

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ

На правах рукопису

ФЛОКА ВІКТОР МИХАЙЛОВИЧ

УДК 539.211

СПІНОВА ПОЛЯРИЗАЦІЯ ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ
ПОВЕРХОНЬ Fe, Ni I Cr
ТА СПЛАВІВ 3d-ФЕРРОМАГНЕТИКІВ З Al

01.04.13 — фізика металів

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ — 1995

AB 32,520

Дисертація є рукопис
Робота виконана в Інституті металофізики
Національної Академії наук України

- Наукові керівники:
- доктор фізико-математичних наук
В. Т. Черепін
 - кандидат фізико-математичних наук
А. А. Остроухов
- Офіційні опоненти:
- доктор фізико-математичних наук
Ю. Н. Кучеренко
 - кандидат фізико-математичних наук
А. А. Лісенко
- Провідна організація:
- Київський Національний університет
ім. Т. Г. Шевченка

Захист відбудеться *«21» серпня* 1995 р. о *14* год. на засіданні спеціалізованої ради Д 01.75.01 при Інституті металофізики НАН України за адресою: 252680 Київ-142, бульв. акад. Вернадського, 36, конференц-зал.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту металофізики НАН України.

Автореферат розіслано *19. серпня* 1995 р.

Вчений секретар
спеціалізованої ради,
доктор фізико-математичних наук

В. К. Пишак В. К. Пишак

ЛННБ України ім.В.Стефаника

реника
и



00779097 (\$)

Актуальність проблеми. За останній час бурливо розвивається галузь науки, пов'язана з дослідженням та одержанням штучних магнітних матеріалів з заздалегідь заданими властивостями: поверхонь, поверхонь розподілу, тонких плівок та багатошарових систем. Це стало можливим завдяки виникненню якісно нових як лабораторних, так і теоретичних (насамперед обчислювальних) методів: з одного боку, були розроблені технології, за допомогою яких за умов надвисокого вакууму можна на атомному рівні синтезувати низькорозмірні матеріали (нитки та плівки) високої якості; з іншого боку, підвищення обчислювальної потужності сучасної комп'ютерної техніки надало можливість виконувати надзвичайно складні розрахунки реальних систем без будь-яких спрощень. Рушійною силою цих досліджень виступають потреби високих технологій, насамперед це — магнітний та магнітооптичний запис, створення магнітопружного обладнання, інтегральних оптичних та електронних приладів та постійних магнітів. Теоретичне та експериментальне дослідження поверхонь, моношарових та епітаксіальних плівок, напівпровідникових підкладок і т. п. приводить до необхідності розуміння фізичної природи явищ на поверхнях розподілу, обмінних взаємодій через поверхні розподілу, посереднього обміну, магнітопружності, магнітної анізотропії, тощо. І тут неможливо переоцінити роль теоретичних методів розрахунків електронної структури з перших принципів, насамперед — методу лінеаризованих приєднаних плоских хвиль з довільною формою кристалічного потенціалу (FLAPW), який надає надзвичайно точну інформацію про властивості досліджуваних об'єктів — розподіл заряду та спіну в прямому просторі, локальні магнітні моменти, надтонкі магнітні поля, магнітну анізотропію, тощо.

Теоретичні розрахунки з перших принципів надають можливість, поперше, виділити головні особливості електронної структури, які визначають ті чи інші фізико-хімічні властивості поверхні, що спостерігаються в експерименті; по-друге, першопринципні розрахунки дозволяють моделювати фізичні властивості ще не створених об'єктів, що надає можливість цілеспрямовано створювати матеріали з наперед заданими властивостями.

Мета роботи полягає у вивченні магнітних властивостей поверхонь магнітопорядкованих перехідних металів; одержання даних про електронну та магнітну структуру *3d*-перехідних металів групи заліза (Fe, Ni, Cr) поблизу рівня Фермі; встановлення магнітних властивостей поверхонь сплавів Fe, Co і Ni з Al.

Досягнення цієї мети вимагало:

— розробки і реалізації спин-поляризованої версії самоузгодженого скалярно-релятивістського методу FLAPW для розрахунків електронної

структури та пов'язаних з нею магнітних властивостей простих та перехідних металів.

До нинішнього часу методом FLAPW проведено лише декілька розрахунків електронної структури поверхонь магнітоупорядкованих перехідних металів. Заздалегідь невідомо, яким чином неврахування точної форми кристалічного потенціалу в глибині і особливо на поверхні кристалу поінформувати на такому тонкому явищі, як поверхневий магнетизм, і до якої міри теорія функціоналу електронної густини відповідає за розбіжності експериментальних даних з результатами теоретичних розрахунків. Таким чином, задача даної роботи полягала в тому, щоб провести незалежний розрахунок електронної структури магнітних поверхонь в наближеннях, обумовлених тільки теорією функціоналу електронної густини, і одержати нові дані про структуру цих поверхонь.

Наукову новизну роботи складають:

— дані про магнітні властивості поверхонь Fe(100), Ni(100) і Cr(100), які визначаються електронною структурою поблизу рівня Фермі. Отримані просторові розподіли спіну в елементарній комірниці для цих поверхонь, локальні магнітні моменти та спінові поляризації, які відповідають вузькому енергетичному інтервалу поблизу рівня Фермі;

— дані про електронну структуру та магнітні властивості поверхонь (100) сплавів структури B2: FeAl, CoAl і NiAl.

Теоретична та практична цінність роботи.

Проведені дослідження електронної структури поверхонь (100) Fe, Ni і Cr в певному енергетичному вікні (~0,2 eV), що знаходиться безпосередньо під рівнем Фермі, дозволяють адекватно інтерпретувати експериментальні дані про електронну структуру поверхні, отримані за допомогою експериментальних методів, що мають високу просторову та енергетичну чутливість, тобто методів, у яких спостерігається внесок тільки від електронних станів, локалізованих у верхній частині енергетичного спектру (скануюча тунельна мікроскопія, метод зняття збудження метастабільного атому гелію).

Методичне значення даної роботи полягає в тому, що розроблено надзвичайно точний спин-поляризований метод для розрахунків електронної структури поверхонь твердих тіл, в якому знято всі обмеження на форму застосованого потенціалу. Цей метод особливо ефективний для розгляду об'єктів з сильними неоднорідностями в розподілі електронного заряду (поверхні твердих тіл, кристалічні дефекти, ковалентні кристали).

Апробація роботи. Матеріали дисертаційної роботи доповідались на: Міжнародній конференції по електронній мікроскопії поверхні (Київ, Україна, 1993 р.); 14-й Європейській конференції по дослідженню поверхні (Лейпциг, ФРН, 1994 р.).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 4 статті.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота викладена на 135 сторінках друкарського тексту, складається із чотирьох розділів, висновків, списку літератури (134 найменування); вміщує 39 малюнків та 26 таблиць.

Особистий внесок дисертанта в роботу:

- розроблено реалізацію спін-поляризованого, скалярно-релятивістського методу FLAPW, створено відповідний комплекс програм для розрахунків та графічного подання результатів;

- розрахована електронна структура поверхонь (100) чистих металів Fe, Ni, Cr та сплавів FeAl, CoAl, NiAl.

Наукові положення, що захищаються автором дисертації:

- реалізація спін-поляризованого, скалярно-релятивістського методу лінеаризованих плоских хвиль з повним потенціалом для розрахунків електронної структури поверхонь магнітоупорядкованих кристалів;

- для поверхонь (100) Fe, Ni та Cr спінова густина, що відповідає енергетичному вікну поблизу рівня Фермі, значно відрізняється від повної спінової густини. Для поверхонь (100) Fe та Ni повний поверхневий магнітний момент m_{surf} і поверхневий магнітний момент на рівні Фермі $m_{\text{surf}}(E_F)$ протилежні за знаком. Для Cr (100) спостерігається сильне зменшення магнітного моменту на рівні Фермі $m_{\text{surf}}(E_F)$ порівняно з повним магнітним моментом m_{surf} ;

- в сплавах FeAl і CoAl, на відміну від об'єму, поверхня є феромагнітною. При цьому величина магнітного моменту поверхневого шару дещо нижча порівняно з магнітним моментом поверхні чистого феромагнетика. Поверхня (100) NiAl є парамагнітною.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Огляд літератури. Зроблено огляд робіт, в яких проводилося дослідження поверхневого магнетизму 3d-перехідних металів (Fe, Ni, Cr). Обговорюються можливі підходи до розв'язання проблеми. Показано, що для теоретичних розрахунків з перших принципів електронної структури магнітоупорядкованих поверхонь суттєвим є застосування повного кристалічного потенцілу, на який не накладається будь-яких модельних обмежень. З цієї точки зору найбільш точним і потужним методом є метод FLAPW для поверхні.

В цьому ж розділі аналізується кореляція даних по поверхневому магнетизму, отриманих високочутливими спін-поляризованими експериментальними методами дослідження поверхонь з даними першопринципних розрахунків електронної структури. Підкреслюється важливість застосування високоточного методу розрахунків для інтерпретації результатів експерименту.

Реалізація методу лінеаризованих плоских хвиль з повним кристалічним потенціалом (FLAPW)

В розділі 3.1 показано, яким чином скалярно-релятивістське наближення використовується для проведення спін-поляризованих розрахунків електронної структури. Наведено скалярно-релятивістські рівняння, які розв'язуються для кожної з спінових підсистем.

У розділі 3.2 розглянуто плівкову модель, що використовується як структурна модель для апроксимації напівнескінченного кристалу для проведення розрахунків електронної структури в методі FLAPW. Показано, що для розрахунків електронної структури поверхні металів з сильно локалізованими електронними станами (в т. ч. перехідних) цілком задовільним є застосування 5-7 атомних шарів в плівці. В усіх розрахунках, що проведені в межах даної роботи, використовувались плівки, що склалися з 7 атомних шарів. Наведено вигляд базисних функцій методу FLAPW в кожній з трьох областей (MT-сфери, проміжна область і вакуум), на які поділяється елементарна комірка. При цьому розподіл елементарної комірки на області є до певної міри умовним, тому що в кожній з областей не існує ніяких обмежень на форму електронної густини і потенціалу:

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_l f_l''(r) Y_l(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in I \text{ (сфери)} \\ \sum_{\varphi} f_{\varphi} \exp(i\mathbf{G}_{\varphi}\mathbf{r}) \cos(k_{\rho}z), & \mathbf{r} \in II \text{ (проміжна область)} \\ \sum_l f_l(z) \exp(i\mathbf{G}_l\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in III \text{ (вакуум)} \end{cases} \quad (1)$$

де $f(\mathbf{r})$ — густина або потенціал; \mathbf{G}_s — вектор двовірної зворотньої ґратки; $k_{\rho} = \frac{2\pi}{D'} \rho$ ($\rho = 0, 1, 2, \dots$); параметр D' обирається таким чином, що $D' > D$, D товщина плівки.

Розглянуто процедуру побудови симетризованих комбінацій блоховських функцій для двовірних точечних груп C_{nv} ($n = 1, 2, 4$) симетри хвильових векторів в зонах Бриллюена ґраток ОЦК (100) та ГЦК (100).

За допомогою введення операції відображення відносно серединної площини ($z = 0$) плівки S_z побудовано трьохвірну групу симетрії плівки $S_z \otimes C_{4v}$. Незвідні представлення групи симетрії $S_z \otimes C_{4v}$ розкладено по звідним представленням групи трьохвірних обертань \mathcal{U} та кубічної групи O_h . Розглянуто специфіку поверхневих станів в енергетичних спектрах, розрахованих в моделі плівки. Зроблено висновок, що хоча внаслідок особливості моделі плівки в розрахунку присутні окремо спектри поверхневих станів, парних та непарних відносно відображення в площині $z = 0$, ці спектри

співпадають за умовою правильного вибору товщини плівки.

Як і більшість першопринципних методів розрахунку електронної структури, метод FLAPW є варіаційним методом, в якому для знаходження одноелектронних хвильових функцій основного стану застосовується варіаційна процедура, яка, в свою чергу, зводиться до розв'язання узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень.

$$(H_{mnm'n'} - E(\mathbf{k}) S_{mnm'n'}) c_{m'n'} = 0, \quad (2)$$

де $H_{mnm'n'}$ и $S_{mnm'n'}$ — відповідно елементи матриць гамільтоніану і перекриття; $E(\mathbf{k})$ — одноелектронні енергії; $c_{m'n'}$ — варіаційні коефіцієнти в розкладанні одноелектронної кристалічної хвильової функції $\Psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ по базисним функціям $\phi_j(\mathbf{K}_j, \mathbf{r})$:

$$\Psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_j c_{ij} \phi_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}_j, \mathbf{r}). \quad (3)$$

Елементи матриці перекриття зручно записати у вигляді суми інтегралів по трьох областях в елементарній комірі:

$$\begin{aligned} S_{mnm'n'} &= \int_I \{\varphi_{mn}\}^* \varphi_{m'n'} d\tau + \int_{II} \{\varphi_{mn}\}^* \varphi_{m'n'} d\tau + \int_{III} \{\varphi_{mn}\}^* \varphi_{m'n'} d\tau = \\ &= S_{mnm'n'}^I + S_{mnm'n'}^{II} + S_{mnm'n'}^{III} \end{aligned} \quad (4)$$

(I — МТ сфери, II — проміжна область, III — вакуум). Елементи матриці гамільтоніану зручно ще представити у вигляді суми МТ- та не-МТ-доданків:

$$H = H_0^I + H_0^{II} + H_0^{III} + \Delta H_{NS} + \Delta H^I + \Delta H^{vac}. \quad (5)$$

Тут H_0^i ($i = I, II$ или III) відповідає МТ-частині гамільтоніану системи в області i ; ΔH_{NS} — не-МТ-поправка через несферичність кристалічного потенціалу в сферах; ΔH^I і ΔH^{vac} — поправки через відхилення форми потенціалу від МТ-форми відповідно у проміжній та вакуумній областях.

Розглянуто також процедуру обчислення кристалічної густини (1) з використанням одноелектронних кристалічних хвильових функцій в кожній з трьох областей.

В кінці розділу 3.2 описано процедуру самоузгодження в методі FLAPW.

В розділі 3.3 розглянуто процедуру обчислення повного кристалічного потенціалу. Знаходження повного потенціалу, на форму якого не накладається будь-яких обмежень, — ключовий момент методу FLAPW.

В наближенні функціоналу електронної густини повна енергія системи електронів та ефективний одноелектронний потенціал є функціоналами

електронної густини системи. В цьому наближенні одноелектронний кристалічний потенціал $V(r)$ можна представити у вигляді суми

$$V(r) = V_c(r) + V_x(r), \quad (6)$$

де $V_c(r) = V_c[\rho(r)]$ і $V_x(r) = V_x[\rho(r)]$ — відповідно кулонівська (розв'язок рівняння Пуассона в елементарній комірці) та обмінно-кореляційна складові.

В силу того, що електронна густина в кристалі має трансляційну симетрію, для знаходження кристалічного потенціалу було б слушним застосувати метод Фур'є для розв'язання рівняння Пуассона. Проте представлення густини (1) має той недолік, що представлення у вигляді ряду Фур'є застосовується тільки в проміжній області, яка має, загалом кажучи, достатньо складну геометрію. Це обумовлено тим, що знадобилось би занадто багато плоских хвиль для апроксимації атомноподібної густини в сферах. Для застосування методу Фур'є потрібно в елементарній комірці замінити дійсну електронну густина $\rho(r)$ на псевдогустина $\tilde{\rho}(r)$, яка будується таким чином: спочатку густина в проміжній області $\rho^{PW}(r)$ аналітично продовжується в сфери, потім до отриманої густини в сферах додається густина $\Delta\tilde{\rho}(r)$, яка обирається так, щоб псевдогустина

$$\tilde{\rho}(r) = \rho^{PW}(r) + \Delta\tilde{\rho}(r) \quad (7)$$

мала в сферах саме такі ж мультипольні моменти, що й істинна густина $\rho(r)$. Основна проблема полягає в виборі конкретного вигляду функції $\Delta\tilde{\rho}(r)$: потрібно, щоб вона мала розклад в ряд Фур'є, що швидко збігається. Якщо ця проблема розв'язана, то наступна задача знаходження кулонівського кристалічного потенціалу вирішується в два етапи:

1. Відомо, що потенціал, створений зарядом, зосередженим у МТ-сфері, за її межами не залежить від істинного розподілу цього заряду по сфері. Тому спочатку знаходиться потенціал за межами сфер шляхом розв'язання рівняння Пуассона з псевдогустиною (7) в правій частині.

2. Потім, застосовуючи отриманий потенціал за межами сфер як граничну умову для граничної задачі Діріхле, знаходиться кулонівський потенціал в кожній з МТ-сфер.

Ця програма реалізована в даній роботі. Одержано робочі формули для обчислення кулонівського потенціалу в елементарній комірці. Наведені результати відповідних тестів.

Також одержано робочі формули для обчислення спин-поляризованого обмінно-кореляційного потенціалу $V_{\sigma_x}[\rho(r), \rho_{\sigma}(r)]$ в кожній з трьох областей.

В кінці розділу наведено висновки щодо міркувань по застосуванню метода FLAPW для дослідження магнітних властивостей поверхонь. Підкреслюється, що тільки використання повного потенціалу в методи

FLAPW дозволяє надійно провести процедуру самоузгодження густини заряду та потенціалу, що обчислюються на кожній ітерації. В результаті отримується найбільш достовірною форма перехідної області кристал—вакуум.

Розрахунки електронної структури було виконано для основного стану семишарових плівок ОЦК-фази Fe і Cr, ГЦК-фази Ni, B2-фази FeAl, CoAl і NiAl. В результаті тестових розрахунків було отримано оптимальні умови обчислень. У процесі самоузгодження для інтегрування по зоні Бриллюена було застосовано метод трикутників з використанням лінійної інтерполяції по 21 точці у 1/8 незвідній частині зони Бриллюена, а на останній ітерації було використано набір з 45 точок. Для кожного типу станів (парних та непарних відносно відображення $z \rightarrow -z$) варіаційний базис вмщував близько 250 лінеаризованих плоских хвиль. Для зшивання хвильових функцій на межах MT-сфер було здійснено розклад плоских хвиль по сферичних функціях з максимальним значенням $l = 8$. При побудові частини матричного елемента гамільтоніана ΔH_{NS} , що відповідає несферичним членам у розкладі потенціалу по сферичним функціям, всередині MT-сфер враховувались тільки коефіцієнти $V_{lm}^a(r)$ з $l \leq 4$ в (1). Процес самоузгодження було прискорено завдяки використанню схеми Бройдена для примішування. Самоузгодження вважалося досягнутим, коли середньоквадратичне відхилення повної і спінової густин в кожній сфері та в елементарній комірці в цілому на вході і виході ітерації було менше, ніж $5 \cdot 10^{-4}$ ел./(а.о.)³. Такий відміні густини відповідає відміна потенціалу близько 1 мРід.

Розрахунки електронної структури всіх поверхонь проводилися у наближенні локальної спінової густини для обмінно-кореляційного потенціалу, що брався у формі Воско-Вілк-Нусер.

Спін-поляризовані розрахунки електронної структури перехідних металів і сплавів

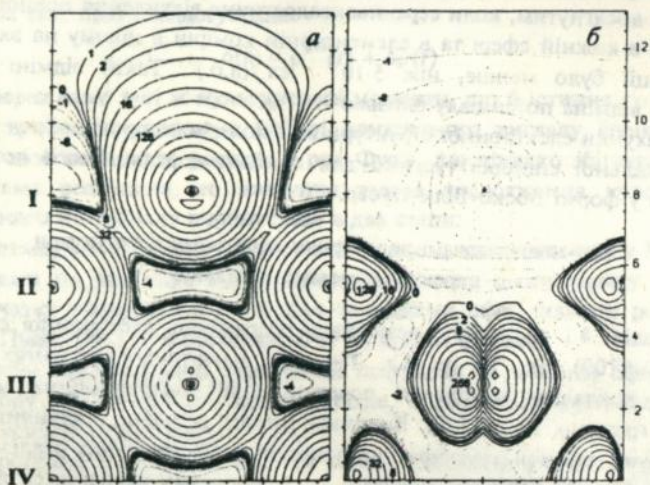
В розділі 4.1 розглянуто результати розрахунків електронної структури поверхонь (100) Fe, Ni та Cr. Посеред магнітоупорядкованих металів найбільш докладно досліджені поверхні (100) 3d-перехідних металів з кубічною ґраткою, Fe, Ni і Cr. Викликає інтерес детальне порівняння характеристик електронної структури цих поверхонь, розрахованих реалізованим в роботі методом FLAPW для поверхні, з результатами експериментальних та теоретичних робіт інших авторів. Одержано також нові дані по електронній структурі і магнітним властивостям цих поверхонь, зокрема розподіл спінової густини на рівні Фермі в прямому просторі, локальні магнітні моменти та спінові поляризації на рівні Фермі.

Отримана величина роботи виходу 4,38 еВ для феромагнітного Fe добре узгоджується з експериментом. Цікаво зазначити, що наявність магнітного впорядкування помітно впливає на електронні властивості, зокрема, на ро-

боту виходу. В парамагнітному (не спин-поляризованому) розрахунку величина роботи виходу виявилася рівною 5,02 еВ. Цю різницю можна пояснити тим, що феромагнітне впорядкування приводить до заповнення більш компактних антизв'язуючих орбіталей, які не заповнені в парамагнітній фазі. Це приводить до зменшення величини дипольного бар'єру, що в свою чергу обумовлює зниження роботи виходу. Величина роботи виходу поверхонь Ni (100) та Cr (100) — відповідно 5,47 та 4,00 еВ.

Для кожної спінової підсистеми наведено локальні (пошарові) густини станів, спектри поверхневих станів, які добре узгоджуються з даними експериментів та теоретичного розрахунку методом FLAPW, проведеного іншими авторами. Проаналізовано вклади поверхневих станів в поверхневий магнетизм.

За останній час було розвинуто експериментальні методи для отримання інформації щодо електронної структури та магнітного порядку на кристалічних поверхнях (спин-поляризовані методи електронної скануючої мікроскопії, зняття збудження метастабільного атому гелія), які мають висо-



Мал. 1. Ізолінії повної спінової густини (а) та спінової густини на рівні Фермі ($\Delta E = 0,2$ еВ) (б) в площині (110) елементарної комірки 7-шарової плівки Fe (100). I — поверхневий, IV — центральний шари плівки. Пунктирні лінії відповідають негативним значенням спінової густини. Перша негативна ізолінія має величину $-1 \cdot 10^{-4}$ ел./(а.о.)³, перша ненегативна відповідає нульовій величині густини, друга — величині $1 \cdot 10^{-4}$ ел./(а.о.)³, величина спінової густини на кожній наступній ізолінії в 2 рази більша, ніж на попередній

ку просторову та енергетичну чутливість. Проте експериментальні величини поверхневої намагніченості, отримані цими експериментальними методами, можуть значно відрізнятися від даних, отриманих в першопринципних спин-поляризованих розрахунках. Зокрема, експеримент може вказувати на наявність негативного поверхневого магнітного моменту, в той час коли результати розрахунків однозначно свідчать про те, що цей момент позитивний і навіть більший за величину моменту в об'ємі завдяки більш низькому значенню координаційного числа для поверхневих атомів. Виникнення цієї суперечності пояснюється тим, що в цих експериментальних методах вимірюється спінова поляризація, яка відповідає електронам, локалізованим у відносно вузькому ($\sim 0,2$ eV) енергетичному інтервалі поблизу енергії Фермі, а не всім електронам, локалізованим у поверхневому шарі. Таким чином, замість звичайної спінової густини

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, E} [\rho_{\uparrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r}) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r})], \quad (8)$$

потрібно розглядати спінову густину на рівні Фермі:

$$\rho_s(\mathbf{r}, E_F) = \sum_{\mathbf{k}, E_F - \Delta E < E < E_F} [\rho_{\uparrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r}) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r})]. \quad (9)$$

У рівняннях (8), (9) $\rho_{\uparrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r})$ і $\rho_{\downarrow}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r})$ — густини заряду, що відповідають спінам «вверх» і спінам «вниз»; в рівнянні (8) підсумовування проводиться по всіх зайнятих станах в зоні Бриллюена; в рівнянні (9) різниця між густинами заряду інтегрується по зоні Бриллюена тільки в енергетичному інтервалі ΔE , верхня межа якого утворена рівнем Фермі. Звичайно в експериментах величина ΔE складає $\sim 0,2$ eV, величина \mathbf{r} — декілька ангстрем.

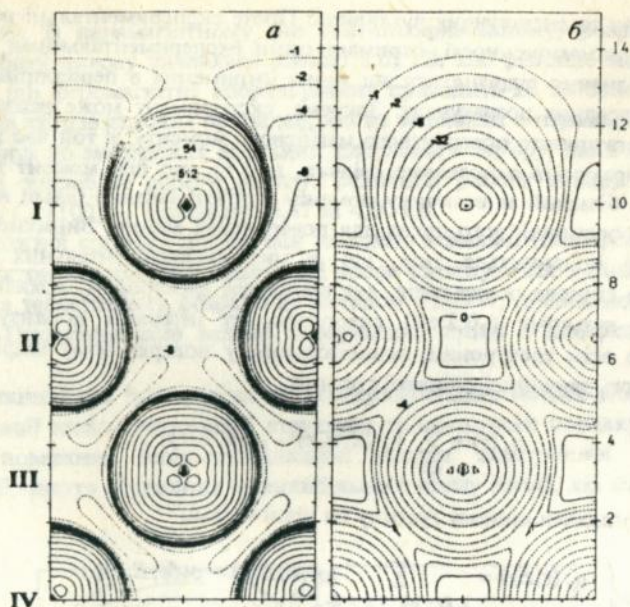
Карти повної спінової густини (8) і спінової густини на рівні Фермі (9) для поверхонь наведено на мал. 1, 2 і 3 відповідно для поверхонь Fe (100), Ni (100) і Cr (100).

Кількісне порівняння результатів експериментів та теоретичних розрахунків можна отримати також за величиною спінової поляризації, усередненої в площинах $z = \text{const}$:

$$P(z) = \frac{\rho_{\uparrow}(z) - \rho_{\downarrow}(z)}{\rho_{\uparrow}(z) + \rho_{\downarrow}(z)}. \quad (10)$$

На мал. 4 зображено залежності $P(z)$ та $P(z, E_F)$.

Також для поверхонь Fe (100), Ni (100) і Cr (100) проаналізовано залежність величини спінової поляризації в поверхневому шарі від ширини енергетичного інтервалу ΔE . Наведено ділянки двомірних поверхонь Фермі,



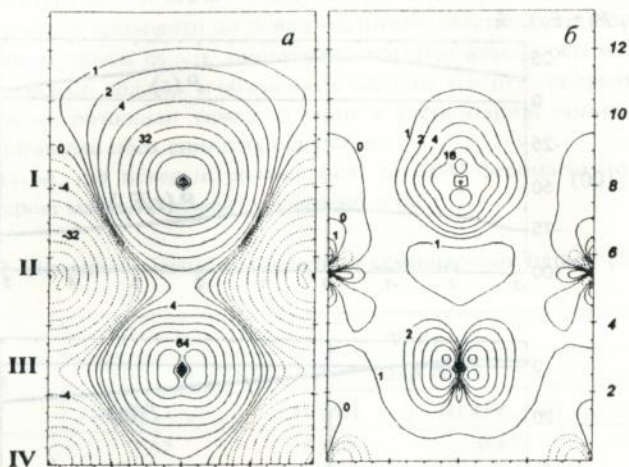
Мал. 2. Ізолінії повної спінової густини (а) та спінової густини на рівні Фермі ($\Delta E = 0,2$ eВ) (б) в площині (110) елементарної комірки 7-шарової лівки Ni (100). Ізолінії проведено в такий же спосіб, як і на мал. 1

утворених поверхневими станами, які дають найбільший внесок в поверхневий магнетизм поблизу рівня Фермі.

У випадку Fe (100) на відміну від повної спінової густини (8), наведеної на мал. 1, а, яка позитивна в поверхневому шарі і вакуумі, маючи там явний *sp*-характер, спінова густина (9) негативна і має переважно *d*-характер. В результаті поверхневий магнітний момент $m_{\text{внф}}(E_F)$ стає негативним.

Таблиця. 1. Пошарові магнітні моменти m та пошарові магнітні моменти на рівні Фермі $m(E_F)$

Шар	m, μ_B			$m(E_F), \mu_B$		
	Fe	Ni	Cr	Fe	Ni	Cr
I	3,01	0,66	2,80	-0,206	-0,727	0,301
II	2,36	0,58	-1,36	0,033	-0,475	0,015
III	2,42	0,59	0,96	0,144	-0,485	0,110
IV	2,32	0,56	-0,95	0,119	-0,619	-0,030



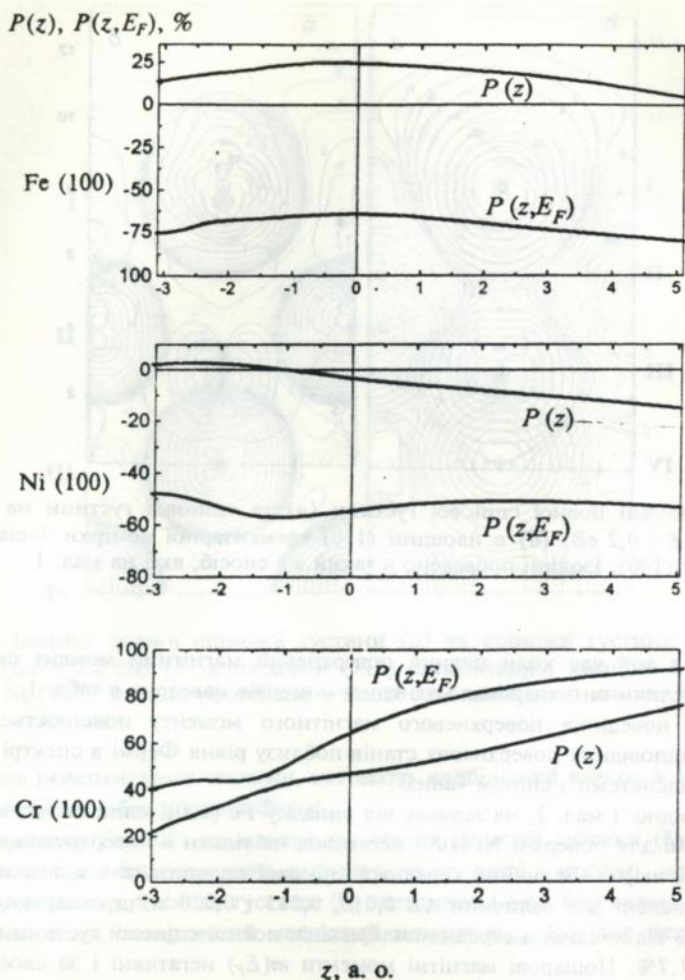
Мал. 3. Ізолінії повної спінової густини (а) та спінової густини на рівні Фермі ($\Delta E = 0,2$ eВ) (б) в площині (110) елементарної комірки 7-шарової плівки Cr (100). Ізолінії проведено в такий же спосіб, як і на мал. 1

$-0,21 \mu_B$, в той час коли повний поверхневий магнітний момент складає $3,01 \mu_B$. Величини пошарових магнітних моментів наведено в табл. 1.

Така поведінка поверхневого магнітного моменту пояснюється наявністю відповідних поверхневих станів поблизу рівня Фермі в спектрі електронної підсистеми з спіном «вниз».

Як видно з мал. 2, на відміну від випадку Fe (100), спінова густина на рівні Фермі для поверхні Ni (100) негативна не тільки в поверхневому, а і в усіх інших шарах. Величини середньої спінової поляризації в поверхневому шарі, обчислені для величини ΔE 0,010, 0,015 і 0,020 мРід складають -15 , -20 і -23% відповідно, а середня поляризація повної спінової густини не перевищує $1,7\%$. Пошарові магнітні моменти $m(E_F)$ негативні і за своєю величиною близькі до повних магнітних моментів. Відносно високі значення магнітних моментів $m(E_F)$ пояснюються наявністю яскраво виражених піків поблизу рівня Фермі в локальних густинах станів.

Серед 3d-перехідних металів, в яких спостерігається магнітний порядок, Cr становить особливий інтерес, внаслідок того, що поверхня Cr (100) феромагнітна, в той час як спостерігається антиферомагнітний зв'язок внутрішніх шарів (мал. 3, а). Пошарові магнітні моменти наведено в табл. 1. Висока величина поверхневого магнітного моменту ($2,79 \mu_B$) відповідає значному обмінному розщепленню в поверхневому шарі, $1,5$ eВ.



Мал. 4. Повна та спінова поляризації на рівні Фермі

Спінову густину на рівні Фермі для поверхні Cr (100) наведено на мал. 3,б. В той час коли для повної спінової густини величина середньої спінової поляризації в поверхневому шарі складає ~25%, для спінової густини на рівні Фермі вона дорівнює 3,1, 5,0 і 6,5%, коли енергетичний інтервал ΔE становить відповідно 0,010, 0,015 і 0,020 мРід.

В розділі 4.2 розглянуто електронну структуру та магнітні властивості поверхонь сплавів стехіометричного складу FeAl, CoAl і NiAl, які в об'ємі

мають структуру *B2*. У зв'язку з тим, що зниження розмірності системи потенціально може приводити до появи магнітних властивостей, доцільно простежити, яким чином будуть змінюватись магнітні властивості металів групи заліза на поверхні сплавів, в об'ємі яких відсутнє магнітне упорядкування.

Одержано розподіли заряду та спіну в елементарній комірці, локальні густини станів для обох спінових підсистем.

Показано, що поверхні сплавів FeAl та CoAl феромагнітно впорядковані, пошарові магнітні моменти наведено в табл. 2.

Таблиця 2. Пошарові магнітні моменти m семишарових плівок (100) FeAl та CoAl

Сплав	m, μ_B			
	Шар №			
	I (Fe, Co)	II (Al)	III (Fe, Co)	IV (Al)
FeAl	2,57	0,061	0,67	-0,028
CoAl	1,12	0,044	0,12	-0,015

Спін-поляризований розрахунок електронної структури поверхні (100) сплаву NiAl показав, що магнітне упорядкування відсутнє у всіх шарах.

Обговорюється вплив ефектів гібридизації *d*-зон перехідного металу з *p*-зонами Al на величини пошарових магнітних моментів.

ОСНОВНІ ВИСНОВКИ

1. Розроблено реалізацію самоузгодженого спін-поляризованого скалярно-релятивістського лінеаризованого методу приєднаних плоских хвиль для розрахунків електронної структури поверхонь металів без будь-яких модельних обмежень на форму кристалічного потенціалу. Розроблено алгоритми і створено комплекс програм, що реалізують цей метод.

2. Розраховано електронну структуру та деякі магнітні властивості поверхонь (100) заліза, нікеля і хрому. Для обох спінових підсистем отримано спектри поверхневих станів, локальні густини станів, розраховано роботу виходу, розподілення зарядів та спінів в елементарній комірці, локальні (пошарові) магнітні моменти, спінова поляризація.

3. Вперше досліджено розподіл зарядової та спінової густин електронів з енергією, близькою до енергії Фермі на поверхнях (100) заліза, нікеля та хрому. Показано, що спінова густина електронів, які знаходяться в енергетичному вікні поблизу рівня Фермі, істотно відрізняється від повної спінової густини всіх електронів. На поверхнях (100) Fe та Ni повний поверхневий магнітний момент m_{surf} і магнітний момент електронів на рівні Фермі

$m_{\text{surf}}(E_F)$ відрізняються за знаком, а на поверхні Cr (100) спостерігається значне зменшення магнітного моменту електронів на рівні Фермі у порівнянні з магнітним моментом всіх електронів. Досліджено закономірності зміни спінової поляризації та магнітних моментів на рівні Фермі в залежності від розмірів енергетичного вікна.

4. Вперше розраховано електронну структуру і магнітні властивості поверхонь (100) сплавів FeAl, CoAl і NiAl із структурою ґратки типу CsCl, поверхневий шар яких утворений атомами феромагнітного металу. Знайдено, що магнітний момент поверхневого шару дещо нижчий порівняно з магнітним моментом на поверхні чистого феромагнетика. Поверхня (100) сплаву NiAl є парамагнітною (не магнітоупорядкованою).

Основний зміст дисертації викладено в таких роботах:

1. *Остроухов А. А., Томиленко В. Н., Флока В. М., Черепин В. Т.* Самосогласованный спин-поляризованный расчет Fe (100). Зависимость поверхностного магнитного момента от особенностей электронного строения вблизи уровня Ферми и двумерная поверхность Ферми // *Металлофизика*. — 1993. — 15, № 11. — С. 67–75.
2. *Cherepin V. T., Floka V. M., Man'kovsky S. V., Ostroukhov A. A., Tomilenko V. N.* Calculated 2D Fermi Surfaces and Electronic Structure of (100) and (110) W // *J. Electron Spectrosc. and Related Phenomena*. — 1994. — 68. — P. 105–109.
3. *Остроухов А. А., Флока В. М., Черепин В. Т.* Поверхность Ni (100). Зависимость поверхностного магнитного момента от особенностей электронного строения вблизи уровня Ферми и двумерная поверхность Ферми // *Металлофизика и новейшие технологии*. — 1994. — 16, № 2. — С. 5–12.
4. *Floka V. M., Ostroukhov V. T., Cherepin V. T.* Ferromagnetism of Cr (100): surface: surface magnetic moments and two-dimensional Fermi Surface // *Металлофизика и новейшие технологии*. — 1994. — 16, № 8. — С. 22–27.

В. М. Флока. Спін-поляризація і магнітні властивості поверхонь Fe, Ni і Cr і сплавів 3d феромагнетиків з Al.

Рукопис дисертації на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.18 — физика поверхности, Институт металлофизики НАН Украины, 1995 г.

Защищаются 4 научные работы, которые содержат данные превопринципных расчетов электронной структуры и магнитных свойств поверхностей 3d-переходных металлов и их сплавов с Al спин-поляризованным скалярно-

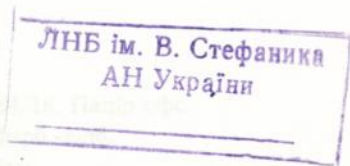
релятивістським методом FLAPW. Отримані магнітні властивості поверхностей на рівні Фермі, які дозволяють адекватно інтерпретувати експериментальні дані.

V. M. Floka. Spin polarization and magnetic properties of surfaces of Fe, Ni and Cr and alloys of 3d-ferromagnetics with Al.

Dissertation is presented as a manuscript applying for the academic degree of the candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.18 — surface physics, Institute for Metal Physics NAS Ukraine. Kiev, 1995.

4 scientific works are defended that contain data of first-principles calculations of the electronic structure and magnetic properties of surfaces of 3d-transition metals and their alloys with Al by the spin-polarized scalar-relativistic FLAPW method. The magnetic properties on the Fermi level are studied. The conclusions on adequate comparison of experimental and calculated magnetic properties are made.

Ключові слова: електронна структура, спінова поляризація, поверхня, поверхневий магнетизм, залізо, нікель, хром.



Назва на аркуші

Друк: оф: Київ, друк: л.

Обл.-мат. л.

Тираж

Інститут металознавства НАН України

252680 Київ-141, Бульв. Акад. Вернадського, 36

РІОН Інституту металознавства НАН України

252680 Київ-141, Бульв. Акад. Вернадського, 36

092 988A

Підп. до друку . Формат 60×84/16. Папір офс.
Друк. офс. Умов. друк. л. . Умов. фарб.-відб.
Обл.-вид. л. . Тираж прим. Зам.

Інститут металофізики НАН України
252680 Київ-142, бульв. Акад. Вернадського, 36

РВВ Інституту металофізики НАН України
252680 Київ-142, бульв. Акад. Вернадського, 36

1118564

AB 32.520

AB 32.520

Plan no. 12345
D. 12345-67890
12345-67890
12345-67890

12345-67890
12345-67890

12345-67890
12345-67890