

表面与界面的绝缘铁磁理论

冯世平

(北京师范大学物理系)

1986年3月18日收到

提 要

采用 Green 函数技术, 我们讨论了温度从 $T = 0$ 直到 $T = T_c$ 范围内铁磁体表面和界面的磁化强度随温度的变化情况, 所得到表面磁化强度的结果与其他作者的结果一致; 而在界面计算中, 我们发现界面的 T_c 与体内的不同, 并且找到了一个关系式: $T_c < \max(T_c^A, T_c^B)$.

一、引 言

最近一些实验上的进展^[1-6]引起人们对于表面和界面的磁学性质的理论研究, 实验上已能精确地测定铁磁体表面的某些量, 例如表面的临界温度 T_c 等. Pierce 等人最近的实验证实铁磁玻璃 $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ 的表面磁化强度相对于体内的发生了“软化”^[4]. Endoh 等人的实验证实 Fe/Sb 和 Fe/Pd 界面中, 界面的磁化强度相对于体内的减小了^[5]. 理论上, 除了第一原理性的密度泛函方法对于表面和界面的磁性计算之外^[7], Hung 等人和 Selier 等人分别用 Green 函数方法讨论了绝缘铁磁薄膜和表面的铁磁性^[8,9], 所得结果与实验定性相符. 但是他们的方法不能应用于界面问题. 本文推广他们的方法并应用于表面和界面问题.

二、理 论 方 法

在外磁场等于零时, 理想铁磁体的 Heisenberg 哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{l \neq m} I_{lm} \hat{s}_l \cdot \hat{s}_m, \quad (1)$$

式中 I_{lm} 为交换积分. 显然对于沿垂直于表面方向周期破缺的系统, 在距离表面附近的各层中, 平行于表面的交换积分 $I_{\parallel}$ 和垂直于表面的交换积分 $I_{\perp}$ 是不相同的.

1. 在最近邻作用下, 简立方铁磁体表面的磁化强度的自洽计算.

为了方便起见, 我们讨论简立方晶体的 (001) 面, 并且认为表面效应只影响到第二层. 在这些条件下, 文献 [9] 中已求得 Green 函数为

$$g = \frac{1}{\partial \pi(\nu - H_{\text{eff}})} \sigma = \frac{1}{\partial \pi Q} \sigma, \quad (2)$$

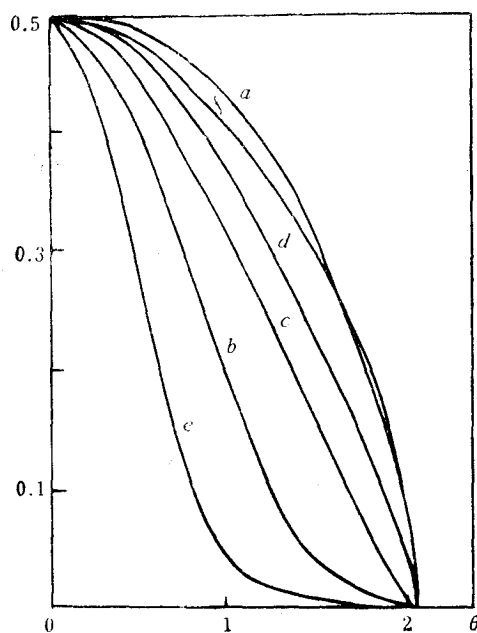


图 1

a $\langle s_z^2 \rangle$; b $\langle s_z^2 \rangle$ $s_{\perp} = 1$, $s_{\parallel} = 1$; c $\langle s_z^2 \rangle$ $s_{\perp} = 0.5$, $s_{\parallel} = 1$;
d $\langle s_z^2 \rangle$ $s_{\perp} = 0.1$, $s_{\parallel} = 1$; e $\langle s_z^2 \rangle$ $s_{\perp} = 0.01$, $s_{\parallel} = 1$;
f $\langle s_z^2 \rangle$ $s_{\perp} = 2$, $s_{\parallel} = 1$; $\theta = kT/2I\hbar\langle s_z^2 \rangle$

式中

$$H_{nm}^{\text{eff}} = [\varepsilon_{\parallel}(m)\sigma_m + \varepsilon_{\perp}(m, m+1)\sigma_{m+1} + \varepsilon_{\perp}(m, m-1)\sigma_{m-1}]\delta_{nm} - [\varepsilon_{\perp}(n, m)\delta_{n, m+1} + \varepsilon_{\perp}(n, m)\delta_{n, m-1}]\sigma_m, \quad (3)$$

$$|Q| = \begin{vmatrix} 2t + \alpha_{00} & \beta_{01} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \beta_{10} & 2t + \alpha_{11} & \beta_{12} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \beta_{21} & 2t + \alpha_{22} & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 2t & 1 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}. \quad (4)$$

(3) 式和(4)式各个量的定义与文献[9]相同。根据线性代数中行列式按行展开的规则, 我们可得

$$|Q|_N = (2t + \alpha_{00})[(2t + \alpha_{11})(2t + \alpha_{22} - 1) - \beta_{12}\beta_{21}]D_{N-3} - \beta_{10}\beta_{01}(2t + \alpha_{22})D_{N-3} + \beta_{10}\beta_{01}D_{N-4}. \quad (5)$$

这里

$$D_N = \begin{vmatrix} 2t & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 2t & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 2t & 1 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} \quad (6)$$

是一个 $N \times N$ 的矩阵。同理, 我们可求得表面各层所对应的代数余子式

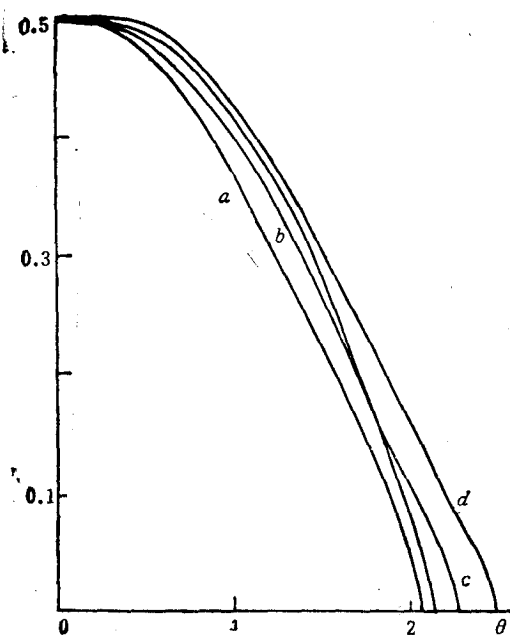


图 2

$s_1^A = 0.8, s_1^B = 1, s_2^A = 0.8, s_2^B = 1; s_x = 0.8;$
 $a \langle s_1^B \rangle; b \langle s_2^B \rangle; c \langle s_1^A \rangle; d \langle s_2^A \rangle$

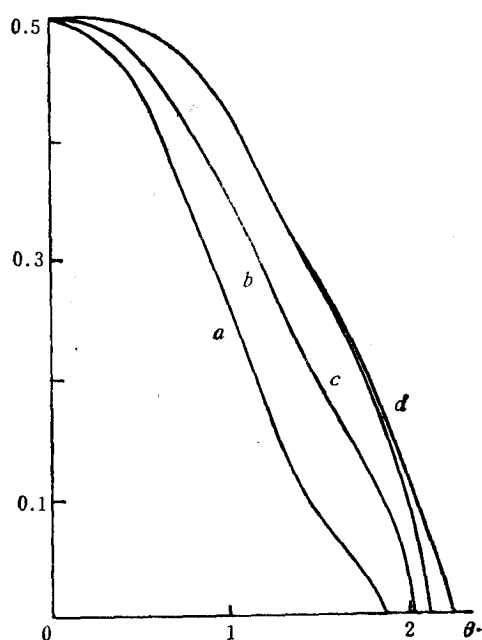


图 3

$s_1^A = 0.5, s_1^B = 1; s_2^A = 1, s_2^B = 1; s_x = 0.9;$
 $a \langle s_1^B \rangle; b \langle s_2^B \rangle; c \langle s_1^A \rangle; d \langle s_2^A \rangle$

$$P_{0N} = (2t + \alpha_{11})(2t + \alpha_{22})D_{N-3} - \beta_{12}\beta_{21}D_{N-3} - (2t + \alpha_{11})D_{N-4}, \quad (7)$$

$$P_{1N} = (2t + \alpha_{00})(2t + \alpha_{22})D_{N-3} - (2t + \alpha_{00})D_{N-4}. \quad (8)$$

因而可求得

$$(Q^{-1})_{00} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{P_{0N}}{|Q|_N} = \frac{P_0}{u}, \quad (9)$$

$$(Q^{-1})_{11} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{P_{1N}}{|Q|_N} = \frac{P_1}{u}. \quad (10)$$

这里

$$P_0 = (2t + \alpha_{11})(2t + \alpha_{22} - 1) - \beta_{12}\beta_{21}, \quad (11)$$

$$P_1 = (2t + \alpha_{00})(2t + \alpha_{22} - 1), \quad (12)$$

$$u = (2t + \alpha_{00})[(2t + \alpha_{11})(2t + \alpha_{22} - 1) - \beta_{12}\beta_{21}] + \beta_{10}\beta_{01}[1 - 2t + \alpha_{22}]. \quad (13)$$

这样由(2)式和(9), (10)两式即可求得对应于表面第一层和第二层的 Green 函数, 而

$$\langle s_m^z \rangle = \frac{1}{2} - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi^2} \int d\mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{\partial \pi} \cdot \frac{1}{e^{v/\theta} - 1} [g_{mm}(v + i\eta) - g_{mm}(v - i\eta)] dv. \quad (14)$$

利用文献[9]的方法, 不难将以上计算推广到任意自旋和面心立方情况.

2. 在最近邻作用下, 铁磁体界面的磁化强度的自洽计算.

为简单起见, 我们讨论具有相同晶格常数的两种简立方晶体所形成的界面. 我们用 $n = -1, -2, -3, \dots$ 代表 A 晶体各层, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ 代表 B 晶体各层, 那么与计算表面时相同, 可得

$$g = \frac{1}{\partial\pi(\nu - H_{\text{eff}})} \sigma = \frac{1}{\partial\pi Q} \sigma, \quad (15)$$

式中

$$H_{nm}^{\text{eff}} = [\varepsilon_{\parallel}(m)\sigma_m + \varepsilon_{\perp}(m, m+1)\sigma_{m+1} + \varepsilon_{\perp}(m, m-1)\sigma_{m-1}] \delta_{mn} \\ - [\varepsilon_{\perp}(n, m)\delta_{n, m+1} + \varepsilon_{\perp}(n, m)\delta_{n, m-1}]\sigma_m. \quad (16)$$

这里我们已定义了(注意: 对于界面情形某些符号所代表的量与表面时不同)

$$\sigma_m^i = \begin{cases} \langle s_m^{Az} \rangle & i = A; \\ \langle s_m^{Bz} \rangle & i = B. \end{cases} \quad (17)$$

$$\varepsilon_{\parallel}(n) = \begin{cases} 4[1 - \gamma_0(k_{\parallel})]\varepsilon_{\parallel}^A & n = -1; \\ 4[1 - \gamma_0(k_{\parallel})]\varepsilon_{\parallel}^B \cdot \varepsilon_x & n = 0; \\ 4[1 - \gamma_0(k_{\parallel})] & n < -1; \\ 4[1 - \gamma_0(k_{\parallel})]\varepsilon_x & n > 0. \end{cases} \quad \begin{matrix} (18a) \\ (18b) \\ (18c) \\ (18d) \end{matrix}$$

$$\varepsilon_{\parallel}^A = I_{\parallel}^A/I_A, \quad \varepsilon_{\parallel}^B = I_{\parallel}^B/I_B, \quad \varepsilon_x = I_B/I_A. \quad (19)$$

$$\varepsilon_{\perp}(n, m) = \begin{cases} \varepsilon_{\perp}^A & n \text{ 或 } m = -1, n, m < 0; \\ \varepsilon_{\perp}^B \cdot \varepsilon_x & n \text{ 或 } m = 0, n, m > 0; \\ I_{AB}/I_A & n = 0, m = -1 \text{ 或 } m = 0, n = -1 \\ 1 & n, m < 0 \\ \varepsilon_x & n, m > 0. \end{cases} \quad \begin{matrix} (20a) \\ (20b) \\ (20c) \\ (20d) \\ (20e) \end{matrix}$$

$$\varepsilon_{\perp}^A = I_{\perp}^A/I_A, \quad \varepsilon_{\perp}^B = I_{\perp}^B/I_B, \quad \gamma_0(k_{\parallel}) = \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (21)$$

在实际计算中, 采用虚晶近似

$$I_{AB} = \frac{1}{2} (I_A + I_B). \quad (22)$$

进一步简化, 认为

$$\sigma_m = \langle s_m^A \rangle \quad m \leq -2; \quad (23)$$

$$\sigma_m = \langle s_m^B \rangle \quad m \geq 1. \quad (24)$$

在上述这些条件下, 我们和计算表面时类同可求出对应于界面各层的 Green 函数, 这些表述比较冗长, 我们不再列出。但是不难验证, 当 $I_{AB} = 0$ 时, 就回到了表面情况。

三、结果与讨论

图 1 是我们在不同参数情况下, 仅考虑表面第一层与体内不同而得到的 $\langle s_0^z \rangle - T$ 的变化曲线。这些结果与文献 [9] 中的结果一致。图 2 和图 3 是我们在不同参数下获得的关于界面的 $\langle s_0^z \rangle_B - T$ 和 $\langle s_{-1}^z \rangle - T$ 的变化曲线。从图中可看出, 当两种具有不同临界温度的铁磁体相互接触而形成界面时, 界面层的临界温度可以与体内的不同, 但是有个限度。令 $T_c^{\text{max}} = \max(T_c^A, T_c^B)$, 那么从计算中可得到如下结论: 对于任何材料,

$$T_c^i < T_c^{\text{max}}.$$

这个关系的实质在于它指出了界面层的临界温度的上限。由我们的计算也可看出, 界面

处的铁磁性质与体内的有很大差别。因此,我们完全可以利用这些差异来选择不同的材料而获得不同的 T_c 。

作者对马本莖教授的指导表示感谢。

参 考 文 献

- [1] D. T. Pierce and F. Meier, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 5484.
- [2] J. L. Moran *et al.*, *J. Mag. Mag. Mat.*, **15**(1980), 1077.
- [3] D. L. Mills, *J. Phys. Chem. Solids.*, **28**(1976), 2254.
- [4] D. T. Pierce *et al.*, *J. Mag. Mag. Mat.*, **31—34** (1983), 869.
- [5] Y. Endoh *et al.*, *J. Mag. Mag. Mat.*, **31—34** (1983), 881.
- [6] J. Tersoff *et al.*, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 6186.
- [7] A. J. Freeman *et al.*, *J. Mag. Mag. Mat.*, **15**(1980), 1070.
- [8] D. T. Hung *et al.*, *Phys. Status. Solidi.*, **B93**(1979), 351.
- [9] S. Selier *et al.*, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 404.

THEORY OF INSULATING FERROMAGNETS OF SURFACE AND INTERFACE

FENG SHI-PING

(Department of Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

Using Green's function technique, we have discussed magnetization of surface and interface changes with temperature from $T=0$ to $T=T_c$. For the surface, result is in agreement with other authors. For interface, we not only find that critical temperature is different between interface and bulk, but also find a relation: $T_c^i < \max(T_c^A, T_c^B)$.