

Искажения магнитной структуры, индуцированные магнитным полем вблизи поверхности антиферромагнетика

© А.А. Берзин, А.И. Морозов, А.С. Сигов

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет),
119454 Москва, Россия

E-mail: mor-alexandr@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 22 ноября 2004 г.)

Проведено теоретическое исследование искажений магнитной структуры, возникающих в магнитном поле вблизи поверхности антиферромагнетика. Рассмотрены как компенсированная, так и некомпенсированная поверхности. Рассчитана характерная глубина, на которую искажения проникают внутрь антиферромагнетика, изучена ее зависимость от величины магнитного поля во всем диапазоне магнитных полей вплоть до поля схлопывания подрешеток. Найден поверхностный магнитный момент, порожденный указанными искажениями.

Работа поддержана грантом CRDF—Минобразования РФ VZ-010-0.

1. Введение

Вопрос о поверхностном опрокидывании подрешеток антиферромагнетика в магнитном поле (о поверхностном спин-флоп переходе) был рассмотрен Миллсом в работе [1] на основе проведенных ранее расчетов закона дисперсии поверхностных магнонов [2]. Как в работе [1], так и в более поздней работе [3] рассматривалась некомпенсированная поверхность антиферромагнетика в диапазоне магнитных полей, ограниченном полем объемного спин-флоп перехода.

Новый всплеск интереса к поверхностным спин-флоп переходам возник в результате появления антиферромагнитно связанных многослойных магнитных структур, обладающих эффектом гигантского магнетосопротивления. Если предполагать, что ферромагнитные слои, входящие в состав многослойной структуры, намагничены однородно, то поведение такой многослойной структуры во внешнем магнитном поле аналогично поведению плоскопараллельного слоя антиферромагнетика с некомпенсированными границами. Теоретическое исследование подобных структур проводилось численными методами в ряде работ (см., например, [4,5]).

Цель настоящей работы — теоретическое исследование искажений магнитной структуры, возникающих вблизи поверхности зеркального антиферромагнетика в магнитном поле, во всем диапазоне полей вплоть до поля схлопывания его подрешеток (поля спин-флип перехода). Будут рассмотрены как компенсированная, так и некомпенсированная поверхности.

Информация о поверхностных искажениях необходима для правильной интерпретации магнитооптических экспериментов и данных магнитосиловой и поляризованной спин-туннельной микроскопии.

Результаты рассмотрения позволят определить диапазон толщин антиферромагнитных слоев, в котором влияние поверхностей является существенным (магнитный размерный эффект). Это особенно важно, поскольку

быстро развивающаяся магнетоэлектроника активно использует слои нанометровой толщины.

Полученные для некомпенсированной поверхности антиферромагнетика результаты представляют собой асимптотику, к которой с ростом числа слоев должны стремиться результаты численных расчетов, проведенных для многослойных магнитных структур.

2. Описание модели и результаты расчета

Рассмотрим идеально гладкую поверхность антиферромагнетика при температурах $T \ll T_N$ (T_N — температура Нееля), когда модули намагниченностей подрешеток можно считать неизменными. Ограничимся рассмотрением локализованных спинов в приближении гейзенберговского обменного взаимодействия между ближайшими соседями. Число последних для спинов, лежащих в поверхностном слое, меньше, чем в объеме, что делает их более податливыми к воздействию внешнего магнитного поля. Именно поэтому поле поверхностного спин-флоп перехода оказывается ниже своего объемного значения [1–3]. Будем предполагать, что ось легкого намагничения лежит в плоскости поверхности.

2.1. Компенсированная поверхность. В случае компенсированной поверхности в каждом атомном слое, параллельном поверхности, в равном количестве присутствуют спины, принадлежащие обеим магнитным подрешеткам антиферромагнетика, в дальнейшем обозначаемым A и B . Пронумеруем атомные плоскости, параллельные поверхности, индексом j , начиная с поверхности. Положение спина в плоскости слоя будем задавать углом $\theta_{A(B),j}$, который соответствующий спину магнитный момент образует с выделенным направлением, параллельным легкой оси (рис. 1, a).

Энергия гейзенберговского обменного взаимодействия W_{ex} , энергия одноионной анизотропии W_{an} и зе-

емановская энергия W_B задаются следующими выражениями:

$$W_{\text{ex}} = \frac{N|J_{\text{af}}|S_{\text{af}}^2}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \left[b \cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j}) + \frac{a}{2} (1 - \delta_{1,j}) \right. \\ \times \cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j-1}) + \frac{a}{2} \cos(\theta_{A,j} - \theta_{B,j+1}) \\ \left. + \frac{a}{2} (1 - \delta_{1,j}) \cos(\theta_{B,j} - \theta_{A,j-1}) + \frac{a}{2} \cos(\theta_{B,j} - \theta_{A,j+1}) \right], \quad (1)$$

$$W_{\text{an}} = -\frac{KNS_{\text{af}}^2}{2} \sum_{j=1}^{\infty} (\cos 2\theta_{A,j} + \cos 2\theta_{B,j}), \quad (2)$$

$$W_B = -\mu_B S_{\text{af}} B_0 N \sum_{j=1}^{\infty} [\cos(\theta_{A,j} - \psi) + \cos(\theta_{B,j} - \psi)], \quad (3)$$

где N — число спинов в атомной плоскости; $J_{\text{af}} < 0$ — интеграл обмена между ближайшими спинами; S_{af} — среднее значение спина атома; b и a — числа ближайших к данному спину соседей, лежащих соответственно в той же и в соседней атомной плоскости (их значения для различных компенсированных срезов приведены в табл. 1); $\delta_{1,j}$ — символ Кронекера; K — константа анизотропии; μ_B — магнетон Бора; B_0 — индукция внешнего магнитного поля, направленного параллельно поверхности под углом ψ к легкой оси (рис. 1, а).

Минимизируя суммарную энергию $W = W_{\text{ex}} + W_{\text{an}} + W_B$ относительно переменных $\theta_{A(B),j}$, получаем бес-

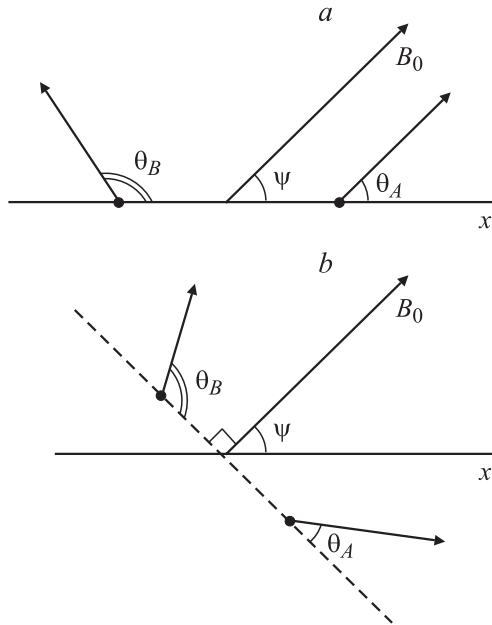


Рис. 1. Ориентация намагниченностей подрешеток антиферромагнетика относительно оси легкого намагничивания (ось x) и направления внешнего слабого (а) и сильного (б) магнитного поля.

Таблица 1. Параметры, характеризующие различные компенсированные срезы кубических кристаллов

Вид решетки	Срез	a	b	$-\kappa$	c
ПК	(100)	1	4	$5 - \sqrt{24} = 0.101021$	0.0187287
ПК	(110)	2	2	$2 - \sqrt{3} = 0.267949$	0.0610042
ОЦ (кубическая, тетрагональная и ромбическая)	(110)	2	4	$3 - \sqrt{8} = 0.171573$	0.0258883

конечную систему уравнений

$$b \sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j}) + a(1 - \delta_{1,j}) \sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j-1}) \\ + a \sin(\theta_{A,j} - \theta_{B,j+1}) = \alpha \sin 2\theta_{A,j} + \beta \sin(\theta_{A,j} - \psi), \\ b \sin(\theta_{B,j} - \theta_{A,j}) + a(1 - \delta_{1,j}) \sin(\theta_{B,j} - \theta_{A,j-1}) \\ + a \sin(\theta_{B,j} - \theta_{A,j+1}) = \alpha \sin 2\theta_{B,j} + \beta \sin(\theta_{B,j} - \psi), \quad (4)$$

в которой два безразмерных параметра α и β равны соответственно

$$\alpha = 2K/|J_{\text{af}}| \ll 1, \quad (5)$$

$$\beta = 2\mu_B B_0 / |J_{\text{af}}| S_{\text{af}}. \quad (6)$$

а) $\psi = \pi/2$. Рассмотрим решение системы (4) в частном случае, когда внешнее магнитное поле приложено перпендикулярно легкой оси. В данной геометрии спин-флоп переход отсутствует, и во всей области значений магнитного поля можно пренебречь вкладом анизотропии, т.е. считать $\alpha = 0$ (поэтому данный результат применим и к срезу (100) простой кубической решетки с анизотропией более высокого порядка).

Из симметрии задачи следует, что $\theta_{A,j} = \theta_j$, $\theta_{B,j} = \pi - \theta_j$. После этой подстановки система (4) принимает вид

$$b \sin 2\theta_j + a(1 - \delta_{1,j}) \sin(\theta_j + \theta_{j-1}) \\ + a \sin(\theta_j + \theta_{j+1}) = \beta \cos \theta_j. \quad (7)$$

Аналитическое выражение для значений θ_j можно получить в области слабых магнитных полей ($\beta \ll 1$), когда система уравнений (7) линеаризуется в виде

$$2b\theta_j + a[\theta_j + \theta_{j+1} + (1 - \delta_{1,j})(\theta_j + \theta_{j-1})] = \beta. \quad (8)$$

В результате замены переменных $\theta_j = \varphi_0 + \chi_j$, где $\varphi_0 = \beta/2z$ — значение угла скоса подрешеток вдали от поверхности, а $z = b + 2a$ — число ближайших соседей для спина в объеме антиферромагнетика [6], получим систему

$$2b\chi_j + a[\chi_j + \chi_{j+1} + (1 - \delta_{1,j})(\chi_j + \chi_{j-1})] = 2a\varphi_0\delta_{1,j}. \quad (9)$$

Ее решение ищется в виде

$$\chi_j = \kappa\chi_{j-1}. \quad (10)$$

Простой расчет дает значения κ и χ_1

$$\kappa = -\frac{b+a-\sqrt{b(b+2a)}}{a}, \quad (11)$$

$$\chi_1 = \frac{\beta a}{z[2b+a(1+\kappa)]} \equiv c\beta. \quad (12)$$

Значения κ и c для различных срезов приведены в табл. 1.

Таким образом, в слабом магнитном поле вблизи поверхности появляется убывающая в глубь антиферромагнетика знакопеременная добавка χ_j к объемному значению угла скоса подрешеток.

При $\beta \sim 1$, но $\beta < 2z$, объемное значение угла скоса находится из условия [6]

$$\sin \varphi_0 = \beta/2z. \quad (13)$$

Значение $\beta^* = 2z$ отвечает полю схлопывания подрешеток (полю спин-флип перехода, когда все спины ориентируются параллельно направлению магнитного поля). Величины χ_j при $\beta \sim \beta^*$ найдены путем численного решения системы (7) и приведены в табл. 2. Зависимость $\chi_1(\beta)$ изображена на рис. 2.

Качественно характер спада поверхностных искажений антиферромагнитного параметра порядка можно

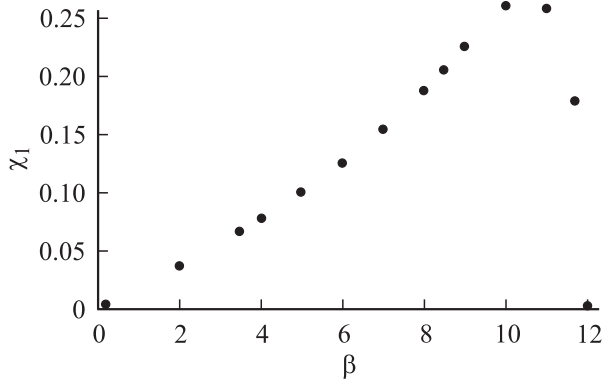


Рис. 2. Зависимость угла скоса магнитных подрешеток поверхностного слоя атомов от магнитного поля в случае компенсированной поверхности (100) ПК решетки и $\psi = \pi/2$.

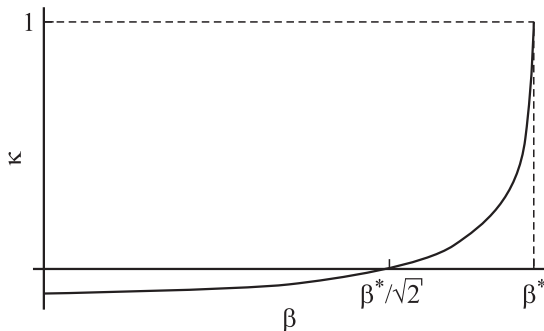


Рис. 3. Зависимость параметра κ , определяющего длину спада поверхностных искажений, от магнитного поля для компенсированной поверхности (100) ПК решетки.

Таблица 2. Зависимость угла скоса подрешеток χ_j от номера атомного слоя в различных магнитных полях для компенсированной поверхности (100) ПК решетки спинов

j	$\beta = 2$	$\beta = 5$	$\beta = 6\sqrt{2}$	$\beta = 10$	$\beta = 11$
1	0.037922	0.101619	0.206674	0.261939	0.25908
2	-0.003675	-0.007319	0.003687	0.033029	0.07571
3	0.000359	0.000561	0	0.003050	0.01790
4	-0.000035	-0.000042	0	0.000271	0.00347
5	0.000003	0.000004	0	0.000024	0.00087
6	0	0	0	0.000002	0.00019
7	0	0	0	0	0.00004
8	0	0	0	0	0.00001

предсказать по асимптотическому поведению углов χ_j . Действительно, в глубине кристалла $\chi_j \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 0$, и для больших j можно пользоваться линеаризованной вблизи значения $\theta_j = \varphi_0$ системой уравнений (7)

$$\left(2b + 2a + \beta \frac{\sin \varphi_0}{\cos 2\varphi_0}\right) \chi_j + a(\chi_{j-1} + \chi_{j+1}) = 0. \quad (14)$$

Соответствующее значение κ равно

$$\kappa = -\left(-1 + \frac{z}{a} + \frac{z\beta^2}{2a(2z^2 - \beta^2)}\right) \pm \sqrt{\left(-1 + \frac{z}{a} + \frac{z\beta^2}{2a(2z^2 - \beta^2)}\right)^2 - 1}. \quad (15)$$

Знак „плюс“ перед корнем соответствует значениям $\beta \leq \beta^*/\sqrt{2}$, а знак „минус“ — значениям $\beta^*/\sqrt{2} < \beta \leq \beta^*$. При $\beta = \beta^*/\sqrt{2}$ происходит смена знака параметра κ (рис. 3), и характер убывания величины χ_j изменяется от знакопеременного в области полей $\beta < \beta^*/\sqrt{2}$ на монотонный при $\beta > \beta^*/\sqrt{2}$.

При $\beta \rightarrow \beta^* - 0$ значения χ_j могут быть найдены аналитически, поскольку в данном пределе все χ_j непрерывным образом стремятся к нулю.

Введем безразмерный параметр $\Delta = 1 - \beta/\beta^*$. Тогда из формулы (13) следует, что

$$\varphi_0 = \frac{\pi}{2} - \sqrt{2\Delta}. \quad (16)$$

Используя выражение (15), находим

$$\kappa = 1 - \left(\frac{4z}{a} \Delta\right)^{1/2}. \quad (17)$$

Из линеаризованного уравнения для χ_1 получаем

$$\chi_1 = \sqrt{2\Delta} \left(1 - \sqrt{\frac{z\Delta}{a}}\right), \quad (18)$$

тогда

$$\theta_1 = \frac{\pi}{2} - \Delta \sqrt{\frac{2z}{a}}, \quad (19)$$

т.е. если при $\beta \rightarrow \beta^*$ в объеме антиферромагнетика значения углов скоса подрешеток отличаются от $\pi/2$ на

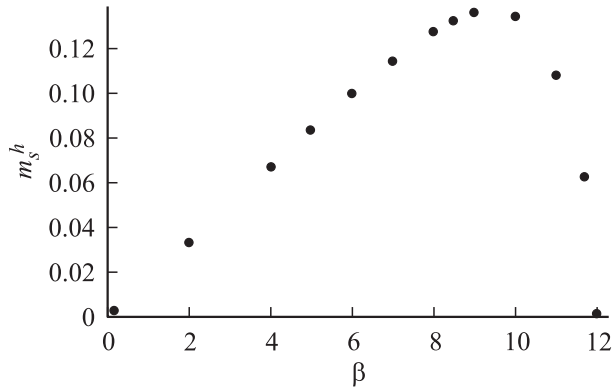


Рис. 4. Зависимость поверхностного магнитного момента от магнитного поля в случае компенсированной поверхности (100) ПК решетки и $\psi = \pi/2$.

величину порядка $\sqrt{\Delta}$, то на поверхности это отличие порядка Δ .

Характерная длина спада скажений r_c равна

$$r_c = -d/\ln|\kappa| \approx \frac{d}{2} \left(\frac{a}{z\Delta} \right)^{1/2}, \quad (20)$$

где d — межплоскостное расстояние. Как и следует из теории среднего поля для фазовых переходов второго рода, значение радиуса корреляции r_c расходится корнем образом по мере приближения к точке спин-флип перехода.

Поверхностные искажения приводят к возникновению дополнительного магнитного момента \mathbf{m}_s , параллельного поверхности. Будем измерять его в единицах $2\mu_B N S_{af}$, где N — число элементарных ячеек, соответствующих парамагнитной фазе, в поверхностном слое. В рассматриваемом случае параллельная легкой оси компонента магнитного момента m_s^e равна нулю, а перпендикулярная оси составляющая магнитного момента определяется как

$$m_s^h = \sum_{j=1}^{\infty} [\sin \theta_j - \sin \varphi_0]. \quad (21)$$

При $\beta \ll \beta^*$

$$m_s^h = \sum_{j=1}^{\infty} \chi_j = \frac{c\beta}{1-\kappa}, \quad (22)$$

а при $\beta \rightarrow \beta^* - 0$

$$m_s^h = \sqrt{2\Delta} \sum_{j=1}^{\infty} \chi_j = \sqrt{\frac{a\Delta}{z}}. \quad (23)$$

Отметим, что при $\psi = \pi/2$ поверхностный магнитный момент параллелен объемному, поэтому его выделение является непростой экспериментальной задачей. Зависимость $m_s^h(\beta)$ приведена на рис. 4.

б) $\psi = 0$. Рассмотрим случай, когда внешнее магнитное поле приложено параллельно легкой оси.

В случае компенсированной поверхности поверхностный спин-флоп переход не имеет места. Это связано с атомным масштабом величины r_c в полях $\beta \leq \beta_1$, где $\beta_1 = \sqrt{4\alpha z}$ есть поле объемного спин-флоп перехода [6]. При развороте подрешеток на столь малом расстоянии проигрыш в обменной энергии в расчете на каждый поверхностный спин составил бы величину порядка z , в то время как выигрыш в зеэмановской энергии $\sim \beta^2/z$ никак не компенсировал бы указанные энергетические затраты.

После объемного спин-флоп перехода, т. е. в диапазоне магнитных полей $\beta_1 < \beta \leq \beta^*$, ситуация полностью аналогична рассмотренному случаю $\psi = \pi/2$, если учесть, что теперь углы отсчитываются от направления, перпендикулярного направлению магнитного поля (рис. 1, б).

с) Произвольные значения ψ . В случае произвольного значения $\psi \neq 0, \pi/2$ разворот подрешеток антиферромагнетика в объеме происходит непрерывным образом в полях порядка β_1 [6]. При $\beta \gg \beta_1$ спины подрешеток ориентированы практически симметрично относительно направления магнитного поля (рис. 1, б). Как и для $\psi = 0$, для произвольного направления магнитного поля применимо рассмотрение, проведенное для случая $\psi = \pi/2$. Обусловленная анизотропией асимметричная поправка к объемному углу скоса подрешеток φ_0 в области полей $\beta_1 \ll \beta \ll \beta^*$ составляет, согласно работе [6], $\pm \beta_1^2 \sin 2\psi / 2\beta^2$ (знак выбирается так, чтобы уменьшить острый угол между намагниченностью подрешетки и легкой осью).

При произвольном угле ψ возможно аналитическое рассмотрение в области слабых магнитных полей (критерий будет уточнен далее).

Линеаризация системы уравнений (4) в предположении малости углов $\varphi_{A,j} = \theta_{A,j}$ и $\varphi_{B,j} = \pi - \theta_{B,j}$ дает

$$\begin{aligned} (b + a + a(1 - \delta_{1,j}) + 2\alpha + \beta \cos \psi) \varphi_{A,j} \\ + b\varphi_{B,j} + a\varphi_{B,j+1} + (1 - \delta_{1,j})a\varphi_{B,j-1} = \beta \sin \psi, \\ (b + a + a(1 - \delta_{1,j}) + 2\alpha + \beta \cos \psi) \varphi_{B,j} \\ + b\varphi_{A,j} + a\varphi_{A,j+1} + (1 - \delta_{1,j})a\varphi_{A,j-1} = \beta \sin \psi. \end{aligned} \quad (24)$$

Значения углов скоса подрешеток $\lim_{j \rightarrow \infty} \varphi_{A,j} \equiv \varphi_A^0$ и $\lim_{j \rightarrow \infty} \varphi_{B,j} \equiv \varphi_B^0$ вдали от поверхности легко находятся в предположении независимости этих углов от номера слоя

$$\varphi_A^0 = \frac{\beta \sin \psi (2\alpha - \beta \cos \psi)}{4z\alpha + 4\alpha^2 - \beta^2 \cos^2 \psi}, \quad (25)$$

$$\varphi_B^0 = \frac{\beta \sin \psi (2\alpha + \beta \cos \psi)}{4z\alpha + 4\alpha^2 - \beta^2 \cos^2 \psi}. \quad (26)$$

Условие малости этих углов приводит к следующим неравенствам для величины магнитного поля:

$$\beta \ll \beta^*, \quad \beta^2 \sin 2\psi \ll \beta_1^2; \quad \beta \cos \psi \ll \beta_1. \quad (27)$$

Рассмотрим поверхностные искажения спина. Пусть $\varphi_{A(B),j} = \varphi_{A(B)}^0 + \chi_{A(B),j}$, тогда аналогично случаю $\psi = \pi/2$ $\chi_{A(B),j} = \kappa \chi_{A(B),j-1}$, где значение κ с учетом малости параметра $\alpha \ll 1$ и неравенств (27) дается формулой (11), а величины

$$\chi_{B,1} = \chi_{A,1} = \frac{\beta \sin \psi}{z [2b + a(1 + \kappa)]} = c\beta \sin \psi. \quad (28)$$

Из сравнения с формулой (12) видно, что в слабых полях искажения вызываюся перпендикулярной к легкой оси составляющей поля, а продольная составляющая при $\beta \ll \beta_1$ незначительна.

2.2 Некомпенсированная поверхность. В этом случае все спины, лежащие в j -й атомной плоскости, коллинеарны и принадлежат одной подрешетке ($b = 0$). Четные и нечетные j отвечают разным подрешеткам, поэтому пронумеруем слои одним индексом j .

Энергия обменного взаимодействия принимает в случае некомпенсированной поверхности вид

$$W_{\text{ex}} = \frac{N|J_{\text{af}}|S_{\text{af}}^2 a}{2} \times \sum_{j=1}^{\infty} [\cos(\theta_j - \theta_{j-1})(1 - \delta_{1,j}) + \cos(\theta_j - \theta_{j+1})]. \quad (29)$$

Для среза (100) ОЦ тетрагональной (с осью c , лежащей в плоскости среза) или ромбической решетки $a = 4$.

Энергия одноионной анизотропии и зеемановская энергия выражаются соответственно как

$$W_{\text{an}} = -KNS_{\text{af}}^2 \sum_{j=1}^{\infty} \cos 2\theta_j, \quad (30)$$

$$W_B = -2\mu_B S_{\text{af}} B_0 N \sum_{j=1}^{\infty} \cos(\theta_j - \psi). \quad (31)$$

Минимизируя суммарную энергию $W = W_{\text{ex}} + W_{\text{an}} + W_B$ по параметрам θ_j , получаем систему уравнений

$$a \sin(\theta_j - \theta_{j-1})(1 - \delta_{1,j}) + a \sin(\theta_j - \theta_{j+1}) = \alpha \sin 2\theta_j + \beta \sin(\theta_j - \psi). \quad (32)$$

а) Слабые магнитные поля. Рассмотрим случай произвольно направленного слабого магнитного поля. Линеаризуя систему уравнений (32) по малым углам $\varphi_{2n-1} = \theta_{2n-1}$ и $\varphi_{2n} = \pi - \theta_{2n}$, находим

$$[a + 2\alpha + \beta \cos \psi] \varphi_{2n-1} + a(1 - \delta_{1,n}) \varphi_{2n-2} + a \varphi_{2n} = \beta \sin \psi, \\ [2a + 2\alpha - \beta \cos \psi] \varphi_{2n} + a \varphi_{2n-1} + a \varphi_{2n+1} = \beta \sin \psi. \quad (33)$$

Значения углов скоса подрешеток в объеме антиферромагнетика даются формулами (25) и (26). Представляя φ_i в виде $\varphi_{2n-1} = \varphi_A^0 + \chi_{2n-1}$, $\varphi_{2n} = \varphi_B^0 + \chi_{2n}$,

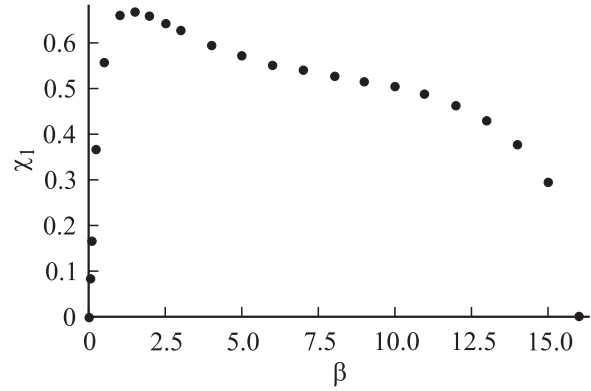


Рис. 5. Зависимость угла разворота магнитного момента поверхностного слоя атомов от магнитного поля в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.01$ и $\psi = \pi/2$.

получаем

$$[a(2 - \delta_{1,n}) + 2\alpha + \beta \cos \psi] \chi_{2n-1} + a(1 - \delta_{1,n}) \chi_{2n-2} + a \chi_{2n} = (\varphi_A^0 + \varphi_B^0) \delta_{1,n}, \\ [2a + 2\alpha - \beta \cos \psi] \chi_{2n} + a \chi_{2n-1} + a \chi_{2n+1} = 0. \quad (34)$$

Полагая $\chi_{2n} = \kappa^2 \chi_{2n-2}$, $\chi_{2n+1} = \kappa^2 \chi_{2n-1}$, находим

$$\kappa^2 = 1 - \frac{\sqrt{\beta_1^2 - \beta^2 \cos^2 \psi}}{a}. \quad (35)$$

С учетом неравенств (27)

$$\kappa^2 = 1 - \beta_1/a. \quad (36)$$

Характерная длина спада поверхностных неоднородностей r_c составляет

$$r_c = 2ad/\beta_1 \gg d \quad (37)$$

и по порядку величины равна толщине доменной стенки в антиферромагнетике. По этому параметру некомпенсированная поверхность существенно отличается от компенсированной, для которой $r_c \sim d$.

Значения χ_1 и χ_2 равны соответственно

$$\chi_1 = \beta \sin \psi / \beta_1, \quad \chi_2 = -(1 - \beta_1/2a) \beta \sin \psi / \beta_1. \quad (38)$$

Из (38) следует, что значение χ_1 возрастает до величины порядка единицы уже в слабом поле $\beta \sim \beta_1$, а не при $\beta \sim \beta^*$, как в случае компенсированной поверхности. Зависимость $\chi_1(\beta)$ для $\psi = \pi/2$ приведена на рис. 5.

б) Сильные магнитные поля. По мере увеличения поля в случае произвольных углов ψ в полях $\beta \sim \beta_1$ в объеме антиферромагнетика происходит разворот подрешеток, и при $\beta \gg \beta_1$ они ориентированы практически симметрично относительно внешнего магнитного поля (рис. 1, б). Асимптотическое поведение угла скоса подрешеток относительно направления, перпендикулярного

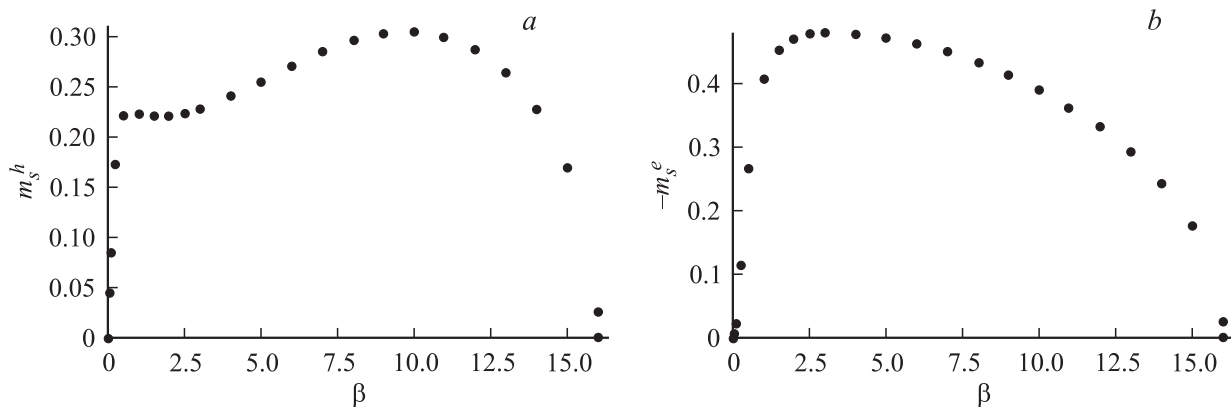


Рис. 6. Зависимость перпендикулярной (а) и параллельной (б) легкой оси компонент поверхностного магнитного момента от магнитного поля в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.01$ и $\psi = \pi/2$.

полю, описывается аналогично случаю компенсированной поверхности и $\psi = \pi/2$, т.е. формулами (13), (10) и (15). В формулу (15) необходимо подставить $b = 0$ и учесть, что $z = 2a$. В итоге

$$\kappa = -\left(1 + \frac{\beta^2}{2z^2 - \beta^2}\right) \pm \sqrt{\left(1 + \frac{\beta^2}{2z^2 - \beta^2}\right)^2 - 1}. \quad (39)$$

Легко видеть, что по мере нарастания магнитного поля к значению $\beta^*/\sqrt{2}$ глубина проникновения поверхностных искажений в толщу антиферромагнетика существенно уменьшается. При $\beta > \beta^*/\sqrt{2}$ она начинает расти, расходясь корневым образом по мере приближения к точке спин-флип перехода ($\beta \rightarrow \beta^* - 0$).

Значения χ_1 в этой области полей составляют величину порядка единицы (рис. 5), стремясь к нулю при $\beta \rightarrow \beta^*$ так же, как в случае компенсированной поверхности (формулы (18), (19)).

с) Область полей $\beta \sim \beta_1$. Для случая $\psi = \pi/2$, когда спин-флип переход отсутствует, можно найти компактное выражение для параметра κ , описывающего асимптотическое поведение поверхностных искажений во всем диапазоне полей $\beta \leq \beta^*$

$$\kappa = -\left(1 + \frac{\alpha}{a} + \frac{\beta^2}{2z^2 - \beta^2}\right) \pm \sqrt{\left(1 + \frac{\alpha}{a} + \frac{\beta^2}{2z^2 - \beta^2}\right)^2 - 1}, \quad (40)$$

которое в предельных случаях переходит в выражения (39) и (36).

В отличие от случая компенсированной поверхности магнитный момент \mathbf{m}_s образует угол с внешним магнитным полем и имеет составляющую $m_s^e = \sum_{j=1}^{\infty} \cos \theta_j$, ориентированную противоположно направлению вектора намагниченности верхнего атомного слоя в отсутствие поля. Поскольку магнитный момент объема антиферромагнетика направлен перпендикулярно оси легкого намагничивания, для продольной составляющей не возникает

проблемы выделения поверхностного вклада на фоне объемного. Зависимости составляющих поверхностного магнитного момента от внешнего поля приведены на рис. 6.

В случае $\psi = \pi$ внешнее магнитное поле приложено антипараллельно намагниченности верхней атомной плоскости. Именно этот случай рассматривался в работах [1,3].

В силу большей податливости поверхностного слоя имеет место поверхностный спин-флип переход в поле $\beta = \beta_s$. Авторы работ [1,3] получили значение $\beta_s = \beta_1/\sqrt{2}$. При проведении расчета они предполагали, что на поверхности подрешетки ориентированы симметрично относительно магнитного поля. Однако угол χ_1 находится из (32) без предварительных предположений.

Наши численные расчеты показали, что $\beta_s = \beta_1/\sqrt{2}$, а величина χ_1 сильно изменяется в окрестности порогового значения поля и с ростом поля быстро достигает значения, близкого к π (рис. 7). В этом же диапазоне полей ($\beta = 0.8-0.807$) вблизи поверхности антиферромагнетика формируется 180° доменная стенка. В ней намагниченности второго и третьего, четвертого и пя-

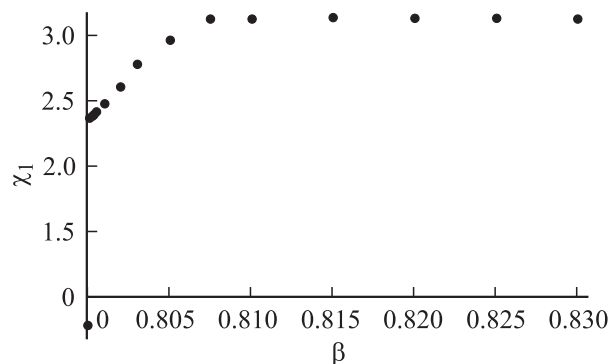


Рис. 7. Зависимость угла разворота магнитного момента поверхностного слоя атомов от магнитного поля, меньшего поля объемного спин-флип перехода, в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = \pi$.

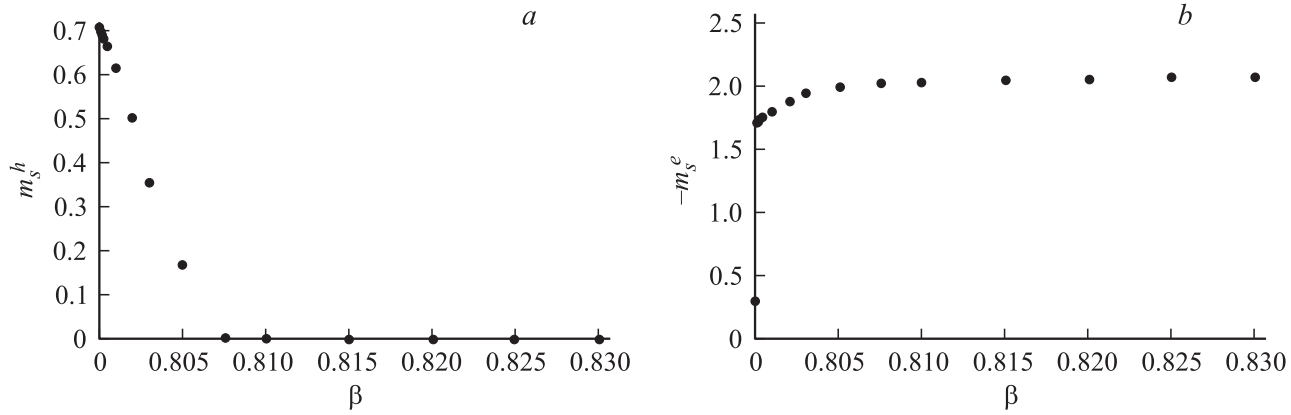


Рис. 8. Зависимость перпендикулярной (а) и параллельной (б) легкой оси компонент поверхностного магнитного момента от магнитного поля, меньшего поля объемного спин-флота перехода, в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = \pi$.

того и т.д. слоев попарно скомпенсированы. Поскольку намагниченность первого атомного слоя практически параллельна намагниченности последнего четного слоя, возникающий поверхностный магнитный момент m_s^e близок к -2 . Составляющая m_s^h поверхностного магнитного момента в указанном диапазоне полей убывает до нуля (рис. 8).

Именно возникновение поверхностного магнитного момента свидетельствует о том, что произошел поверхностный спин-флор переход. При этом вклад объема в магнитный момент равен нулю, поскольку в области полей $\beta_s \leq \beta \leq \beta_1$ в объеме антиферромагнетика $\theta_{A,j} = 0$, $\theta_{B,j} = \pi$.

Асимптотическое поведение поверхностных искажений в данном диапазоне полей описывается формулой (35), в которой $\psi = \pi$, а β не мало по сравнению с β_1 . Легко видеть, что параметр κ равен

$$\kappa = -\left(1 - \frac{\sqrt{\beta_1^2 - \beta^2}}{2a}\right), \quad (41)$$

и его значение стремится к -1 , когда $\beta \rightarrow \beta_1 - 0$. Таким образом, по мере приближения к точке объемного спин-флор перехода поверхностный спин-флор распространяется в глубь антиферромагнетика. Радиус корреляции равен

$$r_c = \frac{2da}{\sqrt{\beta_1^2 - \beta^2}} \propto (\beta_1 - \beta)^{-1/2} \quad (42)$$

и имеет корневую особенность при $\beta \rightarrow \beta_1$. Такое поведение r_c было впервые предсказано в работе [3].

При $\psi = 0$ магнитный момент поверхностного слоя атомов ориентирован по внешнему полю, и поверхностный спин-флор переход энергетически не выгоден.

Найдем параметр κ для случаев $\psi = 0, \pi$ в области полей $\beta > \beta_1$, когда спин-флор переход в объеме антиферромагнетика уже произошел. В полях $\beta > \beta_1$

состояния с $\psi = 0$ и $\psi = \pi$ эквивалентны и отличаются только направлением разворота спинов. Поскольку спины ориентированы практически вдоль трудной, а не вдоль легкой оси, как при $\psi = \pi/2$, изменяется знак перед α в формуле (40). При $\beta \rightarrow \beta + 0$ получаем

$$\kappa = -1 + \frac{\sqrt{\beta^2 - \beta_1^2}}{2a}. \quad (43)$$

Таким образом, при $\psi = 0, \pi$ имеет место расходимость глубины спада поверхностных искажений r_c при $\beta \rightarrow \beta_1$ со стороны как больших, так и меньших магнитных полей.

Значение χ_1 в точке перехода изменяется скачком.

Поскольку намагниченность верхнего атомного слоя стремится сориентироваться по внешнему полю, спин-флор переход в приповерхностном слое оказывается подавленным и происходит в более сильных полях $\beta \approx 2$ (рис. 9). Составляющая поверхностного магнит-

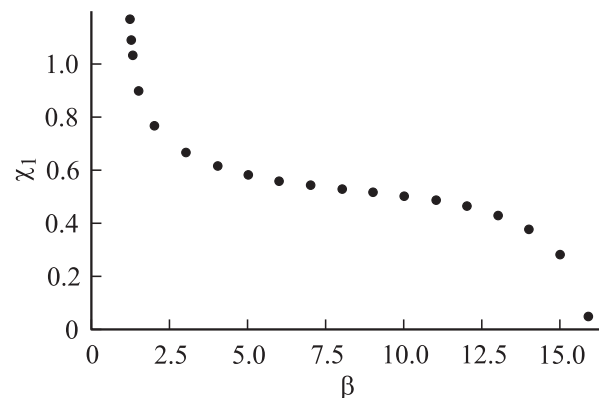


Рис. 9. Зависимость угла разворота магнитного момента поверхностного слоя атомов от магнитного поля, большего поля объемного спин-флота перехода, в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = 0$.

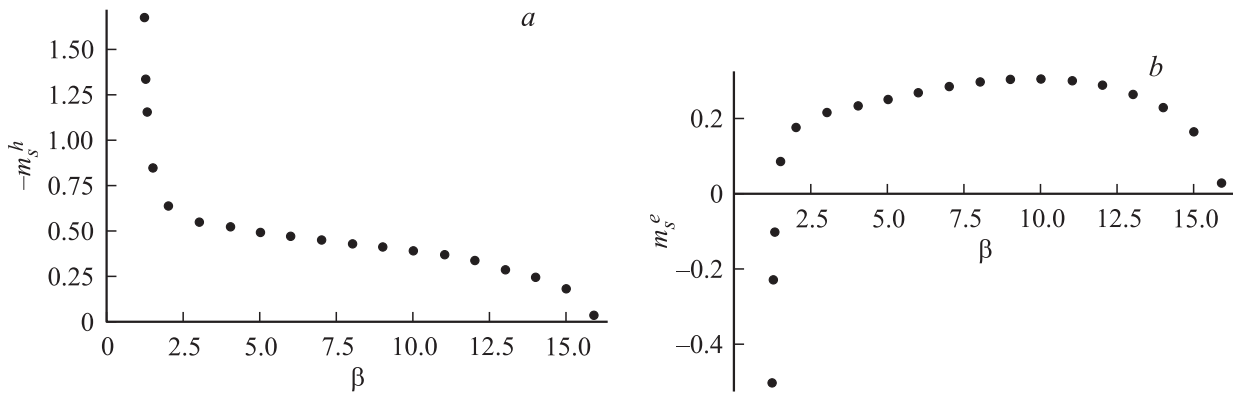


Рис. 10. Зависимость перпендикулярной (а) и параллельной (b) легкой оси компонент поверхностного магнитного момента от магнитного поля, большего поля объемного спин-флоп перехода, в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = 0$.

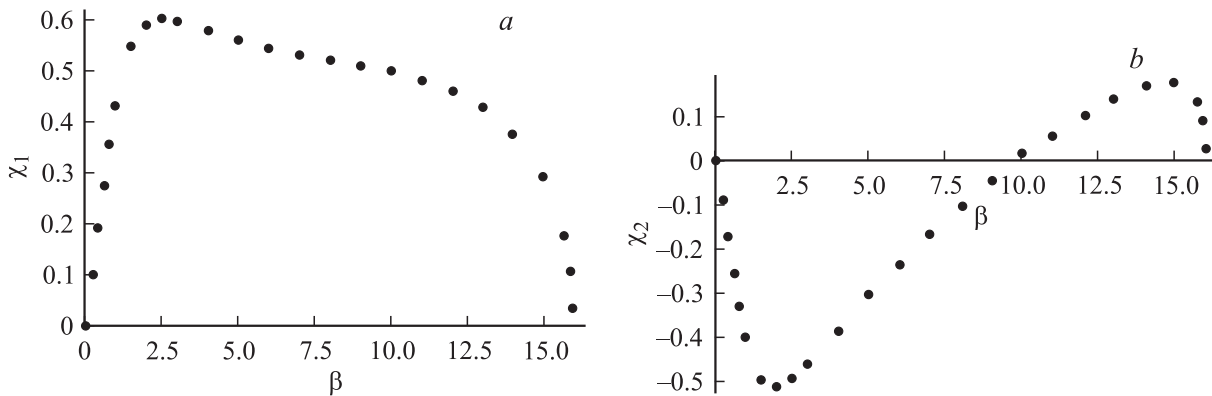


Рис. 11. Зависимость угла разворота магнитного момента первого (а) и второго (b) слоя атомов от магнитного поля в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = \pi/4$.

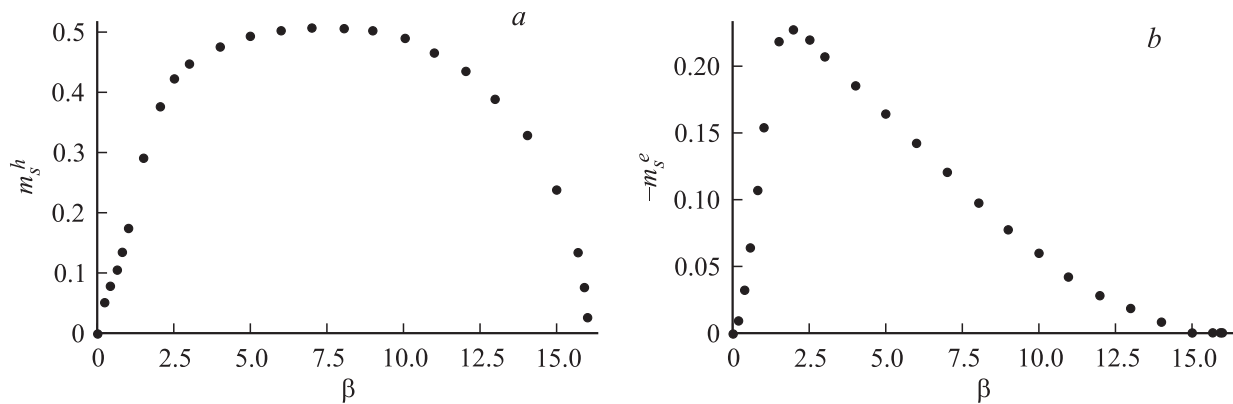


Рис. 12. Зависимость перпендикулярной (а) и параллельной (b) легкой оси компонент поверхностного магнитного момента от магнитного поля в случае некомпенсированной поверхности (100) ОЦ решетки, $\alpha = 0.04$ и $\psi = \pi/4$.

ного момента

$$m_s^e = \sum_{j=1}^{\infty} [\cos \theta_j - \beta/2z] \quad (44)$$

в полях $\beta < 2$ отрицательна, так как намагниченность поверхностного слоя спинов вследствие подавления спин-флоп перехода ниже, чем у аналогично-

го слоя в объеме образца (рис. 10, b). Составляющая $m_s^h = \sum_{j=1}^{\infty} \sin \theta_j$, перпендикулярная магнитному полю, противоположна проекции вектора намагниченности верхнего слоя спинов на трудную ось и ведет себя аналогично χ_1 (рис. 10, a).

В случае произвольного направления магнитного поля особенности в точке $\beta = \beta_1$ сглаживаются (рис. 11, 12).

3. Роль шероховатости

Наличие атомных ступеней на поверхности антиферромагнетика приводит к тому, что в случае некомпенсированной поверхности по разные стороны ступеней верхний слой атомов принадлежит к различным подрешеткам. Это не приводит к существенным эффектам в области сильных магнитных полей, однако в полях $\beta \lesssim \beta_1$, когда характерный радиус корреляции искажений r_c превосходит характерную ширину ступеней, может произойти усреднение и вследствие этого ослабление описанных поверхностных искажений.

В случае компенсированной поверхности влияние шероховатости является несущественным.

4. Выводы

В результате установлено следующее.

1) Вблизи поверхности антиферромагнетика в магнитном поле возникают дополнительные по сравнению с объемом искажения его подрешеток, спадающие в глубь антиферромагнетика. С этими искажениями связан поверхностный магнитный момент.

2) В случае компенсированной поверхности антиферромагнетика искажения захватывают несколько межатомных расстояний. С ростом величины магнитного поля длина спада искажений уменьшается, достигая минимума в поле $1/\sqrt{2}$ от поля спин-флип перехода. Одновременно нарастает величина искажений в поверхностном атомном слое. При дальнейшем увеличении поля длина спада искажений нарастает, расходясь в точке схлопывания подрешеток. При этом величина поверхностных искажений стремится к нулю.

3) В случае некомпенсированной поверхности антиферромагнетика в полях, меньших поля опрокидывания подрешеток, глубина спада поверхностных искажений составляет величину порядка толщины доменной стенки в антиферромагнетике, с чем могут быть связаны существенные размерные эффекты.

4) Если внешнее магнитное поле антипараллельно намагниченности верхнего атомного слоя, имеет место поверхностный спин-флоп переход, в результате которого вблизи поверхности антиферромагнетика формируется 180° (а не 90° , как считали раньше) доменная стенка. По мере приближения к точке объемного спин-флоп перехода толщина этой доменной стенки стремится к бесконечности.

5) Расходимость длины спада искажений возникает и при приближении к точке объемного спин-флоп перехода со стороны больших полей. Дальнейшая эволюция искажений с ростом величины поля аналогична случаю компенсированной поверхности.

6) Поверхностный магнитный момент может существенно повлиять на результаты магнитооптических измерений и данные магнитной микроскопии поверхности антиферромагнетика.

Список литературы

- [1] D.L. Mills. Phys. Rev. Lett. **20**, 1, 18 (1968).
- [2] D.L. Mills, W.M. Saslow. Phys. Rev. **171**, 2, 488 (1968).
- [3] F. Keffer, H. Chow. Phys. Rev. Lett. **31**, 17, 1061 (1973).
- [4] R.W. Wang, D.L. Mills, E.E. Fullerton, J.E. Mattson, S.D. Bader. Phys. Rev. Lett. **72**, 6, 920 (1994).
- [5] U.K. Rossler, A.N. Bogdanov. Phys. Rev. B **69**, 184 420 (2004).
- [6] L. Neel. Ann. Phys. **5**, 232 (1936).