

# Теоретическое описание процессов образования монослойных ферромагнитных пленок на металлических поверхностях в рамках метода функционала спиновой плотности

Прудников В.В., Мамонова М.В., Климов С.П.

кафедра теоретической физики

Омский государственный университет  
им. Ф.М. Достоевского



## Ультратонкие пленки и мультислойные покрытия на основе магнитных переходных металлов Fe, Co и Ni

### : *Фундаментальный интерес*

природа магнетизма в ультратонких структурах;  
размерная зависимость для магнитных характеристик;  
особенности межфазных взаимодействий

Выявлено:

объемные значения характеристик для пленок с толщиной в несколько десятков монослоев ( $d \geq 10$  нм)

двумерные поверхностные значения в пленках с толщиной меньше 4-6 монослоев ( $d \leq 1-2$  нм)

мультислойное сочетание магнитных пленок наномасштабной толщины, разделенных слоем немагнитного металла, характеризуется эффектами гигантского магнитосопротивления .

---

# Введение

---

***Практический интерес:*** применения в микроэлектронике, спинтронике и вычислительной технике

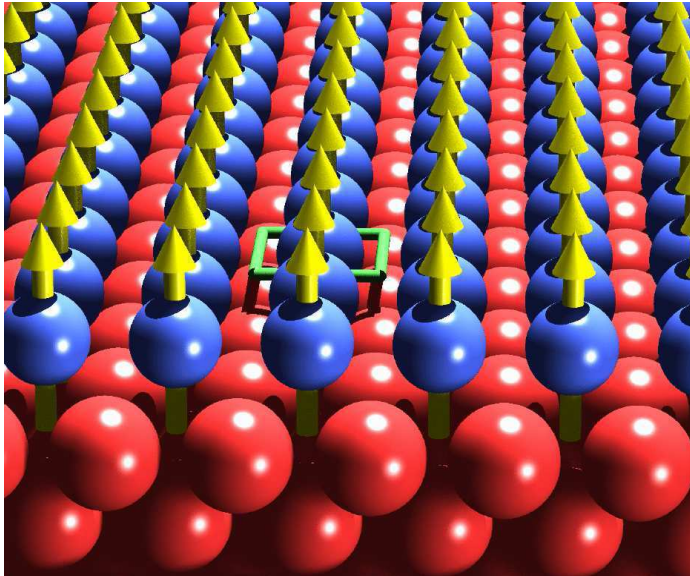
Ультратонкие магнитные пленки обладают рядом уникальных особенностей, способствующих повышению плотности записи информации и быстродействия запоминающих устройств.

Предельное уменьшение толщины магнитных пленок до монослойной может привести к дальнейшей миниатюризации активных элементов головок для записи и считывания информации с жестких дисков, к увеличению плотности записи на них.

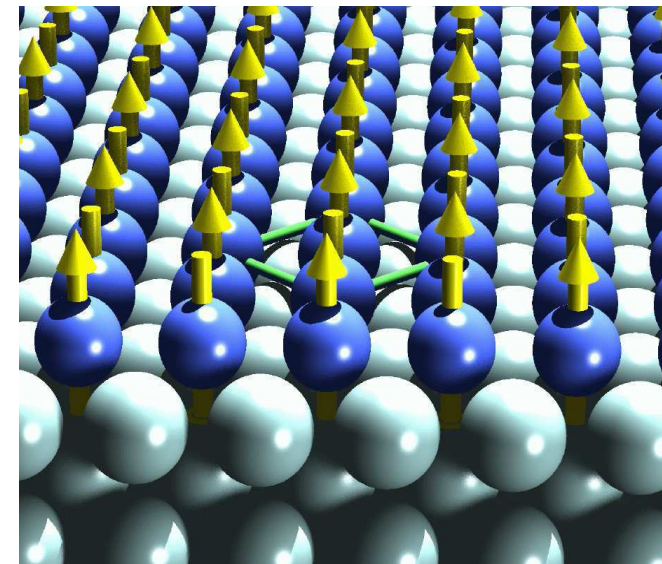
***Ряд требований, применяемых к запоминающим устройствам:*** надежность и длительность хранения информации, малое время доступа, низкая относительная стоимость на единицу информации, высокая плотность и скорость записи, - ***накладывают требования к структурным и магнитным характеристикам магнитных пленок. Получать такие пленки можно только зная механизмы формирования их свойств.***

---

# Введение



*Fe/Cu(001)* -  
ферромагнитное покрытие



*Fe/W(001)*  
антиферромагнитное покрытие

Bihlmayer G., Ferriani P., Baud S., Lezaic M., Heinze S., Blugel S. // Ultra-Thin Magnetic Films and Magnetic Nanostructures on Surfaces. NIC Symposium. 2006. – V. 32. – P.151 – 158.

## **Экспериментальные исследования ультратонких магнитных пленок Fe/Ag(111), Fe/Au(100), Ni/W(110), Co/Cu(100), Ni/Cu(100) выявили**

проявление эффектов магнитной анизотропии как перпендикулярной, так и параллельной поверхности пленки

В результате, магнитные свойства ультратонких пленок с толщиной, меньшей перпендикулярной составляющей корреляционной длины  $\xi_{\perp}$ , могут описываться двумерными моделями Изинга или XY.

размерные кроссоверные изменения в значениях критического индекса  $\beta$  намагниченности

$$M \sim (T_c - T)^{\beta}$$

# Введение

Для пленок с толщиной  $N > 20-30$  монослоев

$$\beta \approx 0.37(6),$$

соответствующее трехмерным образцам Fe, Co и Ni,

Для пленок с толщиной  $N < 4-6$  монослоев

$$\beta \approx 0.13(6)$$

для систем Ni/W(110), Fe/W(110), Fe/Ag(111), соответствующее  $\beta = 1/8$  для двумерной модели Изинга;

для систем Co/Cu(100), Ni/Cu(100), Fe/Au(111) соответствующих двумерной XY модели

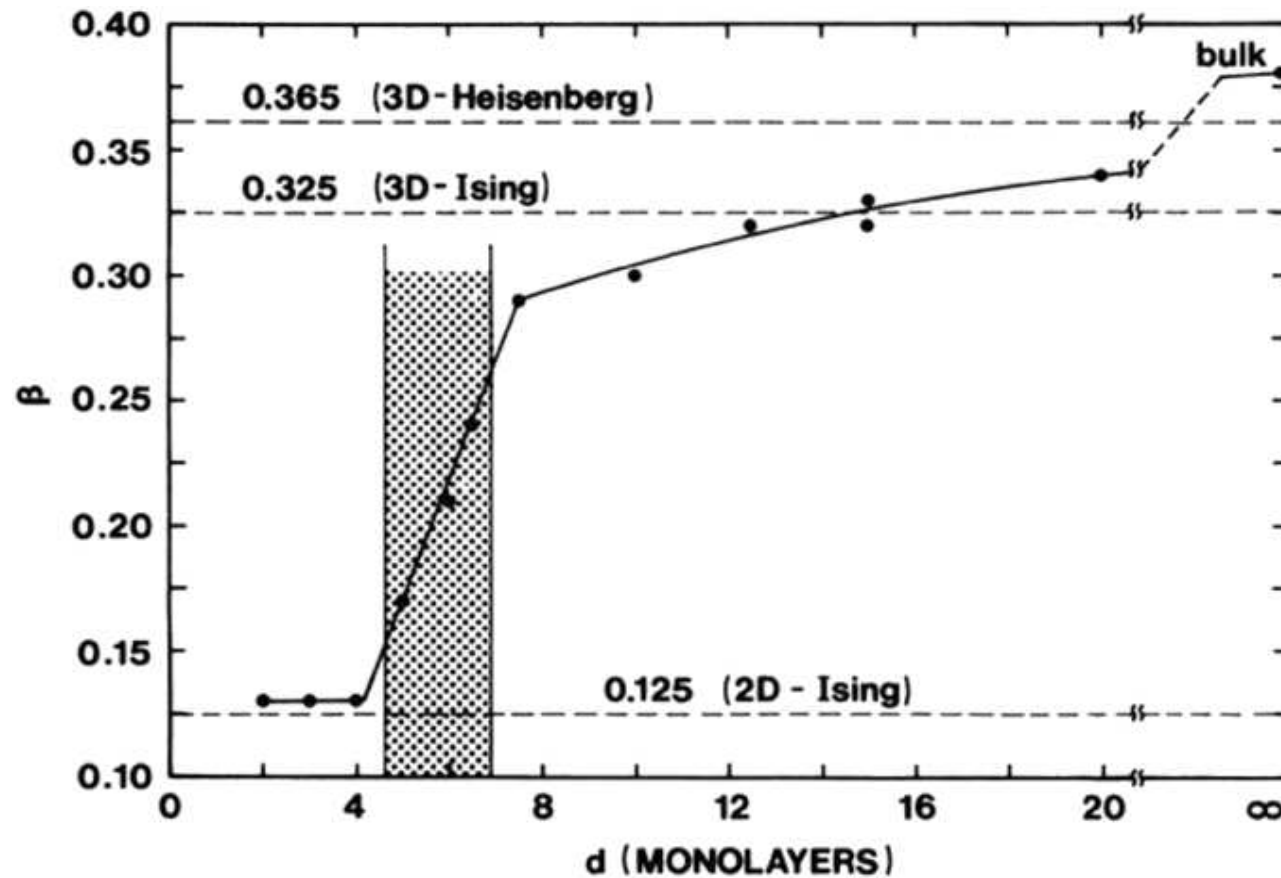
$$\beta \approx 0.24(7)$$

ренормгрупповой анализ с учетом конечномерных эффектов дал для эффективного показателя

$$\beta = 3\pi^2 / 128 \cong 0.23.$$

C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Lauhoff. Magnetism of ultrathin films // Reports on Progress in Physics **71**, 5, 056501 (2008), 78 pp.

# Введение



Зависимость значения критического индекса  $\beta$  от толщины ферромагнитной  $d$  пленки для системы Ni/W(110) // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P.11571

# Метод функционала плотности

*Модель адсорбционной системы с эффектами замещения*

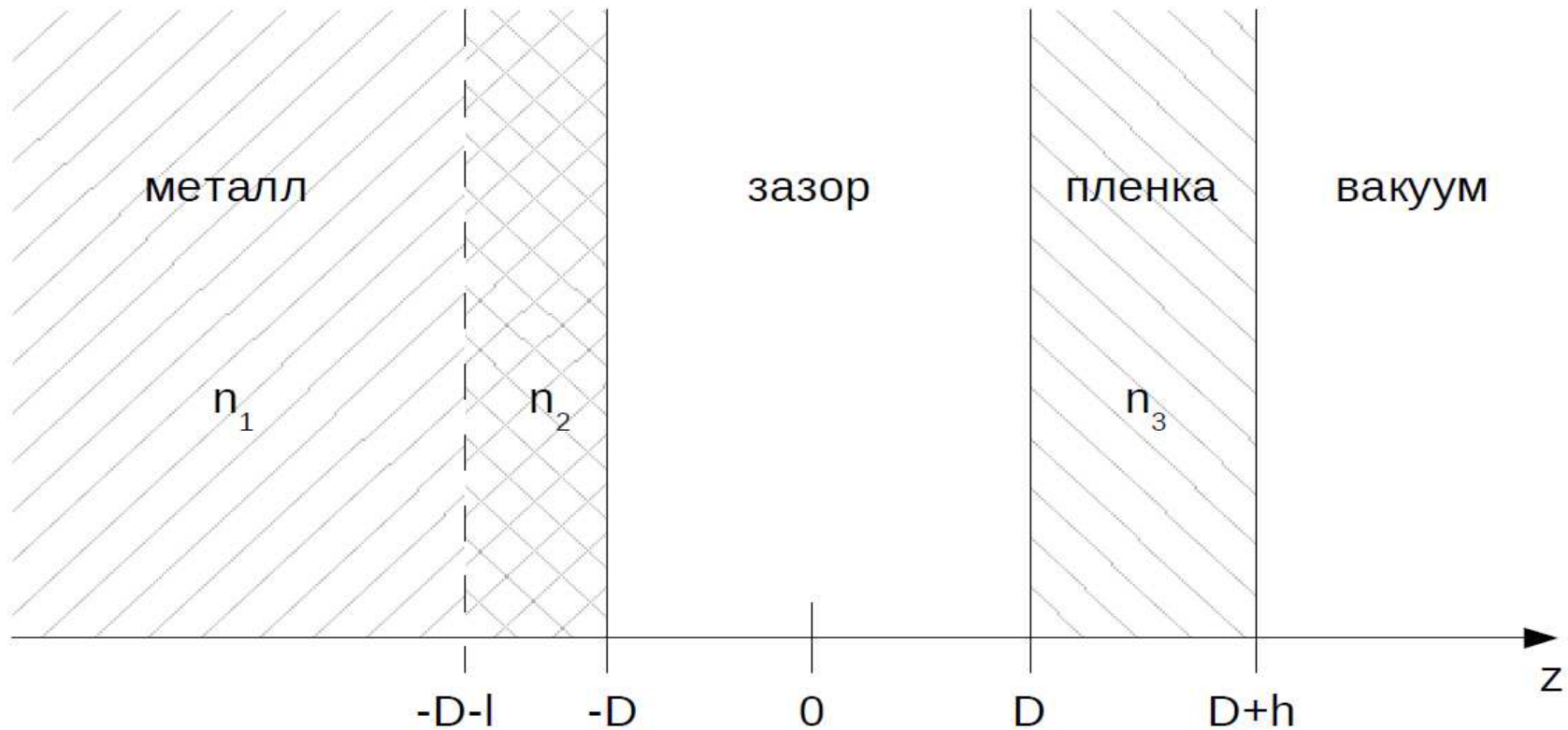


Рис.1. Геометрическое представление распределения приповерхностных слоев.



# Метод функционала плотности

Распределение положительного заряда фона:

$$n_+(z) = \begin{cases} n_1, & z < -D-l \\ n_2, & -D-l < z < -D \\ n_3, & D < z < D+h \\ 0, & |z| < D, \quad z > D+h \end{cases} \quad (1)$$

плотность электронного распределения  $n(z)$  в системе:

$$\begin{cases} n(z) = n_1(1 - 0.5e^{\beta(z+D+l)}) + 0.5n_2e^{\beta(z+D)}(e^{-\beta h} - 1) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & z < -D-l \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + n_2(1 - 0.5e^{\beta(z+D)} - 0.5e^{-\beta(z+D+l)}) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & -D-l < z < -D \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(1 - e^{-\beta h}), & -D < z < D \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + n_3(1 - 0.5e^{\beta(z-D)} - 0.5e^{-\beta(z-D-h)}), & D < z < D+h \\ n(z) = 0.5n_1e^{-\beta(z+D+l)} + 0.5n_2e^{-\beta(z+D)}(1 - e^{-\beta l}) + 0.5n_3e^{\beta(z-D)}(e^{\beta h} - 1), & z > D+h \end{cases} \quad (2)$$

# Метод функционала плотности

Межфазная энергия взаимодействия (на единицу площади контакта)

$$\sigma_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z, \beta)] - f[n_0(z)]\} dz \quad (3)$$

В рамках модели "желе" объемная плотность свободной энергии  $f(n(z))$  неоднородного электронного газа представляется в виде градиентного разложения

$$f[n(z)] = w_0[n(z)] + w_2[n(z), |\nabla n(z)|^2] + w_4[n(z), |\nabla n(z)|^4] - T(s_{id} + s_m), \quad (4)$$

Учет дискретности в распределении ионов дает поправки к энергии за счет электрон-ионного и ион-ионного взаимодействий.

Полная межфазная энергия имеет вид:

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_{ei} + \sigma_{ii}, \quad (5)$$

# Метод функционала плотности

В магнитоупорядоченном состоянии

$$n_{+/-}(z) = n(z) \frac{(1 \pm m)}{2} \quad (6)$$

$$\left( \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} \right) = 0, \quad \left( \frac{\partial \sigma}{\partial m} \right) = 0, \quad (7)$$

а) приближение молекулярного поля

$$m = B_S \left( \frac{3mS}{(S+1)} \frac{T_c^{(s)}}{T} \right) \quad T_c^{(s)} \approx \theta T_c^{(b)} \frac{Z_{surf}}{Z_{bulk}} \quad (8)$$

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \operatorname{cth} \left( \frac{2S+1}{2S} x \right) - \frac{1}{2S} \operatorname{cth} \left( \frac{x}{2S} \right)$$

$$S_{Fe} \approx 1.11, \quad S_{Co} \approx 0.86, \quad S_{Ni} \approx 0.30$$

# Метод функционала плотности

б) приближение 2D модели Изинга

$$m(T) = \left[ 1 - sh^{-4} \left( \frac{2T_c^{(s)}}{2,269 T} \right) \right]^{1/8} \quad (9)$$

в) приближение 2D XY модели

$$m(T) = \left[ \frac{T_c^{(s)} - T}{T_c^{(s)}} \right]^{0,23} \quad (10)$$

Энергия адсорбции

$$E_{ads} = \frac{\sigma(0) - \sigma(\infty)}{n_s^a}, \quad (11)$$

$n_s^a$  - поверхностная концентрация адсорбированных атомов

# Заместительная адсорбция

параметр покрытия  $\Theta = n_s^a / n_{s1}$  (12)

$n_{s1}$  - поверхностная концентрация атомов нереконструированной поверхности

Заместительная адсорбция - в пленке и приповерхностном слое подложки образуется смесь атомов адсорбата и субстрата  $A_p S_{1-p}$  и  $A_{p'} S_{1-p'}$

$$m(z) = \begin{cases} 0,5m_2 e^{\beta(z+D)} [e^{\beta l} - 1] + 0,5m_3 e^{\beta(z-D)} [1 - e^{-\beta h}], & z < -D-l \\ m_2 [1 - 0,5e^{\beta(z+D)} - 0,5e^{-\beta(z+D+l)}] + 0,5m_3 e^{\beta(z-D)} [1 - e^{-\beta h}], & -D-l < z < -D \\ 0,5m_2 e^{-\beta(z+D)} [1 - e^{-\beta l}] + 0,5m_3 e^{\beta(z-D)} [1 - e^{-\beta h}], & -D < z < D \\ 0,5m_2 e^{-\beta(z+D)} [1 - e^{-\beta l}] + m_3 [1 - 0,5e^{-\beta(z-D)} - 0,5e^{\beta(z-D-h)}], & D < z < D+h \\ 0,5m_2 e^{-\beta(z+D)} [1 - e^{-\beta l}] + 0,5m_3 e^{-\beta(z-D)} [e^{\beta h} - 1], & z > D+h \end{cases} \quad (13)$$

$$m_2 = m(T, \Theta) p',$$

$$m_3 = m(T, \Theta) p$$

# Заместительная адсорбция

Для заместительной адсорбции схема минимизации межфазной энергии записывается в виде требования:

$$\min_{p, p'} \left( \frac{\min_{\beta} \sigma(\beta, p, p', \Theta)}{n_{s3}(p, p', \Theta)} \right) = 0 \quad (14)$$

Нахождение минимума многопараметрической функции методами прямого поиска (метод Хука-Дживса).

# Результаты расчетов

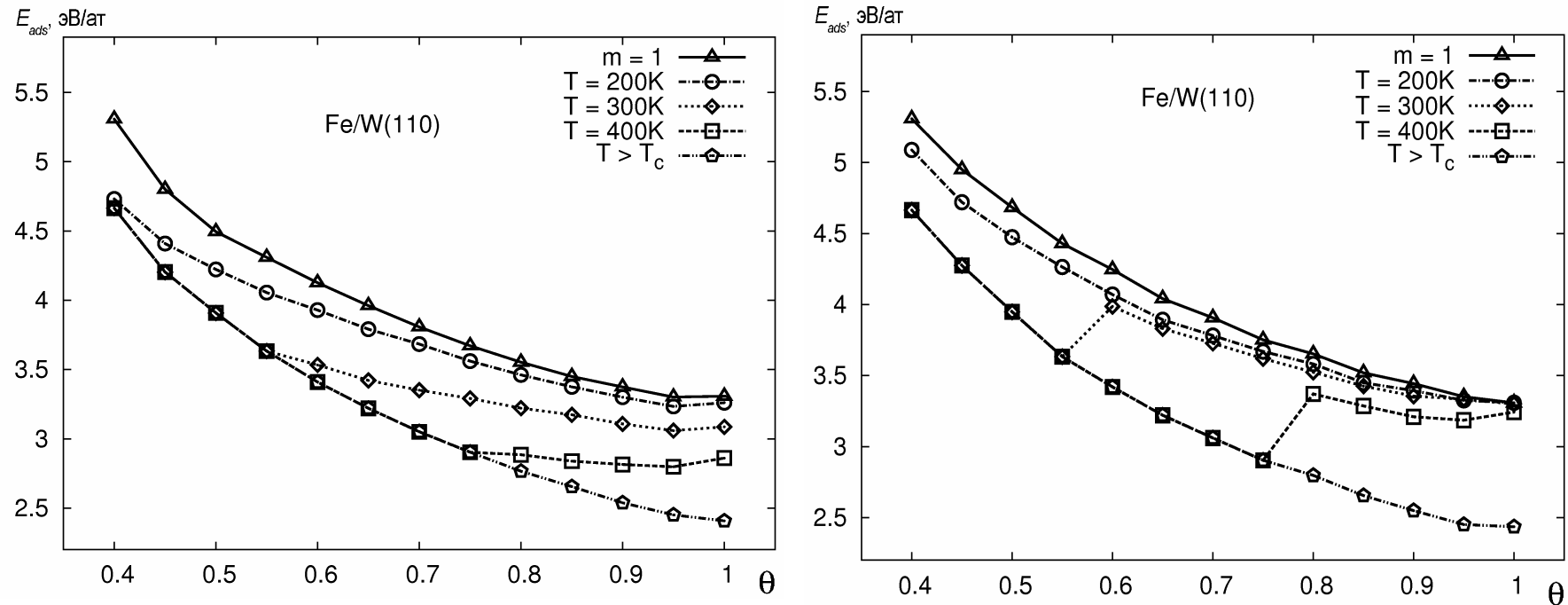


Рис.2. Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\theta$  для системы Fe/W(110) в приближении а) молекулярного поля, б) 2D модели Изинга.

# Результаты расчетов

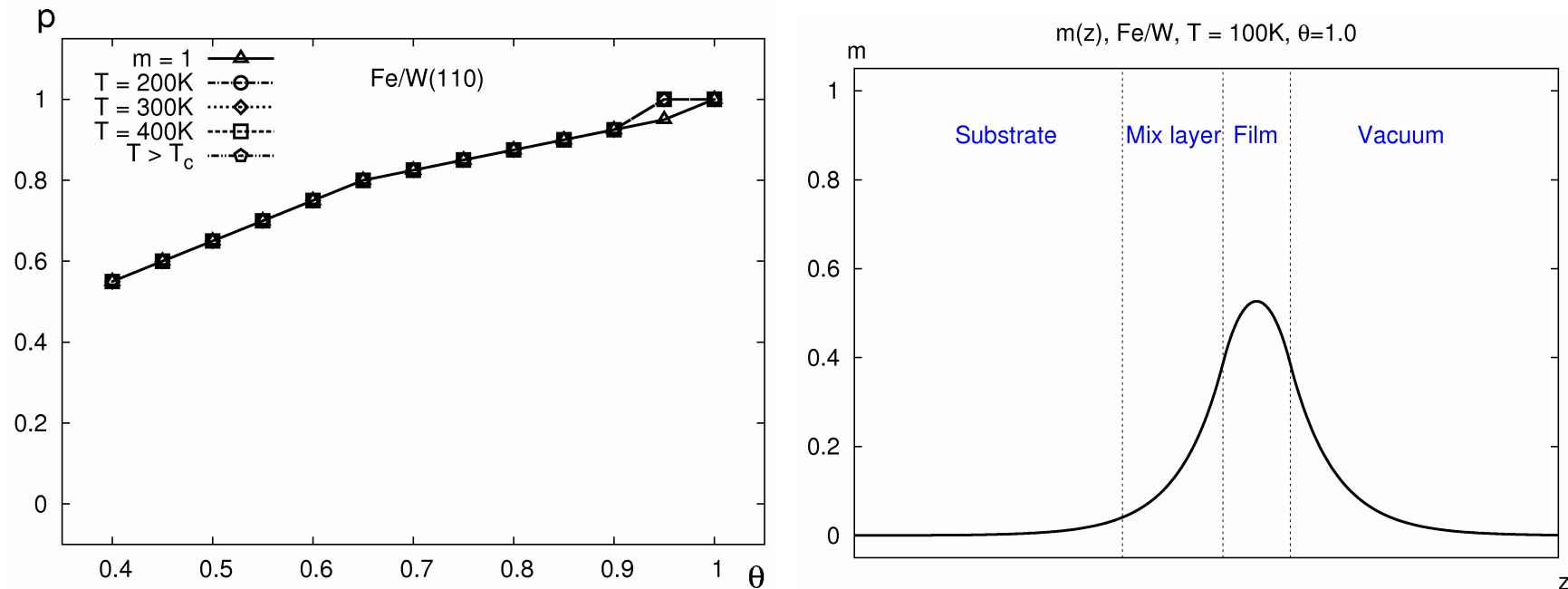


Рис.3. Зависимость доли магнитных ионов  $\rho$  в пленке от параметра покрытия  $\Theta$  (а) и распределение намагниченности  $m$  (б) для системы Fe/W(110) в приближении 2D модели Изинга.



# Результаты расчетов

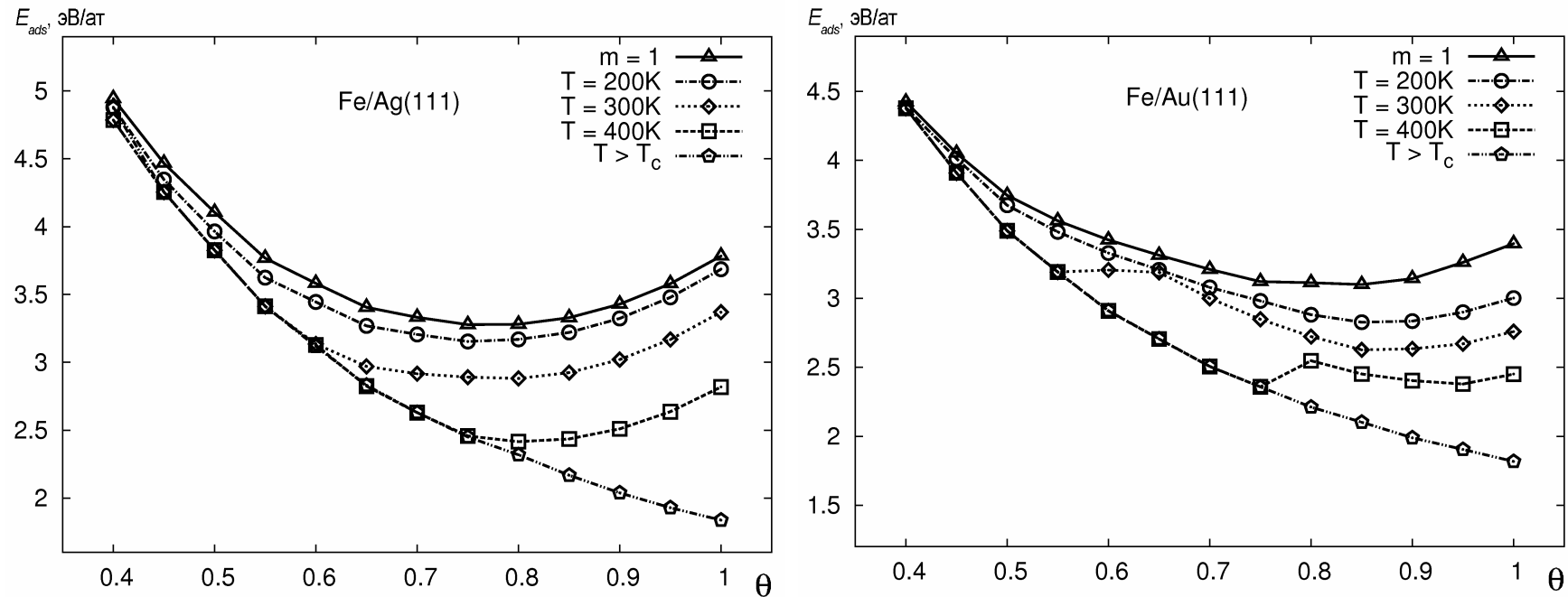


Рис.4. Зависимость энергии адсорбции от параметра покрытия  $\theta$  для систем а) Fe/Ag(111) в приближении 2D модели Изинга и б) Fe/Au(111) в приближении 2D XY модели.

# Результаты расчетов

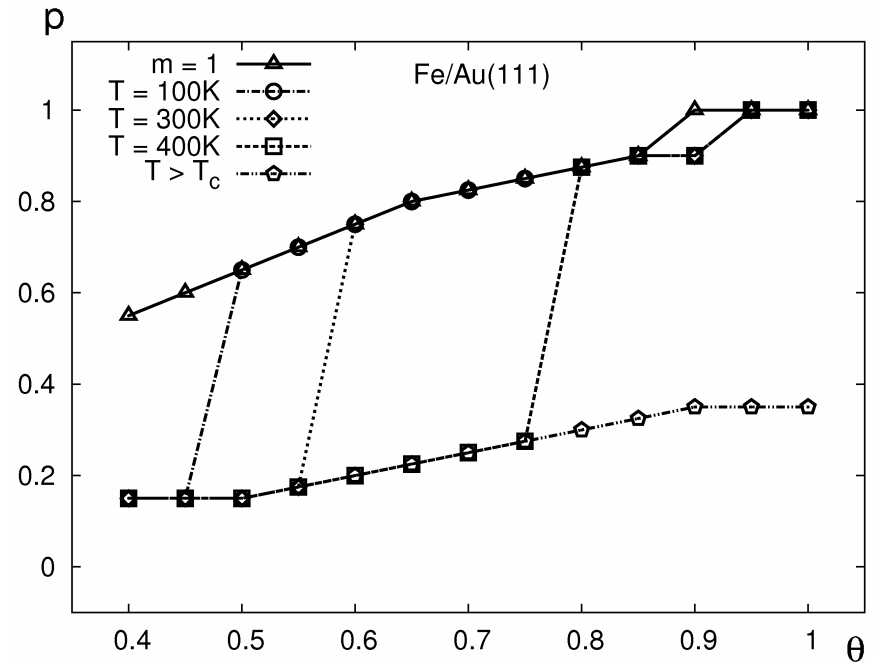
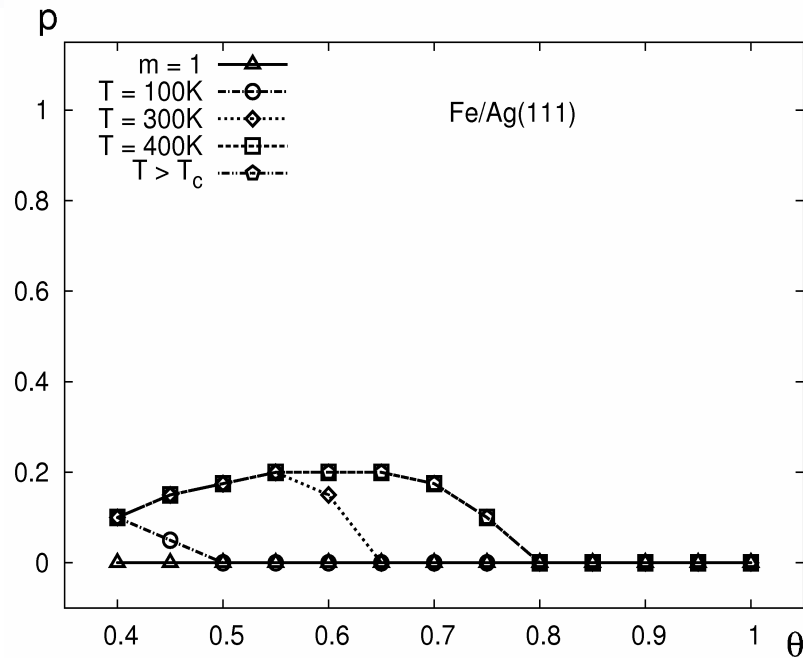


Рис.5. Зависимость доли магнитных ионов  $\rho$  в пленке от параметра покрытия  $\Theta$  для систем а) Fe/Ag(111) в приближении 2D модели Изинга и б) Fe/Au(111) в приближении 2D XY модели.

# Результаты расчетов

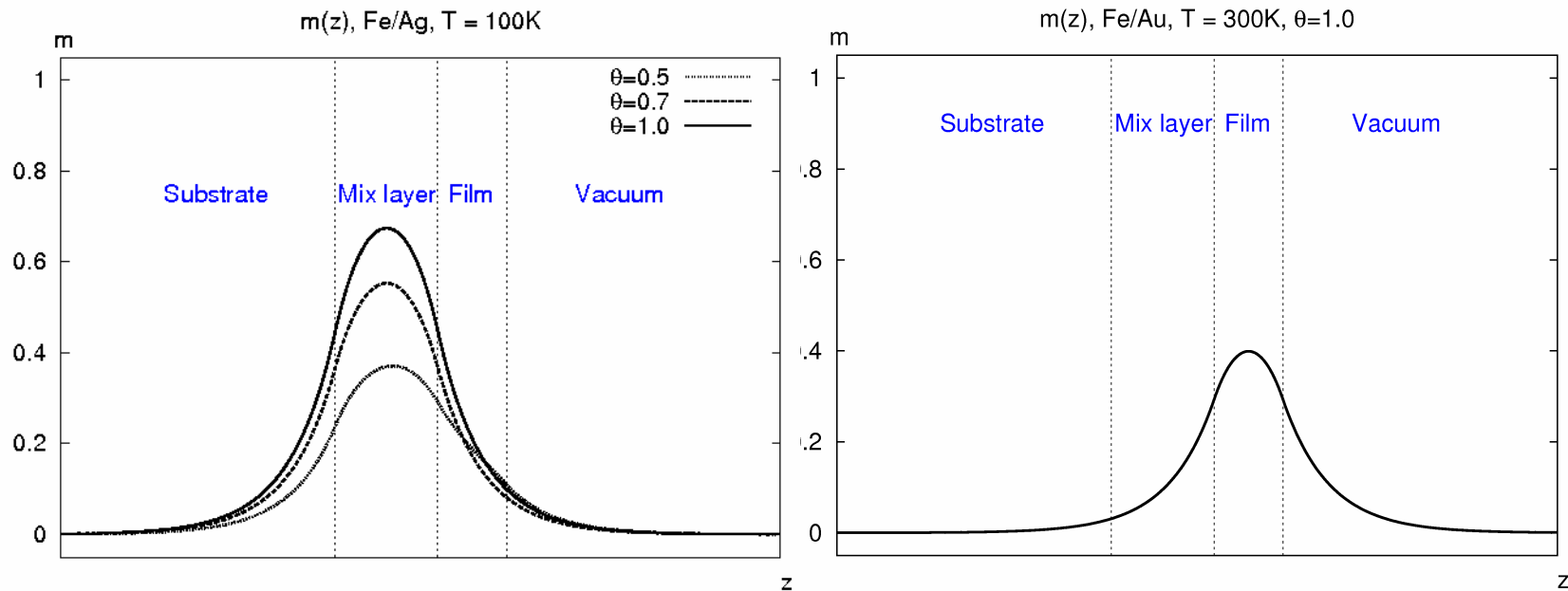


Рис.6. Распределение намагниченности  $m$  для систем а) Fe/Ag(111) и б) Fe/Au(111) для различных значений температуры  $T$  и параметра покрытия  $\theta$ .

# Выводы

---

- 1) Эффекты ферромагнитного упорядочения в монослойной пленке проявляются в увеличении энергии адсорбции на величину  $\Delta E_{\text{ads}}=1-2 \text{ eV}$ ;
  - 2) Распределение магнитных ионов в приповерхностном слое и образование различных типов адсорбционных структур определяется во многом соответствием поверхностных энергий и кристаллических структур материала подложки и адсорбата;
  - 3) Пространственное распределение намагниченности в приповерхностном слое определяется типом адсорбционной структуры, и существенно зависит от температуры и параметра покрытия  $\theta$ .
-

# Метод функционала плотности (приложение)

$$\sigma_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z, \beta)] - f[n_0(z)]\} dz$$

$$f[n(z)] = w_0[n(z)] + w_2[n(z), |\nabla n(z)|^2] + w_4[n(z), |\nabla n(z)|^4] - T(s_{id} + s_m)$$

$$w_0[n(z)] = w_{kin} + w_{cul} + w_{ex} + w_{cor}$$

$$w_{kin} = 0,3(6\pi^2)^{2/3} [n_+^{5/3}(z) + n_-^{5/3}(z)] + k_B^2 \left( \frac{\pi^2}{4} \right) T \left[ \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right]$$

$$w_{cul} = 0,5\varphi(z)n(z)$$

$$w_{ex} = -0,75(6/\pi)^{1/3} [n_+^{4/3}(z) + n_-^{4/3}(z)]$$

$$w_{cor} = -0,056 \frac{n_-^{1/3} n_+(z)}{0,079 + n_-^{1/3}(z)} - 0,056 \frac{n_+^{1/3} n_-(z)}{0,079 + n_+^{1/3}(z)}$$

# Метод функционала плотности (приложение)

$$s_{id}(z) = \frac{\pi^2}{2} k_B^2 T \left( \frac{n_+(z)}{\varepsilon_{F+}} + \frac{n_-(z)}{\varepsilon_{F-}} \right)$$

$$s_m = k_B \frac{n(z)}{2} [\ln 4 + (1+m)\ln(1+m) + (1-m)\ln(1-m)]$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ii} = & \sqrt{3} \frac{Z_1^2}{c_1^3} \exp\left(-\frac{4\pi d_1}{\sqrt{3}c_1}\right) + 2\sqrt{3} \frac{Z_2^2}{c_2^3} \exp\left(-\frac{4\pi d}{\sqrt{3}c_2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi d}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) + \\ & + 2\sqrt{3} \frac{Z_3^2}{c_3^3} \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right) - 2\sqrt{3} \frac{Z_1 Z_2}{(c_1 c_2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{d_1}{c_1} + \frac{l}{c_2}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi d}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) - \\ & - 2\sqrt{3} \frac{Z_2 Z_3}{(c_2 c_3)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{l+D}{c_2} + \frac{h+D}{c_3}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi d}{\sqrt{3}c_2}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right) - \\ & - 2\sqrt{3} \frac{Z_1 Z_3}{(c_1 c_3)^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{d_1+D+l/2}{c_1} + \frac{h+D+l/2}{c_3}\right)\right) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{4\pi h}{\sqrt{3}c_3}\right)\right), \end{aligned}$$

# Метод функционала плотности (приложение)

$$\begin{aligned} \sigma_{ei} = & \frac{2\pi}{\beta^2} [(n_1^2 - n_1 n_2 (1 - e^{-\beta l}) - n_1 n_3 e^{-\beta(2D+l)} (1 - e^{-\beta h})) (1 - \frac{\beta d_1 e^{-\beta d_1 / 2}}{1 - e^{-\beta d_1}} ch(\beta r_{c1})) + \\ & + (2n_2^2 - n_1 n_2 - n_2 n_3 e^{-2\beta D} (1 - e^{-\beta h})) (1 - e^{-\beta l}) (1 - \frac{\beta l e^{-\beta l / 2}}{1 - e^{-\beta l}} ch(\beta r_{c2})) + \\ & + (2n_3^2 - n_1 n_3 e^{-\beta(2D+l)} - n_2 n_3 e^{-2\beta D} (1 - e^{-\beta h})) (1 - e^{-\beta l}) (1 - \frac{\beta h e^{-\beta h / 2}}{1 - e^{-\beta h}} ch(\beta r_{c3}))], \end{aligned}$$

$$w_2 = \sum_{n=n_-, n_+} \frac{1}{72} \frac{|\nabla n|^2}{n} + w_{2,xc} [n, |\nabla n|^2],$$

$$w_{2,xc} [n_{+/-}] = \frac{A(n_{+/-}) B^2(n_{+/-}) |\nabla n_{+/-}|^2}{3^{4/3} \pi^{5/3} n_{+/-}^{4/3}},$$

$$A(n_{+/-}) = 0.4666 + 0.3735 k_{F+/-}^{-2/3} (n_{+/-}),$$

$$B(n_{+/-}) = -0.0085 + 0.3318 k_{F+/-}^{1/5} (n_{+/-}),$$

$$k_{F+/-} (n_{+/-}) = (3\pi^2 n_{+/-})^{1/3},$$

# Метод функционала плотности (приложение)

---

$$w_4(z) = w_{4,kin}(z) + w_{4,xc}(z),$$

$$w_{4,kin} = \sum_{n=n_-,n_+} \frac{1.336}{540(3\pi^2 n)^{3/2}} \left[ \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right) \frac{|\nabla n|^2}{n} + \frac{1}{3} \frac{|\nabla n|^4}{n} \right],$$

$$w_{4,xc} = \sum_{n=n_-,n_+} 2.94 \cdot 10^{-4} \exp(-0.2986n^{-0.26}) \left( \frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2,$$

---