{k}',$$

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = I_{sd}^2 f(\varepsilon_{\mathbf{k}})(1 - \varepsilon_{\mathbf{k}})/(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (1)$$

Здесь  $I_{sd}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — обменный интеграл электронов проводимости (с импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ ) со спинами магнитных ионов,  $f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  — функция Ферми,  $\varepsilon(\mathbf{k})$  — энергия электронов,  $V$  — нормировочный объем.

Интегрирование в формуле (1) приводит в приближении свободных электронов к известным формулам для неоднородной магнитной восприимчивости  $\chi(q)$  ( $q = k - k'$ ) и для осциллирующего обменного взаимо-

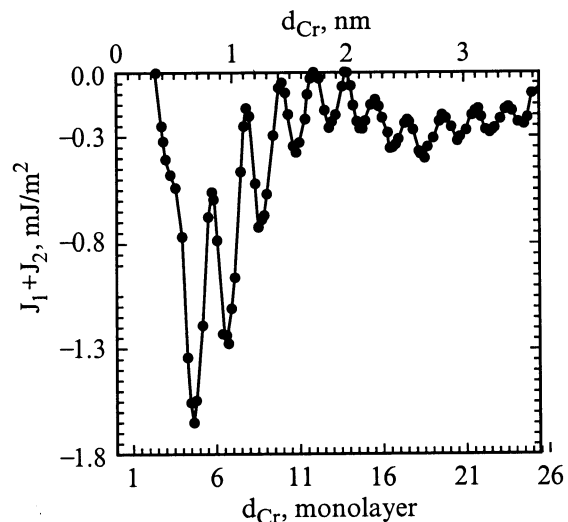


Рис. 1. Зависимость энергии обменного взаимодействия на единицу поверхности интерфейса от толщины прослойки хрома по данным работы [2].

действия  $I(R)$  ( $N$  — число атомов в объеме  $V$ )

$$\chi(q) = (mk_F/8\pi^2 N \hbar^2) \left[ 1 + ((4k_F^2 - q^2)/4k_F q) \times \ln |(q + 2k_F)/(q - 2k_F)| \right], \quad (2)$$

$$I(R) = (9\pi/2)(I_{sd}^2/\varepsilon_F)(\sin x - x \cos x)/x^4, \quad x = 2k_F R. \quad (3)$$

В настоящей работе мы вычислим  $I(R)$ , учитывая две особенности ситуации в МС.

1) Возможность сведения задачи к одномерному случаю, поскольку интерес представляет  $I(R_z)$  ( $z$  перпендикулярно плоскостям МС). При этом по координатам  $x$  и  $y$  может быть проведено интегрирование, после чего мы получим  $I(R_z)$  между магнитными слоями.

2) Пространственное квантование импульсов электронов  $k_z$  для немагнитного слоя.

Для дальнейшего представляет интерес помимо изотропных случаев (2) и (3) рассмотреть также одноосный случай с выделением оси  $z$ . Переходя к переменным  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{q}$  и считая, что  $I_{sd}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \text{const}$  не зависит от  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ , мы можем в (1) вынести  $I_{sd}^2$  за знак интеграла, а знаменатель записать в виде

$$\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (2k_{\perp} q_{\perp} \cos \varphi + 2k_z q_z + q_z^2 + q_{\perp}^2), \quad (4)$$

где  $\varphi$  — угол между  $k_{\perp}$  и  $q_{\perp}$  в плоскости  $xy$ . В этом случае (1) сводится к известному интегралу для двумерного случая [4] путем замены

$$q_{\perp} + 2k_z q_z / q_{\perp} + q_z^2 / q_{\perp} \rightarrow q^*, \quad (5)$$

так что после интегрирования (1) по  $k_{\perp}$  и  $\varphi$  получим

$$I(q^*, q_z) = \frac{V_2 m}{4\pi \hbar^2 q_{\perp}} \times \begin{cases} q^* - \sqrt{(q^*)^2 - 4k_{F\perp}^2}, & q^* > 2k_{F\perp}, \\ q^*, & q^* \leq 2k_{F\perp}. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь  $V_2$  — нормировочный объем для 2D случая.

Выражение (6) формально совпадает с 2D случаем, приведенным в [4], однако  $q^*$  зависит от  $q_z$  и  $k_z$ . Формула (6) удобна в том отношении, что она позволяет выполнить интегрирование и получить анизотропный случай  $I(R_{\perp}, R_z)$ .

В данной работе ограничимся случаем бесконечной 2D среды для  $R_{\perp}$ , пренебрегая атомной структурой в магнитных плоскостях  $\perp z$ . Наоборот, толщину немагнитной прослойки будем считать конечной. В этих предположениях задача значительно упрощается. Теперь  $I(\mathbf{R})$  зависит только от  $R_z$  и мы можем проинтегрировать (1) по  $\{R_x, R_y\} = R_{\perp}$ , что сразу дает в правой части (1)  $\delta_{q_{\perp},0} = \delta_{q_x,0} \delta_{q_y,0}$ . Последнее приводит произведение  $q^* q_{\perp}$ , согласно (5), к следующему виду:

$$q^* q_{\perp} = q_z (2k_z + q_z). \quad (7)$$

Отметим, что при учете атомной структуры в плоскости с параметром решетки  $a_{\perp}$  возникает зависимость  $I(R) = \sum_a I(R + a_{\perp})$ , соответствующая учету обмена не только между ионами по оси  $z$ , но и с их соседями в плоскости. В этом случае в интеграле (1)  $\delta_{q_{\perp},0}$  не возникает и следует рассматривать общее выражение  $I(q_{\perp}, q_z)$ , например, в форме (6). Более детальное рассмотрение показывает, что при этом количественные результаты изменяются, но в целом картина остается прежней.

Далее учтем пространственное квантование по оси  $z$

$$k_z = \pi n / a N_z, \quad n = \pm 1, 2, \dots, N_z, \quad (8)$$

$$q_z = k'_z - k_z = \frac{\pi \nu}{a N_z}, \quad \nu = \pm 1, 2, \dots, 2N_z. \quad (9)$$

Учитывая все это, получаем из (1) следующий результат:

$$I(q_z) = I_{sd}^2 \frac{m}{4\hbar^2} \sum_{k_z} \frac{f(\varepsilon_k)(1 - f(\varepsilon_{k+q}))}{q_z(q_z + 2k_z)}, \quad (10)$$

$$I(R_z) = 1/N_z \sum_q I(q_z) \exp(iq_z R_z). \quad (11)$$

При низких  $T \sim 0$  функции Ферми в (6) определяют пределы суммирования по  $k_z$  и  $q_z$  или по  $n$  и  $\nu$ . Обозначая  $f = n_F$ , имеем

$$f + 1 - n \leq \nu \leq N - n,$$

$$f + 1 + n \leq \nu \leq N + n, \quad (\leq n \leq f). \quad (12)$$

Пределы (12) определяют порядок суммирования по  $n$  и  $\nu$ . Поскольку пределы суммирования по  $\nu$  зависят от  $n$ , то удобно сначала выполнить суммирование по  $\nu$ , а затем по  $n$ . Учитывая, что для нашего дискретного случая  $\exp(iq_z R_z) = \exp(i\pi \nu) = (-1)^{\nu}$ , получаем окончательно

$$I(R_z) = \frac{I_{sd}^2 m a^2}{2\pi^2 \hbar^2 N_z} \sum_{n=-f}^f \left\{ \sum_{\nu=-f+1-n}^{N_z-n} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu(\nu+2n)} + \sum_{\nu=-f+1+n}^{N_z+n} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu(\nu-2n)} \right\} = \frac{I_{sd}^2 m a^2}{2\pi^2 \hbar^2 N_z} F(N_z, f), \quad (13)$$

где функция  $F(N_z, f)$  является аналогом функции Рудермана–Киттеля для непрерывного спектра.

В соотношении (13) предполагается, что уровень Ферми  $f$  занят двукратно. В некоторых случаях возможно и неполное заполнение уровня  $f$ . При этом нижние пределы в суммах по  $\nu$  в (13) будут  $\nu = f \pm n$ , что в отличие от (13) может дать интегрируемую расходимость при  $\nu = 2n$ . Эта расходимость имеет ту же самую природу, что и для непрерывного спектра при  $q = 2k_F$  в 1D случае.

Вычисление выражения (13) приводит к стандартным конечным суммам

$$S_1(r) = \sum_{p=1}^r \frac{1}{2p}, \quad S_2(r) = \sum_{p=1}^r \frac{1}{2p+1}, \quad (14)$$

которые подчиняются простым рекуррентным соотношениям и позволяют использовать аналитические

выражения

$$S_1(r) = 1/2(C + \ln r + 1/2r) + O_1(r),$$

$$S_2(r) = 1/2(C + \ln r) + \ln 2 + O_2(r), \quad (15)$$

где  $O_1(r)$  и  $O_2(r)$  малы, за исключением малых  $r = 1, 2$ . При этом функции  $S_1$  и  $S_2$  входят в  $\sum$  в (13) в виде разности, так что член  $\ln r$  исчезает, что позволяет в аналитической форме провести и второе суммирование по  $n$ .

В результате для  $F(R_z)$  получаем из (13) (далее  $N_z = N$ )

$$F(R_z) = F_e(N, f) + F_o(N, f), \quad (16)$$

где  $e$  означает четный,  $o$  — нечетный по слоям  $n$  вклады.

$$F_e(N, f) = \frac{1}{N} \left[ S_1 \left( \frac{N-f}{2} + 1 \right) + S_1 \left( \frac{N+f}{2} - 1 \right) - 2S_1 \left( \frac{N}{2} \right) - \frac{1}{N} - \frac{1}{N-2} \right]_{f>2}$$

$$+ \frac{1}{f} \left[ S_1(f-2) - \frac{1}{f} - \frac{1}{2} \right]_{f>4}$$

$$+ \frac{2}{f} \left[ \Delta \left( \frac{N-f}{2} \right) - \Delta \left( \frac{N+f}{2} \right) + \Delta(f) \right]$$

$$- \frac{2}{f-2} \left[ \Delta(1) - \Delta(f=1) \right]_{j>2},$$

$$\Delta(r) = S_1(r) - S_2(r), \quad (17)$$

или с учетом разложения (15)

$$F_e(N, f) = \frac{1}{N_z} \left[ \ln \left( \frac{N^2 - f^2}{N^2} \right) + \frac{N}{N^2 - (f-1)^2} - \frac{3N-4}{N(N-2)} \right]_{f>2}$$

$$+ \frac{1}{f-2} \left[ 1 + \frac{1}{2(f-1)} - 2 \ln 2 \right]_{f>2}$$

$$+ \frac{1}{2f} \left[ C - 1 + \ln(f-2) + \frac{1}{2(f-2)} - \frac{2}{f} \right]_{f>4}$$

$$+ \frac{2}{f} \left[ \frac{f}{N^2 - f^2} + \frac{1}{4f} - \ln 2 \right]. \quad (18)$$

Формула (17) справедлива и для  $f = 2$ , когда в (17) остается только третья квадратная скобка. Далее

$$F_o(N, f) = \frac{1}{N+1} \left[ S_1 \left( \frac{N-f}{2} \right) - S_1 \left( \frac{N+f}{2} \right) - \frac{1}{f+1} \left[ S_1(f-1) - S_1(1) \right]_{f \geq 4} - \frac{2}{f-1} \left[ -1 - S_1(f-1) + S_2(f) \right]. \quad (19)$$

При использовании разложения (15) формула (19) приобретает вид

$$F_o(N, f) = \frac{1}{N+1} \left[ \frac{1}{2} \ln \frac{N-f}{N+f} + \frac{f}{N^2 - f^2} \right] - \frac{1}{2(f+1)} \left( C + \ln f - \frac{1}{2f} - 1 \right) + \frac{2}{f-1} \times \left( 1 - \ln 2 - \frac{1}{4f} \right), \quad (f > 2, N-f > 2). \quad (20)$$

Формулы (16)–(20) записаны для случая четных  $N$  и  $f$ . Для вычисления  $F(N, f)$  при  $N$  нечетных,  $f$  нечетных и их комбинаций с четными значениями  $N, f$  могут быть использованы формулы связи, вычисляемые из (13)

$$\Delta F_N^\pm(N_o \equiv N_e \pm 1, f_e) = F(N_o, f_e) - F(N_e, f_e) = \begin{cases} \frac{2}{N+1} \left[ -\Delta(v) + \Delta(u) + \frac{f}{(N+1)(N+f+1)} \right], \\ \frac{2}{N} \left[ \Delta(v) - \Delta(u) - \frac{f}{N(N-f)} \right], \end{cases} \quad (21)$$

$$\Delta F_f^-(N_e, f_e - 1) = F(N_e, f_e - 1) - F(N_e, f_e) = \frac{2}{f} \left[ \Delta(u) - \Delta(v) - \frac{3}{2f} \right],$$

$$\Delta F_N^-(N_o = N_e - 1, f_o) \equiv F(N_e - 1, f_o) - F(N_e, f_e) = \frac{2}{N} \left[ -\Delta(u') - \Delta(v') - \frac{N_e - 1}{N_e(N_e - 2)} \right], \quad (22)$$

$$u = (N_e + f_e)/2, \quad v = (N_e - f_e)/2,$$

$$u' = (N_e + f_o + 1)/2, \quad v' = (N_e - f_o + 1)/2. \quad (23)$$

Формулы (16)–(23) исчерпывают все значения  $n$  и  $f$  для вычисления  $F(N, f)$ . К значениям (17)–(23) следует добавить еще слагаемое с  $n = 0$  из формулы (13)

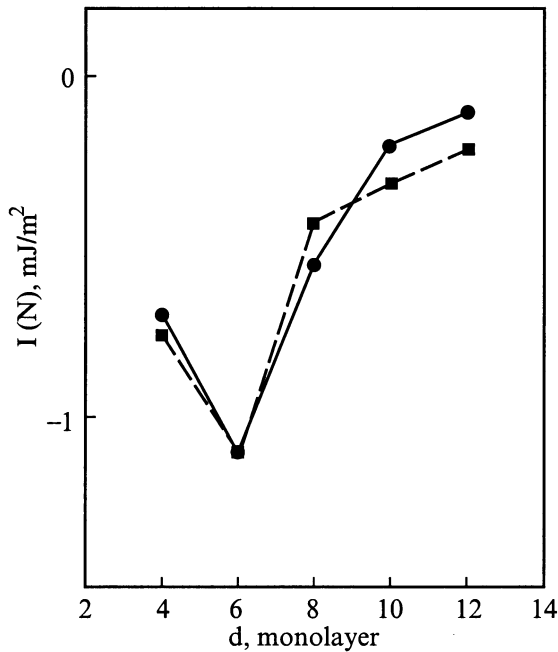
$$F_o(N, f) = \sum_{\nu=f+1}^N (-1)^\nu / \nu^2. \quad (24)$$

Анализ формул показывает: 1)  $F$  медленно убывает с ростом  $N$ ; 2) для всех  $N$   $F(N, f) < 0$ ; 3)  $F(N_o, f) < F(N_e, f)$ ; 4)  $F(N, f)$  немонотонно меняется и по  $N$ , и по  $f$ . Наиболее заметна эта немонотонность при малых  $N$  и  $f$  ( $N, f < 5$ ) и для нечетных  $N$ . Этот эффект связан с большим вкладом в  $F(N, f)$  при переходе от четных  $N$  к нечетным, что и обуславливает, в частности, существование минимума при  $N \sim 6$ .

Кривая  $I(N)$  для  $f/N = 1/2$  приведен на рис. 1. Последнее условие соответствует заполнению дискретных уровней пропорционально толщине немагнитной прослойки  $R_z = Na$ , поскольку двукратно занятыми окажутся наименьшие  $f$  уровней, где  $f = Nz/2$  и  $z$  — число электронов проводимости на атом. Так, при  $z = 1$  занятыми окажутся  $N/2$  уровней, что соответствует  $f = 1$ , для  $N = 2$ ,  $f = 2$  для  $N = 4$  и т.д. Таким образом, из всего массива значений  $I(N, f)$  следует рассматривать для получения зависимости  $I(N)$  значения  $I(N, f)$  при  $f/N = \text{const} = z/2$ .

## 2. Обсуждение и сравнение с экспериментом

Зависимость  $I(N)$  с учетом пространственного квантования существенно отличается от таковой для непрерывного спектра. Особое внимание привлекает возможность объяснения в рамках нашей модели АФМ провала, наблюдаемого в МС Fe/Cr [2,3]. Хотя вряд ли стоит ожидать детального количественного согласия в такой простой модели, тем не менее мы видим на рис. 2 четко выраженный минимум  $I(N)$ , причем для естественного в данной модели значения  $f/N = 0.5$  (один электрон на атом) положение минимума при  $N = 6$  примерно совпадает с экспериментом.



**Рис. 2.** Теоретическая зависимость  $I(N, f)$  по формуле (25) при  $f/N_z = 1/2$ . Кругами обозначены экспериментальные значения, соответствующие рис. 1, квадратами — теоретические значения.

Оценим величину АФМ обмена  $I(R_z) = I(N, f)$ , которая в основном определяется значением обменного интеграла  $I_{sd}$ . Взяв  $I_{sd} = 0.1$  eV, получаем по формуле (13) для  $I(N)$  в минимуме совпадение с экспериментом рис. 1. В пересчете на единицу поверхности интерфейса имеем в единицах  $\text{mJ/m}^2$

$$I(N, f = N/2) = 11(1/N)F(N, f). \quad (25)$$

График функции (25) приведен на рис. 2. Видно, что при одном параметре  $I_{sd}$  он достаточно хорошо отображает экспериментальную кривую рис. 1. При этом значение параметра  $I_{sd}$  согласуется с другими литературными данными. Такое совпадение указывает на перспективность учета пространственного квантования для объяснения физических свойств МС.

Автор благодарен А.Х. Насибуллину, выполнявшему некоторые предварительные расчеты на ранней стадии работы, и В.Ю. Ирхину за критические замечания.

## Список литературы

- [1] Ю.П. Ирхин, А.Х. Насибуллин. Тез. докл. XV школы-семинара "Новые магнитные материалы микроэлектроники". МГУ, М. (1996).
- [2] J.A. Wolf, O. Leng, R. Schreiber, P.A. Grunberg, W. Zinn. J. Magn. Mater. **121**, 1–3, 253 (1993).
- [3] Y. Wang, P.M. Levy, J.L. Fry. Phys. Rev. Lett. **65**, 21, 2732 (1990).
- [4] B. Coqblin. The Electronic Structure of Rare Earth Metals and Alloys. Academic Press, London (1974). 656 p.