

Обменное взаимодействие в магнитном димере и формирование неколлинеарного магнитного упорядочения в наноструктурах

Дудник М.Г., Уздин В.М.
 Санкт-Петербургский Государственный Университет

Современные исследования методами спин-поляризованной сканирующей туннельной микроскопии позволяют контролировать направления магнитных моментов отдельных атомов. При этом были обнаружены новые типы неколлинеарного магнитного порядка в 3d-кластерах и субмонослойных магнитных структурах на металлических поверхностях. Изучение магнитного упорядочения в таких наносистемах и возможности управлять обменным взаимодействием между отдельными магнитными моментами очень важно для разработки магнитной памяти с ультравысокой плотностью записи. Для понимания физической природы новых типов магнитного упорядочения важно экспериментальное и теоретическое изучение систем как можно меньшего размера, вплоть до атомного. Такие исследования дают информацию об обменном взаимодействии отдельных магнитных моментов в системах, где магнетизм обусловлен коллективизированными электронами. В работе [1] было экспериментально показано, что моменты атомов железа на ферромагнитно упорядоченных островках Co на поверхности Cu(111) направлены параллельно моментам атомов Co, а моменты атомов Cr — антипараллельно. Хотя это поведение может быть описано в рамках метода функционала плотности, вопрос о том, какие характеристики атомов отвечают за знак обменного взаимодействия остается в первопринципных расчетах открытым, что не позволяет предложить способы управления обменным взаимодействием на атомном масштабе. Расчеты в рамках неколлинеарного обобщения модели Александра-Андерсона для коллективизированных электронов дают возможность получить более ясную зависимость обменного взаимодействия от микроскопических параметров модели. Число d-электронов и магнитные моменты находятся самосогласованно, методом функций Грина. Кулоновское взаимодействие на узле учитывается в приближении среднего поля [2]. Оказывается, что обменное взаимодействие сильно зависит от числа d-электронов N, локализованных на атоме переходного металла. В случае димеров Fe(N=7) и Co(N=8), а также CoFe взаимодействие ферромагнитно у CoCr(8;5) — антиферромагнитно, что согласуется с [1]. Вместе с тем для димера Fe (N=7) очень малое уменьшение числа d-электронов, например, за счет взаимодействия с подложкой, может привести к неколлинеарному основному состоянию.

Гамильтониан H сочетает локализованную и коллективизированную модели:

$$\hat{H} = \sum_{k\alpha} \epsilon_k \hat{n}_{k\alpha}^{(s)} + \sum_{k\alpha} E_{k\alpha} \hat{n}_{k\alpha}^{(d)} + \sum_{i\alpha} V_{i\alpha} d_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + \sum_{i\alpha} V_{i\alpha} d_{i\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} + \sum_{i\alpha} U_i \hat{n}_{i\alpha}^{(d)} \hat{n}_{i\alpha}^{(s)} + h.c.$$

где $\hat{n}_{k\alpha}^{(s)} = c_{k\alpha}^{\dagger} c_{k\alpha}$, $\hat{n}_{k\alpha}^{(d)} = d_{k\alpha}^{\dagger} d_{k\alpha}$, $i=1,2$

$\hat{n}_{k\alpha}^{(s)}$ и $\hat{n}_{k\alpha}^{(d)}$ — операторы числа s-электронов с волновым вектором k и спином α ; оператор числа d-электронов на атоме i и со спином α .

- Первые два вклада — энергии s- и d-электронов без взаимодействия.
- Третий вклад — энергия переходов между s- и d-зонами; s-d гибридизация.
- Четвёртый вклад — переходы d-электронов между различными атомами.
- Пятый вклад — кулоновское отталкивание между d-электронами с различными спинами, локализованными на одном атоме.

Обобщение МАА на неколлинеарный магнетизм

Локальная система отсчёта

Приближение среднего поля даёт Гамильтониан взаимодействия

$$\hat{H}_{int} = \sum_{i\alpha} \epsilon_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha}^{(d)} + \sum_{i\alpha} E_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha}^{(s)} + \sum_{i\alpha} V_{i\alpha} d_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + \sum_{i\alpha} V_{i\alpha} d_{i\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} + \sum_{i\alpha} U_i \hat{n}_{i\alpha}^{(d)} \hat{n}_{i\alpha}^{(s)} + h.c.$$

Уравнения для магнитных моментов Фундаментальной функции Грина

Уравнения для магнитных моментов Фундаментальной функции Грина в матричной форме

$$\begin{pmatrix} \omega - E_{i\alpha} - U_i \langle \hat{n}_{i\alpha}^{(d)} \rangle & -V_{i\alpha} \\ -V_{i\alpha} & \omega - E_{i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{i\alpha}^{(d)} \\ G_{i\alpha}^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Все энергия и удобно записать в единицах $\frac{U_i}{2}$ — ширины d-уровня, возникающей за счет s-d гибридизации d-электронов (разностной подложки)

$$x_i = \frac{E_{i\alpha} - E_{i\alpha}^0}{U_i/2}; \quad y_i = \frac{V_{i\alpha}}{U_i/2}$$

Магнитный димер

$$H = \begin{pmatrix} E_{11} + U_1 \hat{n}_1 - M_1/2 & 0 & V_{12} & 0 \\ 0 & E_{21} - U_1 \hat{n}_1 + M_1/2 & 0 & V_{12} \\ V_{12} & 0 & E_{12} + U_2 \hat{n}_2 - M_2 \cos(\theta)/2 & U_2 M_2 \sin(\theta)/2 \\ 0 & V_{12} & U_2 M_2 \sin(\theta)/2 & E_{12} + U_2 \hat{n}_2 + M_2 \cos(\theta)/2 \end{pmatrix}$$

Диагональные элементы Функции Грина

$$G_{11}^{(d)} = \frac{1}{\omega - E_{11} - U_1 \langle \hat{n}_1 \rangle - \frac{V_{12}^2}{\omega - E_{21} - U_1 \langle \hat{n}_1 \rangle + M_1/2}}$$

$$G_{11}^{(s)} = \frac{1}{\omega - E_{11} - U_1 \langle \hat{n}_1 \rangle - \frac{V_{12}^2}{\omega - E_{21} - U_1 \langle \hat{n}_1 \rangle + M_1/2}}$$

Параметры модели:

- U1, U2 — без потери качества можно взять U1=U2=U — кулоновское отталкивание на узле
- V12=V — параметр перескока
- N1, N2 и D(0) — задавались. M1, M2 и E01, E02 — находились через самосогласование.

Расчётные формулы. Самосогласование

Величина магнитного момента Mi и число d-электронов Ni выражаются через мнимую часть функции Грина

$$M_i = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} [G_{i\alpha}^{(d)}(\omega) - G_{i\alpha}^{(s)}(\omega)] d\omega$$

$$N_i = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} [G_{i\alpha}^{(d)}(\omega) + G_{i\alpha}^{(s)}(\omega)] d\omega$$

Итерации — 1 решение

Самосогласование

$$N_i = \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{\alpha}(\omega)}{2} \arctan \frac{\omega - E_{i\alpha}}{U_i/2} d\omega$$

Где $\rho_{\alpha}(\omega)$ и $\omega_{i\alpha}$ — численные решения возникающие при разложении на сумму простейших дробей функции Грина, $\omega_{i\alpha}$ — корни знаменателя, ρ_{α} — множители. Зависит от Mi и Ni.

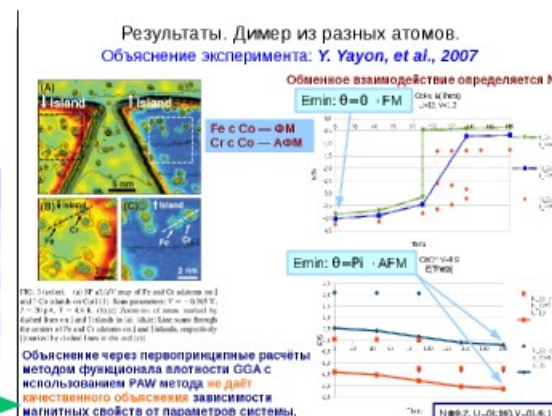
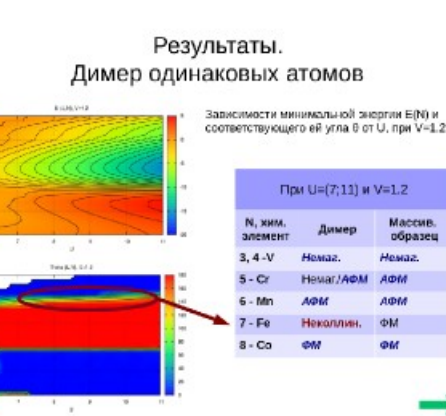
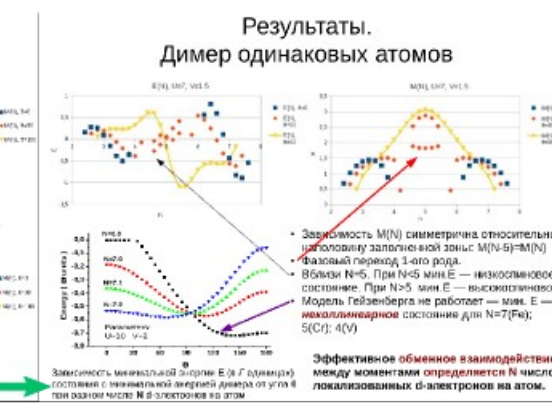
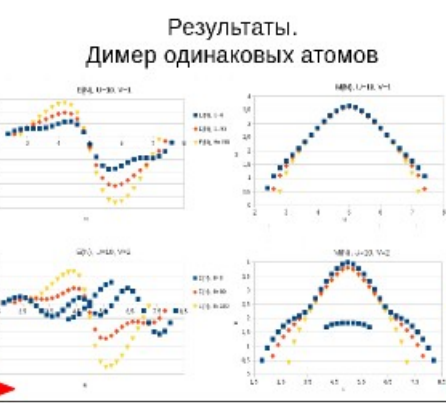
Одинаковые атомы: N1=N2=N, M1=M2=M

Получили систему уравнений

$$\begin{cases} M = F_1(N, M) \\ N = F_2(N, M) \end{cases}$$

Решается графически

Энергия E d-электронной подсистемы на один атом димера

$$E = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \text{Im} [G_{i\alpha}^{(d)}(\omega) + G_{i\alpha}^{(s)}(\omega)] d\omega - \frac{U_i}{2} (N_i^2 - M_i^2)$$


Результаты. Димер из разных атомов. Объяснение эксперимента: H. Weide et al., 2007 и M. Bernien et al., 2009

Объяснение: основное обменное взаимодействие Fe и Co через промежуточные атомы N.

Обменное взаимодействие определяется N. $E_{min} = \theta = 0 - FM$

Объяснение: основное обменное взаимодействие Fe и Co через промежуточные атомы N. $E_{min} = \theta = \pi - AFM$

Основные результаты

- Была разработана теоретическая модель, которая объясняет и предсказывает тип обменного взаимодействия в малых кластерах с коллективизированными электронами.
- В случае димеров на Fe(N=7) или Co(N=8), а также CoFe взаимодействие ФМ у CoCr(8;5) и FeMn(7;6) — АФМ, что согласуется с [1, 3, 4].
- Было показано, что обменное взаимодействие зависит главным образом от количества d-электронов N атомов кластера. Изменение числа d-электронов N обуславливает смену знака обменного взаимодействия.
- Наша модель относительно простая: 2 параметра U и V. Тем не менее такая коллективизированная модель даёт нетривиальные результаты.
- Было показано [2], что для димера (Fe, N=7) — в случае Гейзенберга не работает, так как кластер взаимодействует с коллективизированной подложкой.
- Устойчивость результатов от параметров (U и V) и N.
- Наш метод будет полезен для разработки устройств магнитной памяти на атомарном масштабе.

References

- Y. Yapon, V.W. Brar, I. Senapati, S. C. Erwin, and M. F. Crommie, "Observing spin polarization of individual magnetic atoms". *Phys. Rev. Lett.*, 99, 067202 (2007)
- P. F. Bessarub, M. G. Dudnik, and V. M. Uzdin, "Noncollinear magnetic ordering in a magnetic dimer supported on a metallic substrate". *Bull. RAS, Phys.*, 77, 56 (2013)
- H. Weide, M. Bernien, et al. Substrate-induced magnetic ordering & switching of iron porphyrin molecules // *Nature Mater.*, v. 6, pp. 516-520, (2007)
- M. Bernien, J. Miguel, et al. Tailoring the nature of magnetic coupling of Fe-porphyrin molecules to ferromagnetic substrates // *Phys. Rev. Lett.*, v. 102, 047202, (2009)