

磁性多层膜层间交换耦合的自由 电子模型研究*

杨国林 李伯臧 李列明 孙 刚 吴建华 蒲富格

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1995 年 1 月 27 日收到)

基于自由电子模型, 考虑到不同膜厚和不同磁化排列的费密能的不同, 自洽地给出费密能。利用这种方法, 计算了材料铁磁层和非磁层电子密度对层间耦合振荡周期的影响, 并比较了我们所得结果与他人按巨势法得到的结果的异同, 发现振荡周期随着电子密度的变化而改变, 并且当铁磁层和非磁层的电子密度不同时, 将出现不等周期的振荡。这一新的理论结果与最近的实验相符。此外, 还计算了极化强度和由于能带不匹配造成的接触势对耦合强度及振荡相位的影响: 前者是决定耦合强度的主要因素, 后者则会影响振荡相位, 甚至周期。

PACC: 7530E; 7390; 7360D

1 引言

由铁磁层(FM)和非磁层(NM)交替生长而成的磁性金属多层膜, 由于呈现一系列新的性质和具有潜在的巨大应用前景, 已引起实验和理论工作者的极大兴趣。磁性多层膜的每一层厚度约在几埃到几十埃, 结构分三明治和超晶格(约几十层)两种。由于分子束外延技术的应用, 层与层之间有着几乎完整的界面, 而界面在多层膜系统中起着关键的作用。

早在 1986 年, 人们就在稀土 Gd/Y 和 Dy/Y 多层膜中发现层间交换耦合现象^[1,2], 其耦合强度是 NM 厚度的振荡函数。Yafet 用 RKKY 模型对此给出了很好的解释^[3]。与此同时, 在以过渡元素为磁性层的三明治结构 Fe/Cr/Fe^[4,5], 以及 Fe/Cr^[6], Co/Cr 和 Co/Cu^[7]超晶格中发现了强的层间耦合现象。此外, Parkin 等在 Fe/Cr, Co/Cu 和 Co/Ru 多层膜中发现耦合随 NM 厚度变化的振荡周期出乎意料的长($10 - 20 \text{ \AA}$)。根据 RKKY 理论预言的振荡周期应为 $\lambda_F/2$ (λ_F 为费密波长), 即约一个原子层的厚度。随后, Parkin 等^[8]发现这种长周期振荡行为在含 3d FM 的多层膜中普遍存在, 并发现耦合强度从 5d 元素向 4d 和 3d 元素方向递增, 且在同一 nd 族中随 d 电子浓度的增加而指数地增加。

随着实验的深入, 近年来还发现: 在利用分子束外延方法生长的 Fe/Au 多层膜中, 除了长周期振荡外, 还存在短周期振荡^[9,10]; 在 Fe/Cr 多层膜中发现了 90° 耦合的迹象^[10,11]; 此外, 耦合随 FM 厚度变化也呈现周期振荡行为^[12,13]。为了研究层间耦合机制, 还必须注意不同的 NM 的耦合强度, 振荡相位和周期有显著的差别, 以及不同温度和粗

* 国家自然科学基金资助的课题。

糙表面对层间耦合的影响.

自从长周期振荡的层间耦合被发现以来,许多理论工作者就开始探讨其起源.从处理方法看,可分为三类:一是建立在 RKKY 模型基础上的微扰计算^[14-18];二是利用依赖自旋的晶格势作模型计算(Edwards 等的紧束缚模型^[19-21]和 Slonczewski 的自由电子模型^[22]);三是从头计算方法^[23-25].

由于从头计算方法中计算量及精度的限制,目前还不能计算原子层数较多的情况,而且也很难给出一个清晰的物理图象.为此,目前理论工作主要集中于模型计算.Bruno^[14]等在 RKKY 作用的基础上,在自由电子近似下考虑到 FM 面内的不连续性,得到了多周期振荡的结果.它与磁化率的 Kohn 反常有关.而考虑 NM 厚度的不连续性,则得到了长周期振荡的结果(Aliasing 效应).更为仔细的计算表明^[15]振荡周期与费密面的性质有关,这与实验符合得很好.基于 RKKY 模型, Herman 等^[16]注意到极化电子是 Bloch 电子,振荡周期 Λ 应由下式给出: $2\pi/\Lambda = |2k_F - n2\pi/d|$. 其中 k_F 为费密波矢, d 为晶格常数. 这与 Aliasing 效应类似, 称为 Bloch 调制效应. 在考虑非完整界面时, 可区分这两种效应. 另外, 基于 RKKY 模型, 有人认为 FM 与 NM 间的接触势是导致长周期振荡的原因^[17, 18]. 与此同时, Edwards 等分析了 Fe 和 Cr 的能带结构, 从 Hubbard 模型出发, 在 Hartree-Fock 近似下得到依赖自旋的势阱, 从而 d 电子在膜厚方向发生能级量子化. 随着中间层厚度的变化, 出现类似 de Hass-Van Alphen 的振荡现象. 最近在实验上也发现了这样的量子阱态^[26].

Slonczewski^[22]提出的自由电子模型, 认为 FM 之间是通过传导电子极化而间接耦合的.Erickson^[27]利用该文中提出的力矩方法详细讨论了这个模型, 得到非海森堡耦合项.Barnas^[28, 29]则利用此模型, 考虑自由电子在膜厚方向的能级量子化, 计算了耦合随 FM 和 NM 厚度的变化关系, 讨论了 90°耦合的可能性. 关于 90°耦合, Slonczewski^[30]曾提出由于 NM 厚度在膜面内的不均匀, 借磁偶极相互作用导致 $J_2 \cos(\theta/2)$ 耦合项. 此外, 在文献[31]中他还提出了“松弛自旋(loose spin)”模型.

最近, 文献[32]和[33]提出了一个统一的处理方法. 在文献[32]中, d'Albuquerque e Castro 等利用单电子格林函数给出层间耦合系数的解析表达式.RKKY 模型和 Edwards 的紧束缚模型可在上述模型基础上取不同的极限而得到.

关于层间耦合, 长周期振荡现象可说已经得到很好的理解.但是, 对于耦合强度及振荡初相位迄今仍未获得很好的解释, 界面粗糙度的定量描述及对层间耦合的影响也尚未搞清楚. 目前, FM 对耦合的影响成为一个普遍感兴趣的问题, 对这个问题的研究可能会导致对层间耦合的新理解.

作为磁性多层膜层间交换耦合机制之一的自由电子模型, 由于理论概念和物理图象比较简洁清晰, 有可能做透. 可惜至今尚无人对此模型做严格深入的研究, 本文企图补此遗阙. 我们用此模型较全面地讨论了 FM 厚度、NM 厚度、极化强度、接触势和电子密度等因素对层间耦合的影响. 代替 Barnas^[28, 29]文中固定费密能的巨势法, 我们引入晶格常数和每原子价电子数两个参量. 如文献[34]那样自洽地给出费密能. 这样做更严格, 而且可以考虑不同磁化排列和不同厚度的情况下费密面的变化. 费密面的变化对振荡相位的影响可以是很大的, 尤其当系统很薄的时候. 利用此方法我们还发现, 改变电子密度(晶格常

数不变,改变每个原子提供的电子数),导致振荡周期相应地发生变化,这与实验结果^[35]符合.据此我们得到一个新结论:当 FM 与 NM 的电子密度不一样时,由于 FM 或 NM 厚度的改变产生的费密面的变化较大,可使振荡不再是严格的等周期.这也由最近的实验所证实^[39].此外我们发现接触势对振荡相位有影响,当其值很大时,对周期也有影响,而耦合强度则强烈地依赖于极化势的大小.

2 模型

如图 1,考虑三明治结构 FM/NM/FM,按图 1 的坐标系,FM 的厚度为 $b - a$,NM 的厚度为 $2a$.

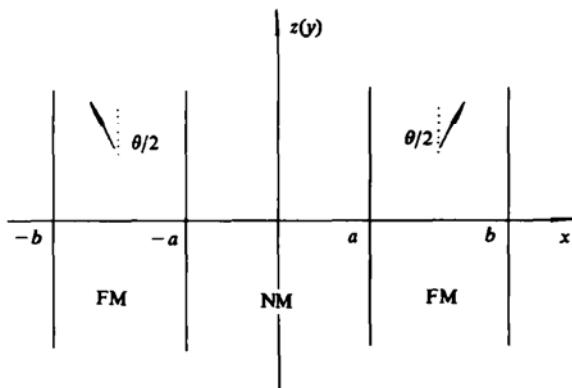


图 1 两个 FM 夹一个 NM 构成的三明治结构

系统的哈密顿量可写为

$$\begin{aligned} H_{\text{tot}} &= -\nabla^2 + V(x) + \Delta(x) \cdot \sigma = H + \left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right), \\ H &= -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + \Delta(x) \cdot \sigma, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\Delta(x) \cdot \sigma$ 为极化势(σ 为矢量泡利矩阵),它来源于 $s-d$ 交换作用和 $s-d$ 混合作用. 我们把 s 电子在磁性层受到的极化用一个有效场 Δ 来描述. 它与 FM 中的磁化方向相同. $V(x)$ 为由于晶格及能带不匹配造成的接触势(晶格势). 设两个 FM 磁化方向平行于膜面,磁化方向与 z 轴的夹角为 $\pm \theta/2$. 于是

$$V(x) + \Delta(x) \cdot \sigma = \begin{cases} \Delta(\cos(\theta/2)\sigma_z - \sin(\theta/2)\sigma_y) & -b < x < -a; \\ U & |x| < a; \\ \Delta(\cos(\theta/2)\sigma_z + \sin(\theta/2)\sigma_y) & a < x < b. \end{cases} \quad (2)$$

从定态 Schrödinger 方程

$$\begin{cases} H_{\text{tot}} \Psi = E \Psi, \\ \Psi(\pm b, y, z) = 0, \\ \Psi \text{ 和 } \nabla \Psi \text{ 在界面处连续,} \end{cases} \quad (3)$$

可解出系统的能级分布. 由于系统在 y 和 z 方向上具有平移不变对称性, 设电子波函数为

$$\Psi(x, y, z) = \begin{bmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{bmatrix} e^{i(k_y y + k_z z)}, \quad (4)$$

其中 k_y, k_z 为膜面内的波矢. 于是 Schrödinger 方程简化为

$$H \begin{bmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{bmatrix} = E_x \begin{bmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

并且有

$$E = E_x + k_y^2 + k_z^2. \quad (6)$$

定义变换

$$T = I\sigma_z, \quad (7)$$

其中 I 满足

$$\begin{cases} [I, \sigma_z] = 0, \\ I\Psi(x) = \Psi(-x), \\ IH(x)I^{-1} = H(-x), \end{cases} \quad (8)$$

则有

$$[T, H] = 0. \quad (9)$$

我们称 T 为宇称算符, 对应于其本征值为 ± 1 的本征态分别称为正 (+) 和负 (-) 宇称态.

选择 T 和 H 为力学量完备集, 分别记其共同本征态和本征值分别为 Ψ_j^\pm, Ψ_j^- 和 E_j^+, E_j^- :

$$\begin{aligned} T\Psi_j^\pm &= \pm \Psi_j^\pm; \\ H\Psi_j^\pm &= E_j^\pm \Psi_j^\pm. \end{aligned} \quad (10)$$

记

$$p = (E - \Delta)^{\frac{1}{2}}; q = (E + \Delta)^{\frac{1}{2}}; r = (E - U)^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

可以得

$$\Psi^+ = \begin{cases} \left[\begin{array}{l} b_1 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \\ i \left(-b_1 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \right) \end{array} \right] & -b < x < -a; \\ \left[\begin{array}{l} b_3 \cos(rx) \\ ib_4 \sin(rx) \end{array} \right] & |x| < a; \\ \left[\begin{array}{l} -b_1 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x-b)) - b_2 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x-b)) \\ i \left(-b_1 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x-b)) + b_2 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x-b)) \right) \end{array} \right] & a < x < b; \end{cases} \quad (12)$$

$$\Psi^- = \begin{cases} \left\{ b_1 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \right. \\ \left. i \left(-b_1 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \right) \right\} & -b < x < -a; \\ \left\{ \begin{array}{l} b_3 \sin(rx) \\ ib_4 \cos(rx) \end{array} \right\} & |x| < a; \\ \left\{ b_1 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x-b)) + b_2 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x-b)) \right. \\ \left. i \left(b_1 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x-b)) - b_2 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x-b)) \right) \right\} & a < x < b, \end{cases} \quad (13)$$

其中待定系数 b_1, b_2, b_3, b_4 由(3)式中的边界条件确定.从而得到关于 E_j^+ 和 E_j^- 的超越方程:

$$\begin{aligned} AD \sin^2\left(\frac{\theta}{4}\right) + BC \cos^2\left(\frac{\theta}{4}\right) &= 0 \quad \text{用以求 } E_j^+, \\ AD \cos^2\left(\frac{\theta}{4}\right) + BC \sin^2\left(\frac{\theta}{4}\right) &= 0 \quad \text{用以求 } E_j^-, \end{aligned} \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} A &= p \cos(\alpha) \sin(\gamma) + r \sin(\alpha) \cos(\gamma), \\ B &= p \cos(\alpha) \cos(\gamma) - r \sin(\alpha) \sin(\gamma), \\ C &= q \cos(\beta) \sin(\gamma) + r \sin(\beta) \cos(\gamma), \\ D &= q \cos(\beta) \cos(\gamma) - r \sin(\beta) \sin(\gamma). \end{aligned} \quad (15)$$

而

$$\alpha = p(b-a); \quad \beta = q(b-a); \quad \gamma = ra. \quad (16)$$

关于求解的详细过程见附录 A.

方程(14)可统一成

$$\pm \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{AD + BC}{AD - BC}, \quad (17)$$

其中 \pm 分别对应于 E_j^\pm .

本征能量依赖于参数 a, b, U, Δ 和 θ , 也就是 $E_j = E_j(a, b, U, \Delta, \theta)$, 因此这些参数的变化将改变系统的能谱, 从而影响层间耦合.

关于层间耦合有两种计算方法. Edwards 等最早用巨势的方法^[19], 即不考虑费密能 μ 的变化. 零温时, 系统巨势为

$$\Omega(\theta) = E_{\text{tot}}(\mu) - N_{\text{tot}}\mu = (E_+ + E_-) - (N_+ + N_-)\mu, \quad (18)$$

其中 N_\pm 和 E_\pm 分别由下式给定:

$$\begin{aligned} N_\pm &= \sum_{j_\pm, k_y, k_z} \Theta(\mu - E_{j\pm} - k_y^2 - k_z^2) \\ &= \sum_{j_\pm} \frac{S}{(2\pi)^2} \int \Theta(\mu - E_{j\pm} - k_y^2 - k_z^2) dk_y dk_z \end{aligned}$$

$$= \frac{S}{4\pi} \sum_{j_z} (\mu - E_{j_z}), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} E_{j_z} &= \sum_{j_z, k_y, k_z} (E_{j_z} + k_y^2 + k_z^2) \Theta(\mu - E_{j_z} - k_y^2 - k_z^2) \\ &= \frac{S}{4\pi} \sum_{j_z} \left(E_{j_z} (\mu - E_{j_z}) + \frac{1}{2} (\mu - E_{j_z})^2 \right) \\ &= \frac{S}{8\pi} \sum_{j_z} (\mu^2 - E_{j_z}^2), \end{aligned} \quad (20)$$

Θ 为阶跃函数, S 为膜面面积.

将巨势用 $\cos(\theta)$ 展开为

$$\Omega(\theta) = \Omega_0 + SJ_1 \cos(\theta) + SJ_2 \cos^2(\theta) + \cdots, \quad (21)$$

其中

$$J_1 = \frac{\Omega(0) - \Omega(\pi)}{2S}, \quad (22)$$

$$J_2 = \frac{(\Omega(\pi) + \Omega(0)) - 2\Omega(\pi/2)}{2S}, \quad (23)$$

分别称为双线性(bi-linear)和双二次(bi-quadratic)层间耦合系数.如果不计 J_2 , 则 $J_1 > 0$ 对应于反铁磁(AF)耦合, $J_1 < 0$ 对应于铁磁(F)耦合.

另一种方法^[34]是在给定粒子数 N_{tot} 下, 自洽地定出费密能 μ (见附录B), 再由(20)式给出总能量 E_{tot} , 并通过比较 $\theta = 0$ 和 π 时总能量大小得出层间耦合的状态. 将系统总能量展开为

$$E_{\text{tot}}(\theta) = E_0 + SJ_1 \cos(\theta) + SJ_2 \cos^2(\theta) + \cdots, \quad (24)$$

耦合系数 J_1 和 J_2 由以下两式给出:

$$J_1 = \frac{E_{\text{tot}}(0) - E_{\text{tot}}(\pi)}{2S}, \quad (25)$$

$$J_2 = \frac{E_{\text{tot}}(0) + E_{\text{tot}}(\pi) - 2E_{\text{tot}}(\pi/2)}{2S}. \quad (26)$$

(22)和(23)式与(25)和(26)式所定义的耦合系数有相同的物理意义, 但后者更准确.

3 数值结果与讨论

假定 FM 与 NM 为相互匹配的简单立方晶体, 取其共同的晶格常数为 $a = 2.5 \text{ \AA}$. 在实验上, 层间耦合强的多层膜, 两种材料晶格往往匹配得很好.

3.1 层间耦合的图象(利用巨势方法)

首先给出在确定的接触势 U 与极化强度 Δ 的情况下, 反铁磁与铁磁排列的电子态密度 $\rho_{\text{AF}}(E)$ 与 $\rho_{\text{F}}(E)$, 见图 2. 态密度的台阶反映了能级在 x 方向的量子化. 对 AF 排列, x 方向上每个分裂的能级是二重简并的, 对应于宇称算符 T 的两个不同的本征态.

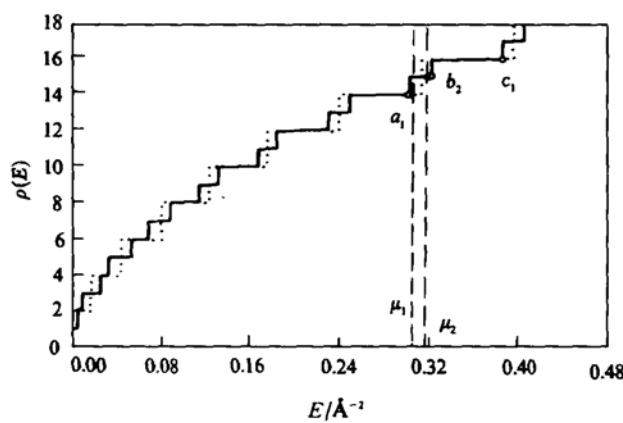


图2 在 $d_{fm} = 4$ 原子层, $d_{nm} = 10$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.02 \text{ Å}^{-2}$ 时 AF 与 F 排列的态密度 $\rho(E)$ —— 为 F, ····· 为 AF

在单电子近似下,给定层数时,AF与F排列的能谱是确定的.从图2看到,当费密面位于 μ_1 时, $\Delta E_{\text{tot}} = E(0) - E(\pi) > 0$, 即总的看来,AF排列相对于F排列能谱向低能区移动,这意味着AF耦合.但当费密面位于 μ_2 时,由于费密面附近AF排列的态密度比F排列的态密度大,从而可使 $\Delta E_{\text{tot}} < 0$, 耦合由AF变为F.所以在区间 (a_1, b_1) , 费密面的微小变化可导致不同的耦合.而当 μ 位于 (b_1, c_1) 时,由于AF与F排列在此区间的态密度相等, μ 的变化不会导致耦合状态的变化.

影响能谱的主要参数有 U 和 Δ , 同一费密面由于能谱的不同, 将导致不同的耦合.下面的结果表明:极化势 Δ 对耦合强度影响很大, 对振荡相位几乎无影响;而接触势 U 对耦合大小几乎无影响, 对振荡相位却有影响, 尤其是当 U 很大时.

3.2 巨势方法与自治方法的比较, Aliasing 效应

在零温时,用巨势方法有

$$\Delta\Omega = \int_{-\infty}^{\mu} (E - \mu) \Delta\rho(E) dE,$$

其中 $\Delta\rho(E) = \rho_F - \rho_{AF}$. 而用自治方法,则有

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\mu_F} E \rho_F(E) dE - \int_{-\infty}^{\mu_{AF}} E \rho_{AF}(E) dE.$$

考虑费密面的变化包括两方面的含义:(1)层数固定时,AF排列与F排列的 μ 不一样;(2)随着NM厚度或FM厚度的变化, μ 发生变化.可以预料:当FM或NM很厚时,费密面将趋于对应的大块材料的费密面.对三明治结构和层数很少的膜,费密面的变化是不可忽略的(见图3),其中巨势方法的费密面 μ 对应于自治方法中NM的厚度 $d_{NM} = 12$ 原子层,并且是F排列时的费密面.从图3中可以看到在最初的几层,由于费密面的变化导致耦合振荡的相位不同.对同一厚度,不同的计算方法给出的耦合状态相反,所以这时巨势方法是不准确的.而在层数很多时,由于费密面趋于稳定,两种方法给出相近的结果.

图4给出NM厚度连续变化时的情况.从图4中可以看到短周期振荡现象,周期约为

一个原子层. 在实验上由于仅能观察到一些不连续厚度(原子层厚的整数倍)对应的耦合状态, 因而表现为长周期振荡, 这就是 Aliasing 效应.

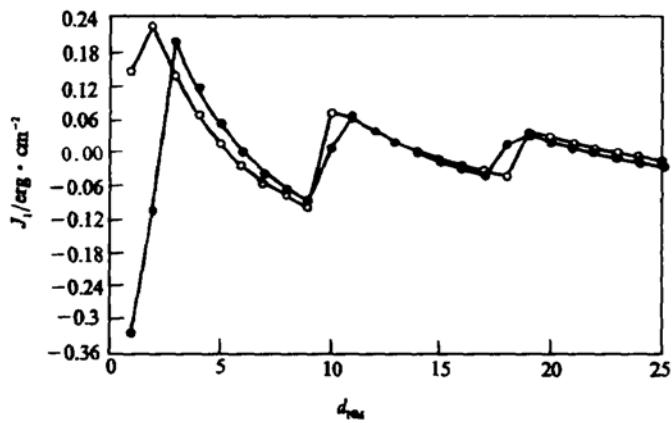


图3 用巨势方法和自洽方法计算的 J_1 随 NM 厚度变化关系 ○为巨势方法, ●为自洽方法, 有关的参数为 $d_{FM} = 4$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.02 \text{ \AA}^{-2}$, $n_{FM} = n_{NM} = 0.7$

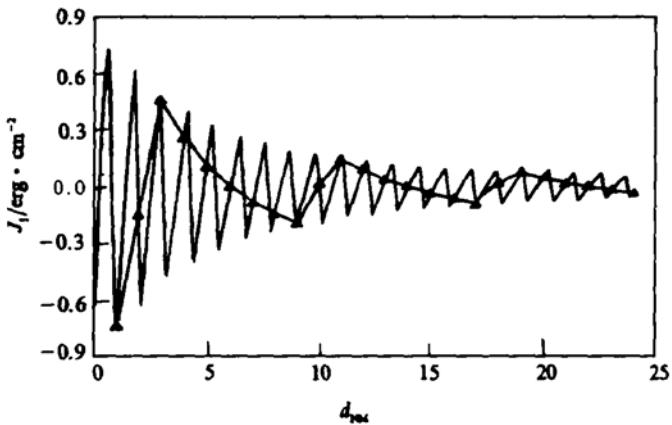


图4 NM 厚度连续变化和取分立值时 J_1 的振荡周期的关系 $d_{FM} = 4$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.03 \text{ \AA}^{-2}$, $n_{FM} = n_{NM} = 0.7$

3.3 J_1 对 Δ , U 的依赖关系

图5表明, J_1 的大小强烈地依赖于 Δ (也就是传导电子的极化强度). 实际上, $\Delta = 0$ 时, 将无层间耦合. 因而不同材料的耦合强度主要由极化来决定. 极化项 $\Delta \cdot \sigma$ 有两个来源: $s-d$ 交换作用和 $s-d$ 混合作用. 按照文献[36]的估计, 单考虑交换作用, $\Delta \approx 0.01 \text{ \AA}^{-2}$ (0.038 eV), 而按照文献[37]的考虑, $s-d$ 混合作用可能比 $s-d$ 交换作用更大, 因而 $\Delta = 0.02-0.03 \text{ \AA}^{-2}$ 是一个较为合适的参数. 这时 J_1 (第一个峰值)约为 $0.1-0.2 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 与实验上给出的以稀土元素为 NM 的多层膜系统耦合能相当^[8]. 值得指出的是对 FM 厚

度 $d_{FM} = 4$ 和 10 原子层两种情况, 相位约相差 π , 这意味着 FM 层的厚度对耦合也有影响.

我们还计算了接触势 U 对耦合的影响. 取 $U = -1.0 \sim 1.0 \text{ \AA}^{-2}$ (约为 $-3.81 \sim 3.81 \text{ eV}$), 发现 U 对耦合强度影响不大. 这与文献[32]的微扰方法结果类似. 接触势对相位有一定的影响, 尤其当 U 很大时(见图 6). 另外, 当 U 很大时, 随着 NM 厚度的变化, 费密面将有很大的变化, 因而对周期将产生影响(见图 7).

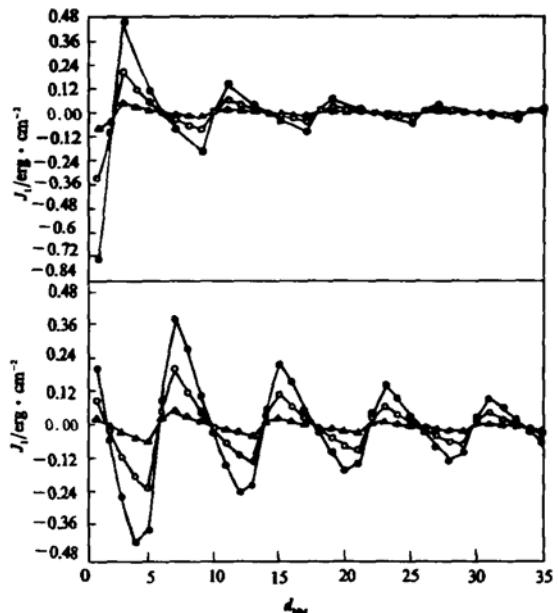


图 5 不同极化强度和 FM 厚度下, J_1 随 NM 厚度变化关系
上图 $d_{FM} = 4$ 原子层, 下图 $d_{FM} = 10$ 原子层, 其他参数同图 3, ▲ 为 $\Delta = 0.01 \text{ \AA}^{-2}$, ○ 为 $\Delta = 0.02 \text{ \AA}^{-2}$, ● 为 $\Delta = 0.03 \text{ \AA}^{-2}$

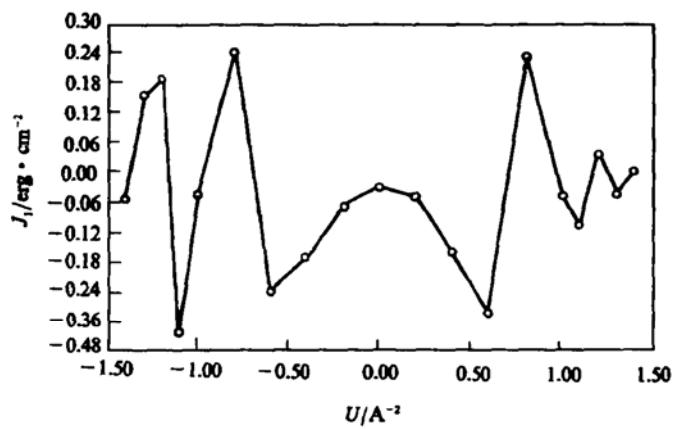


图 6 在 $d_{FM} = d_{NM} = 10$ 原子层, $\Delta = 0.003 \text{ \AA}^{-2}$, $n_{FM} = n_{NM} = 0.7$ 时 J_1 随 U 的变化

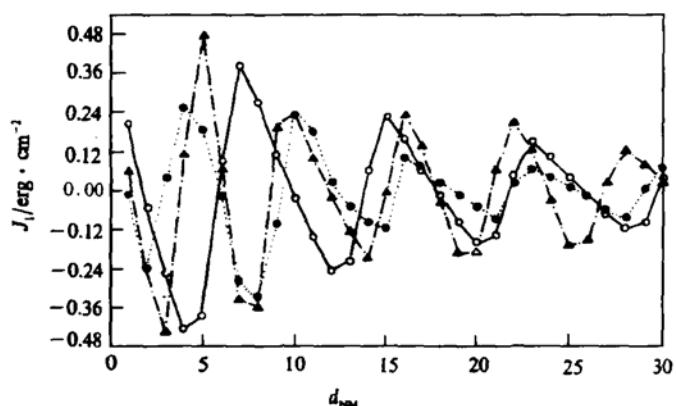


图 7 在不同接触势 U 下, J_1 随 NM 厚度变化关系 不同的 U 对应的周期不同, ○为 $U = 0 \text{ \AA}^{-2}$, ●为 $U = 0.9 \text{ \AA}^{-2}$, ▲为 $U = -0.9 \text{ \AA}^{-2}$, 有关参数同图 6

3.4 J_1 随 FM 厚度的变化关系

前面已经指出, FM 厚度 d_{FM} 的变化对耦合会产生很大的影响. 而过去实验和理论都认为 FM 对耦合没有太大的影响. 近来, 实验上发现了耦合随 d_{FM} 变化的振荡关系^[12, 13]. 在 Edwards 的文献[19]中将 FM 层取为无穷厚, 认为层间耦合纯粹是两相邻界面之间的相干效应. 这里为了计算随 FM 层厚度的变化关系, 考虑 FM 为有限时的情况, 即 FM 层有限厚引起的量子效应不可忽略, 结果见图 8.

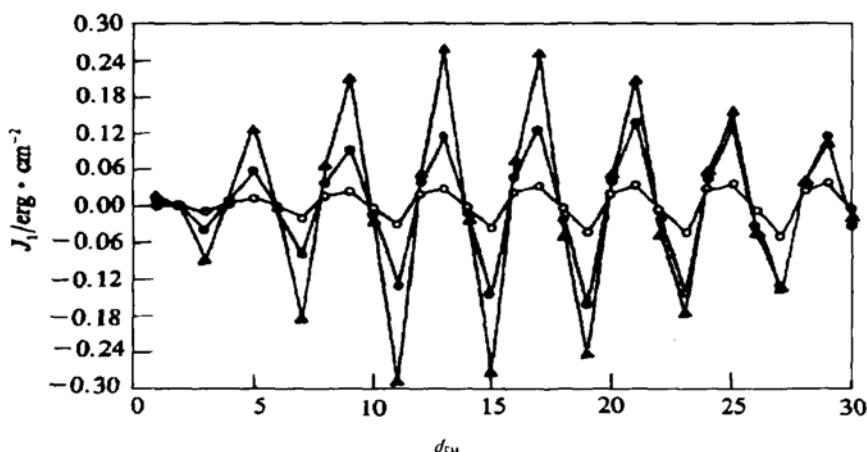


图 8 在不同极化强度下, J_1 随 FM 厚度变化关系 $d_{NM} = 10$ 原子层, $U = 0$, $n_{FM} = n_{NM} = 0.7$, ○为 $\Delta = 0.01 \text{ \AA}^{-2}$, ●为 $\Delta = 0.02 \text{ \AA}^{-2}$, ▲为 $\Delta = 0.03 \text{ \AA}^{-2}$

在同样参数下, 随 d_{FM} 变化的振荡约为随 d_{NM} 变化的一半. 这主要是由于有两个 FM, d_{FM} 变化 δd_{FM} , 从整体看厚度变化为 $2\delta d_{FM}$. 值得注意的是, 随着 FM 厚度的变化, 耦

合系数先增大后减小,这对 $\Delta = 0.01, 0.02$ 和 0.03 \AA^{-2} 均有同样的趋势。从物理上看,FM 层厚度的变化,一方面使极化的贡献增大,另一方面量子阱效应减弱。两种效应的竞争导致图 8 中的结果。

3.5 J_2 的计算

我们用自由电子模型计算了 J_2 ,见图 9。在大部分区域, J_2 比 J_1 要小一到两个数量级。但在某些区域, J_2 仍可达到 $0.2J_1$ 的大小。另外, J_2 也出现振荡行为,但周期为 J_1 的一半,这与文献[28]的结果一致。从图 9 中看出,在我们的计算范围内,都没有 90° 耦合的可能性,所以并不能解释 90° 耦合现象。根据对紧束缚模型的计算^[38],发现在某些参数下可出现 90° 耦合,因而 J_2 是一个依赖模型的量。

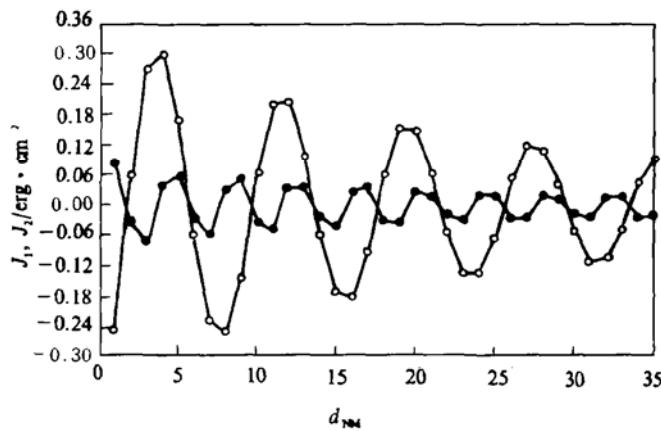


图 9 J_1, J_2 随 NM 厚度变化关系 $d_{\text{FM}} = 20$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.03 \text{ \AA}^{-2}$, $n_{\text{FM}} = n_{\text{NM}} = 0.7$, J_2 的振荡周期为 J_1 的两倍, ○为 J_1 , ●为 J_2

3.6 J_1 的振荡周期与 $n_{\text{FM}}, n_{\text{NM}}$ 的关系, 变周期振荡

从数值结果看, FM 和 NM 中的电子密度(每原子贡献的电子数) $n_{\text{FM}}, n_{\text{NM}}$ 对 J_1 的大小影响很小,但对 J_1 的振荡周期影响很大,见图 10。表 1 给出电子密度 $n = n_{\text{FM}} = n_{\text{NM}}$ 的大小从 0.1 到 2.0 范围内的周期 Λ 变化。对应的其他参数为 $d_{\text{FM}} = 4$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.03 \text{ \AA}^{-2}$ 。

表 1

n (个/原子层)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
Δ (原子层)	2	2—3	3	4	4—5	6	7	12	20	62
n (个/原子层)	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
Δ (原子层)	58	21	14	8	7	6	6	5	4—5	4

费密面的这种变化引起的周期的变化实际上正是 Aliasing 效应的反映。从 RKKY 模

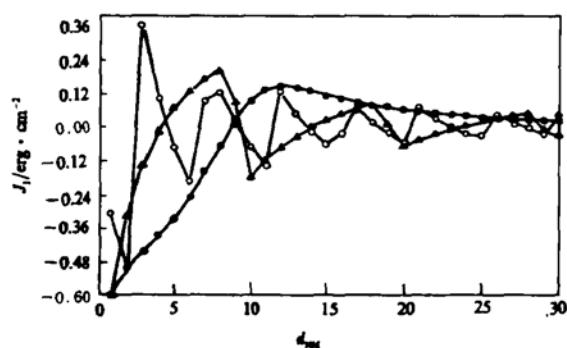


图 10 在不同电子密度下, J_1 随 NM 厚度变化关系 $d_{\text{FM}} = 4$ 原子层, $U = 0$, $\Delta = 0.03 \text{ Å}^{-2}$, ○为 $n_{\text{FM}} = n_{\text{NM}} = 0.5$, ●为 $n_{\text{FM}} = n_{\text{NM}} = 1.0$, ▲为 $n_{\text{FM}} = n_{\text{NM}} = 1.4$

型或紧束缚模型出发也将有类似的结果。在实验上, Okuno 和 Inomata^[35] 在 $\text{Co}/\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x$ (110) 多层膜中通过改变 Ni 的浓度, 从而改变费密面的位置, 发现了不同周期的振荡现象, 见表 2(参见文献[35]的表 I)。

表 2

Ni 浓度/at%	0	14	23	35
Å	12	15	17	23

总之, 具体材料的振荡周期与其费密面有很大的关系。

现再来讨论这样一个问题: 当两种材料的电子密度不相等, 即 $n_{\text{FM}} \neq n_{\text{NM}}$ 时, 改变某种材料的厚度, 这相当于改变系统的电子密度(或费密面), 这时周期应随厚度变化, 见图 11. 其中, $n_{\text{FM}} = 0.55$, $n_{\text{NM}} = 1.30$. 实验上通常以几个周期的平均值作为振荡周期. 但是根据我们的计算, 周期变化可能是由两种材料电子密度不相等造成的. 最近, Bloemen

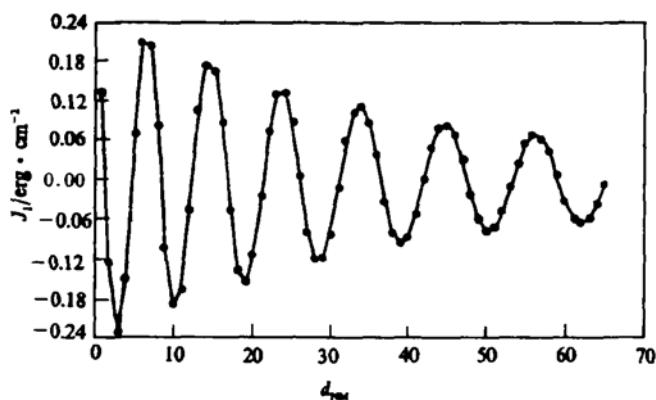


图 11 在 $d_{\text{FM}} = 22$ 原子层, $n_{\text{FM}} = 0.55$, $n_{\text{NM}} = 1.30$, $U = 0$, $\Delta = 0.03 \text{ Å}^{-2}$ 时 J_1 随 NM 厚度变化作变周期振荡

等^[39]在 Co/Ru 多层膜中发现当 Ru 很薄时,振荡峰值之间的距离较 Ru 厚时要小.这与我们的预言相符.

4 结语

我们基于自由电子模型,自洽地给出费密面,计算了 J_1 和 J_2 随 NM 厚度的变化关系,并计算了 J_1 随 FM 厚度的变化关系.通过 Aliasing 效应,给出了 J_1 的长周期振荡行为.计算表明振荡周期强烈地依赖于 FM 与 NM 材料的电子密度,在两种材料电子密度不相等的情况下, J_1 的振荡周期将随任一材料厚度的改变而变化.这一结论与最近的实验结果相符.还讨论了接触势 U 和极化势 Δ 对耦合的影响.

附录 A

$-b < x < -a$ 时方程为

$$\left[\begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2} \end{pmatrix} + \Delta \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (A1)$$

以算子

$$D = D^{\frac{1}{2}} \left(\hat{e}_x, \frac{\theta}{2} \right) = \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) - i \hat{e}_x \cdot \sigma \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) & -i \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) & -\cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \end{pmatrix}, \quad (A2)$$

对哈密顿量作变换:

$$H' = D^{-1} H D = \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} + \Delta & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2} - \Delta \end{pmatrix}, \quad (A3)$$

则由 $H'\Psi' = E_j\Psi'$ 和 $H\Psi = E_j\Psi$ 得到 $\Psi = D\Psi'$, 从而有

$$\begin{pmatrix} \Psi_+(x) \\ \Psi_-(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \\ i \left(-b_1 \sin\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(p(x+b)) + b_2 \cos\left(\frac{\theta}{4}\right) \sin(q(x+b)) \right) \end{pmatrix}. \quad (A4)$$

同样可讨论 $|x| < a$ 和 $a < x < b$ 的情况.注意,当 $a < x < b$ 时

$$D = D^{\frac{1}{2}} \left(\hat{e}_x, -\frac{\theta}{2} \right), \quad (A5)$$

令

$$\Psi^+ = \frac{1}{2}(1+T)\Psi; \Psi^- = \frac{1}{2}(1-T)\Psi, \quad (A6)$$

并重新定义待定系数,即可导出文中给出的波函数.再由

$$\begin{aligned} \Psi^+(a^+) &= \Psi^+(a^-), \quad \Psi^+(-a^+) = \Psi^+(-a^-), \\ \frac{\partial \Psi^+}{\partial x}(a^+) &= \frac{\partial \Psi^+}{\partial x}(a^-), \quad \frac{\partial \Psi^+}{\partial x}(-a^+) = \frac{\partial \Psi^+}{\partial x}(-a^-), \\ \Psi^-(a^+) &= \Psi^-(a^-), \quad \Psi^-(-a^+) = \Psi^-(-a^-), \\ \frac{\partial \Psi^-}{\partial x}(a^+) &= \frac{\partial \Psi^-}{\partial x}(a^-), \quad \frac{\partial \Psi^-}{\partial x}(-a^+) = \frac{\partial \Psi^-}{\partial x}(-a^-), \end{aligned} \quad (A7)$$

其中 $a^+ = a + 0^+$, $a^- = a - 0^+$, 则可得出关于 E_j^\pm 的超越方程(14).

附录 B

令

$$d_{\text{FM}} = Ma_{\text{FM}}; d_{\text{NM}} = Na_{\text{NM}}, \quad (\text{A8})$$

其中 d_{FM} 和 d_{NM} 分别为 FM 和 NM 的厚度, M 和 N 为对应的层数, a_{FM} 和 a_{NM} 为对应的晶格常数.

对简单立方晶格, 有

$$N_{\text{tot}} = 2M \frac{S}{a_{\text{FM}}^2} n_{\text{FM}} + N \frac{S}{a_{\text{NM}}^2} n_{\text{NM}}, \quad (\text{A9})$$

其中 n_{FM} 和 n_{NM} 分别为 FM 与 NM 每个原子提供的电子数. 另据(19)式, 有

$$N_{\text{tot}} = \frac{S}{4\pi} \left(\sum_j^+ (\mu - E_{j+}) + \sum_j^- (\mu - E_{j-}) \right). \quad (\text{A10})$$

假设 $a_{\text{FM}} = a_{\text{NM}}$, 并取 $S = a_{\text{FM}}^2$, 得

$$N_{\text{tot}} = \frac{1}{4\pi} \sum_j (a_{\text{FM}}^2 \mu^2 - a_{\text{FM}}^2 E_j^2) = 2Mn_{\text{FM}} + Nn_{\text{NM}}, \quad (\text{A11})$$

由此式可自然地给出费密能 μ .

在计算中我们还作了如下的变换: 将(16)式中的 $p(b-a)$ 改写为

$$p(b-a) = pd_{\text{FM}} = (E - \Delta)^{\frac{1}{2}} Ma_{\text{FM}} = (Ea_{\text{FM}}^2 - \Delta a_{\text{FM}}^2)^{\frac{1}{2}} M. \quad (\text{A12})$$

令 $Ea_{\text{FM}}^2 = E'$, $\Delta a_{\text{FM}}^2 = \Delta'$, $U' = Ua_{\text{FM}}^2$, $\mu' = \mu a_{\text{FM}}^2$, 则 N_{tot} 和 E_{tot} 可表示为

$$N_{\text{tot}} = \frac{1}{4\pi} \sum_j (\mu' - E'_j), \quad (\text{A13})$$

和

$$E_{\text{tot}} = \frac{S}{8\pi} \sum_j (\mu'^2 - E'^2_j) = \frac{1}{8\pi a_{\text{FM}}^2} \sum_j (\mu'^2 - E'^2_j). \quad (\text{A14})$$

- [1] R. W. Erwin, J. J. Rhyne, M. B. Salamon, J. Borchers, S. Sinha, J. E. Cunningham and C. P. Flynn, *Phys. Rev.*, **B35** (1987), 6808.
- [2] C. F. Maikrzak, D. Gibbs, P. Böni, A. I. Goldman, J. Kwo, M. Hong, T. C. Hsieh, R. M. Fleming, D. B. McWhan, Y. Yafet, J. W. Cable, J. Bohr, H. Grimm and C. L. Chien, *J. Appl. Phys.*, **63**(1988), 3447.
- [3] Y. Yafet, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 3948.
- [4] J. Grünberg, R. Scheiber, Y. Pang, M. B. Brodsky and H. Sower, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2442.
- [5] C. Carbone and S. F. Alvarado, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 2433.
- [6] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 2472.
- [7] S. S. Parkin, N. More and K. P. Roche, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 2304.
- [8] S. S. Parkin, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 3598.
- [9] A. Fuss, S. Demokritov, P. Grunberg and W. Zinn, *J. Magn. Magn. Mater.*, **103**(1992), L221.
- [10] U. Kobler, K. Wagner, R. Wöhres, A. Fuss and W. Zinn, *J. Magn. Magn. Mater.*, **103**(1992), 236.
- [11] M. Ruhrig, R. Schäfe, A. Hubert, R. Mosler, J. A. Wolf, S. Demokritov and P. Grünberg, *Phys. State Sol. (a)*, **125** (1991), 635.
- [12] S. N. Okuno and K. Inomata, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 1553.
- [13] P. J. H. Bloemen, M. T. Johnson, M. T. H. van de Vorst, R. Coehoorn, J. J. de Vries, R. Jungblut, J. aan de Stegge, A. Reinder and W. J. M. de Jonge, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 764.
- [14] P. Bruno and C. Chappert, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 1602.

- [15] P. Bruno and C. Chappert, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 261.
- [16] F. Herman and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 5806.
- [17] B. A. Jones and C. B. Hanna, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 4253.
- [18] M. C. Muxoz and J. Z. Perez Diaz, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2483.
- [19] D. M. Edwards, J. Mathon, R. B. Muniz and M. S. Phan, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 493.
- [20] D. M. Edwards, J. Mathon, R. B. Muniz and M. S. Phan, *J. Phys. : Condens. Matter*, **3**(1991), 4941.
- [21] J. Mathon, Muriella, Villever and D. M. Edwards, *J. Phys. : Condens. Matter*, **4**(1992), 9873.
- [22] J. C. Slonczewski, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 6995.
- [23] Van Schilfgaarde and Herman, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 1923.
- [24] P. Lang, L. Nordstrom, R. Zeller and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 1927.
- [25] K. Ounaddjela, C. B. Sommers, A. Fert, D. Stoeffler, F. Gautier and V. L. Moruzzi, *Europhys. Lett.*, **15**(1991), 875.
- [26] J. E. Ortega, F. J. Himpsel, G. J. Mankey and R. F. Willis, *J. Appl. Phys.*, **73**(1993), 5771.
- [27] R. P. Erickson, Kristles, B. Hathaway and R. Cullen, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 2626.
- [28] J. Barnaś, *J. Magn. Magn. Mater.*, **94**(1992), L215.
- [29] J. Barnaś, *J. Magn. Magn. Mater.*, **123**(1993), L21.
- [30] J. C. Slonczewski, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 3172.
- [31] J. C. Slonczewski, *J. Appl. Phys.*, **73**(1993), 5957.
- [32] J. d'Albuquerque e Castro, M. S. Ferreira and R. B. Muniz, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 16062.
- [33] P. Bruno, *J. Magn. Magn. Mater.*, **121**(1993), 248.
- [34] Lie-Ming Li, Bo-Zang Li and Fu-Cho Pu, *J. Phys. : Condens. Matter*, **6**(1994), 1941.
- [35] S. N. Okuno and K. Inomata, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 1711.
- [36] C. Herring, Magnetism IV, G. T. Rado George, H. Suhl eds. (Academic Press, New York, 1966), p. 162.
- [37] J. L. Fry, E. C. Ethridge, P. M. Levy and Y. Wang, *J. Appl. Phys.*, **69**(1991), 4780.
- [38] Lie-Ming Li and Fu-Cho Pu, *Phys. Rev. B*, **51**(1995), 3640.
- [39] P. J. H. Bloemen, H. W. van Kesteren, H. J. M. Swagten and W. J. M. de Jonge, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 13505.

FREE ELECTRON MODEL STUDY ON INTERLAYER EXCHANGE COUPLING IN MAGNETIC MULTILAYERS

YANG GUO-LIN LI BO-ZANG LI LIE-MING SUN GANG

WU JIAN-HUA PU FU-CHO

(*Institute of Physics, Academia sinica, Beijing 100080*)

(Received 27 January 1995)

ABSTRACT

Based on the free electron model, a self-consistent approach is adopted to calculate the Fermi energy and its variation with the layer thickness and the magnetization alignment in magnetic multilayers. Then we study the effect of the thickness of magnetic and non-magnetic layers, especially of electron density on the oscillation period of interlayer exchange coupling in such multilayer. A comparison of our theoretical results with those obtained by using the grand potential method is made, we find that the oscillation period is strongly dependent on the electron density. When the electron density in magnetic layer is different from that in spacer, the period will change as changing the thickness ratio of spacer to magnetic layer. This new result agree with the latest experimental data. In addition, our calculation also shows that the coupling strength is mainly determined by the polarization force experienced by electrons, while the band mismatch does influence the phase and even the period of the coupling oscillation.

PACC: 7530E; 7390; 7360D