

2. Efeitos específicos da superfície (anisotropia de Nèel)

Segundo: **P. Bruno and J.-P. Renard**

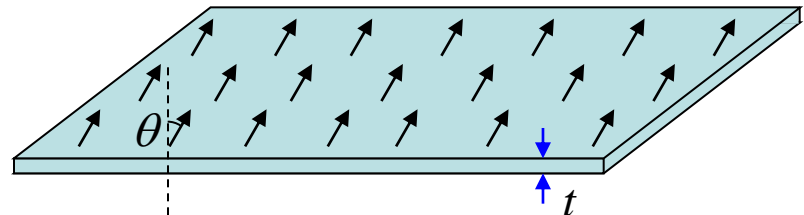
Institut d'Electronique Fondamentale, CNRS, F-91405 Orsay Cedex,
France

Actualmente os filmes ferromagnéticos ultrafinos são de grande interesse porque as suas propriedades magnéticas diferem das de ferromagnets “bulk”. Por exemplo, podem mostrar os momentos magnéticos amplificados ou reduzidos e a temperatura de Curie que depende da espessura. Uma das características novas mais atractivas, tanto para física fundamental como para aplicações potenciais, é a *anisotropia magnética* induzida pela quebra de simetria nas superfícies do filme.

Num filme ferromagnético ultrafino, a energia de anisotropia (por volume unitário) normalmente escreve-se como

$$E_a = K^{eff} \sin^2 \theta$$

$$K^{eff} = K_v^{eff} + \frac{2K_s^{eff}}{t}$$



onde K_v^{eff} é a constante da anisotropia volúmica efectiva (contendo o termo desmagnetizante ao lado dos termos magneto-cristalinos) e K_s^{eff} é a constante da anisotropia efectiva superficial ou de interface.

Anisotropia magnetocristalina e desbloqueio do momento orbital devem ao acoplamento spin-orbital, dado por:

$$H^{s-o} = \xi \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

Primeiro calculamos a estrutura electrónica no estado de base (spin-polarizado) dentro do esquema de acoplamento forte (tight-binding) na aproximação de Hartree-Fock. Depois introduz-se o acoplamento de spin-órbita como uma perturbação.

$$\delta E = \sum_{exc} \frac{|\langle gr | H^{s-o} | exc \rangle|^2}{E_{gr} - E_{exc}} \quad \text{correção à energia}$$

$$\delta |gr\rangle = \sum_{exc} \frac{|exc\rangle \langle gr | H^{s-o} | exc \rangle}{E_{gr} - E_{exc}} \quad \text{correção ao estado}$$

O valor médio da componente de L paralela ao eixo da quantização de spin é:

$$\langle L_\zeta \rangle = \sum_{exc} \frac{\langle gr | L_\zeta | exc \rangle \langle gr | H^{s-o} | exc \rangle}{E_{gr} - E_{exc}} + c.c.$$

Os elementos de matriz $\langle \text{exc} | H_{so} | \text{gr} \rangle$ dependem da orientação do eixo de quantificação de spin, i.e. da direcção de magnetização: esta é a origem física da anisotropia magneto-cristalina.

$$\delta E = K_0 + \underbrace{K_2}_{\text{anisotropia}} \sin^2 \theta$$

$$\langle L_\zeta \rangle = L_0 + \underbrace{L_2}_{\text{anisotropia}} \sin^2 \theta$$

com a relação $K_2 \sim \frac{\xi}{4} L_2$

Respectivamente, com a energia de anisotropia K_2 de 10^{-3} eV/atom (como a observada nos filmes ultrafinos) e a constante $\xi = 0.05$ eV/ μ_B , se pode obter a anisotropia L_2 do momento magnético de ordem de $0.1 \mu_B$ /atom.

Esta anisotropia de momento magnético é muito maior que nos materiais “bulk” e, ao conhecer dos autores, nunca foi prevista antes. Contudo, nos materiais “bulk”, como para Ni ou Fe temos $\Delta E \sim 10^{-6}$ a 10^{-5} eV/atom, $\Delta M \sim -10^{-4} \mu_B$ /atom assim que também a razão $\Delta E/\Delta M \approx \xi$.

O caso de limite: monocamada metálica

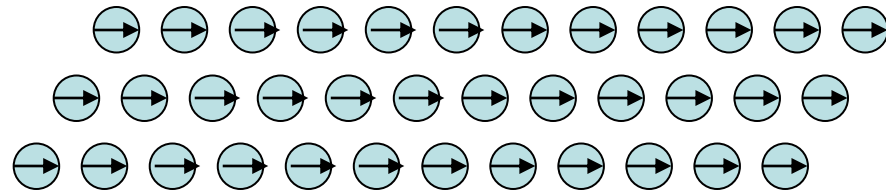


Tabela. Energia de anisotropia magnetocristalina K_2 (em meV/at) e os momentos magnéticos orbitais por átomo, paralelo M_L^{\parallel} e perpendicular M_L^{\perp} (em μ_B), calculados para as monocamadas de metal $3d$ na aproximação perturbativa de acoplamento forte em função de número N_v dos electrões de valência.

N_v	fcc(001)			fcc(111)		
	K_2	M_L^{\parallel}	M_L^{\perp}	K_2	M_L^{\parallel}	M_L^{\perp}
8 (Fe)	0.00	0.16	0.13	-0.61	0.19	0.10
8.5	-1.38	0.26	0.12	-1.12	0.22	0.09
9 (Co)	-1.98	0.33	0.13	-2.47	0.32	0.08
9.5	-2.11	0.30	0.09	-1.13	0.18	0.08
10 (Ni)	-0.86	0.15	0.07	-0.43	0.09	0.05

O modelo de monocamada perfeitamente plana e não apoiada é longe de qualquer sistema real, com a aproximação (tight-binding) bastante cruda, portanto estes resultados não se comparam quantitativamente ao experimento.

No entanto eles,

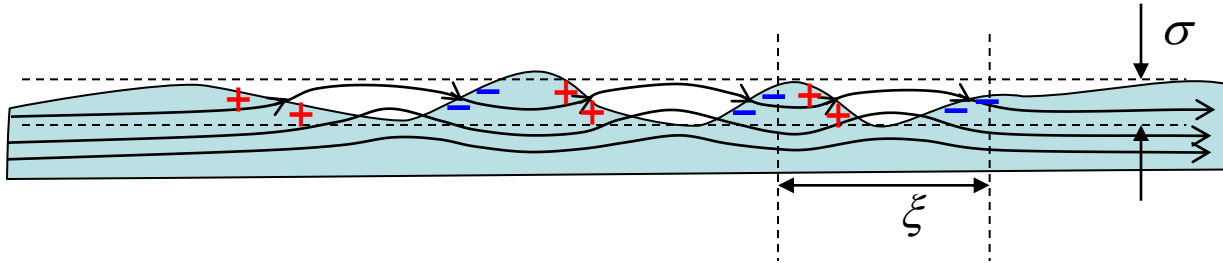
(i) predizem as energias de anisotropia de ordem de 1 a 2 meV/at (em acordo com os cálculos mais sofisticados); contudo os valores experimentais mais aproximam ao 0.2 to 1 meV/at;

(ii) mostram claramente que a energia de anisotropia depende fortemente de preenchimento da banda de valência (devido ao facto de que a anisotropia se determina principalmente pelos estados com energia próxima ao nível de Fermi, e portanto é muito sensível à sua posição)

(iii) apresentam a esperada anisotropia de momento magnético.

Efeito da rugosidade da interface

Definimos a rugosidade pelos dois parâmetros estatísticos, a amplitude σ da rugosidade, sendo o desvio médio quadrático da superfície idealmente plana, e o comprimento de correlação ξ , i.e. o tamanho médio lateral das áreas planas da superfície.



Para os nossos filmes de Co, σ and ξ estimam-se como 2 e 100 Å respectivamente.

Para o filme perfeitamente plano, com a magnetização perpendicular ao filme, as "cargas magnéticas" aparecem nas faces laterais do filme, resultando em campo desmagnetizante $G_d = -4\pi M$. Em presença da rugosidade, com a magnetização no plano, umas "cargas magnéticas" aparecem nas terminações das terraças e nos craters, produzindo um campo demagnetizante *no plano*. A energia correspondente por unidade de volume é proporcional à razão de rugosidade-à-espessura, i.e., é uma anisotropia efectiva de superfície ou da origem dipolar. É também uma função da razão σ/ξ .

Logo, aparte da anisotropia dipolar comum, obtemos um termo adicional:

$$\Delta E_d = 4\pi SM^2 \frac{3\sigma}{4} \left[1 - f\left(\frac{2\pi\sigma}{\xi}\right) \right] \sin^2 \theta$$

onde

$$f(x) = \frac{4^3}{\pi^4 x} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \exp\left[-x\sqrt{(2n+1)^2 + (2m+1)^2}\right]}{(2n+1)^2 (2m+1)^2 \sqrt{(2n+1)^2 + (2m+1)^2}}.$$

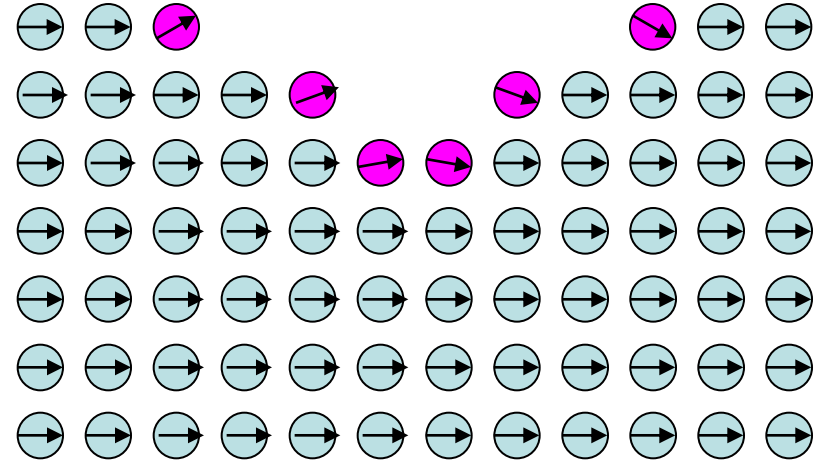
Esta anisotropia dipolar de superfície é *sempre positiva*. Para os nossos filmes de Co, a sua contribuição é menos de 0.05 erg/cm², o que é muito menor do valor medido. Mas para rugosidades fortes esta anisotropia dipolar de superfície pode dar a contribuição dominante.

Para comparar com:

No modelo de Néel, a anisotropia magneto-cristalina superficial surge de entorno asimétrico dos átomos da superfície comparando com os de bulk. Quando faltam uns vizinhos no plano (nas terminações das terraças), esta assimetria se reduz num sentido. A rugosidade modifica a anisotropia magneto-cristalina superficial pelo:

$$\frac{\Delta K_s}{K_s} = -\frac{2\sigma}{\xi}.$$

Para as nossas amostras de Co, esta redução não deve ser menor de 5%, mas de acordo com este argumento a anisotropia magneto-cristalina superficial é afectada fortemente pela grande rugosidade.



Anisotropia Induzida por Desajustes da Rede

O modelo fenomenológico para tensões da interface. Em presença dum desajuste $\eta = (a_d - a_s)/a_s$ entre os parâmetros das redes de substrato e a depositada (em seguir considerado $|\eta| \ll 1$), este desajuste se pode relaxar tanto pela deformação homogênea do filme ou pela introdução das dislocações interfaciais.

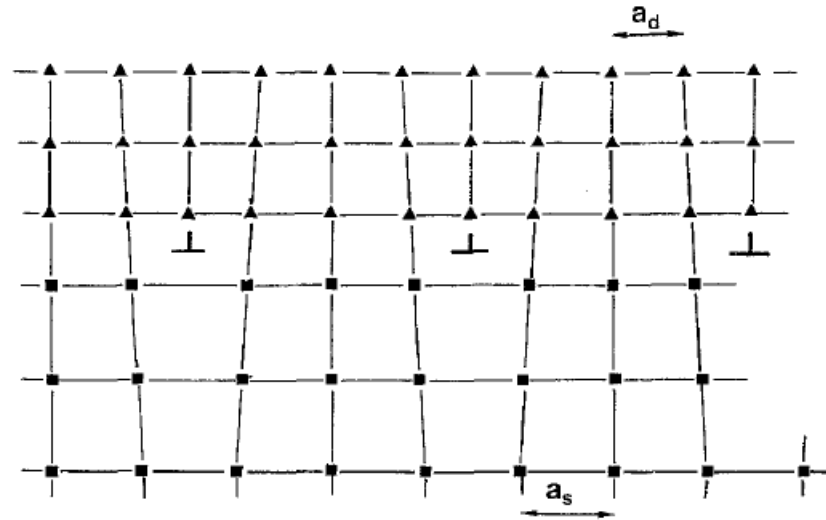


Fig. 1. Accommodation of lattice mismatch by interfacial dislocations (squares: substrate atoms; triangles: adsorbate atoms)

O custo energético da deformação homogênea é proporcional ao volume de filme, quando a energia das dislocações interfaciais é proporcional à sua área, portanto há de esperar geralmente:

o pseudomorfismo para espessuras pequenas e as dislocações interfaciais para as grandes.

A energia de deformação é $E_s = VC\varepsilon^2/2$, onde C é uma constante elástica, V o volume e ε a deformação.

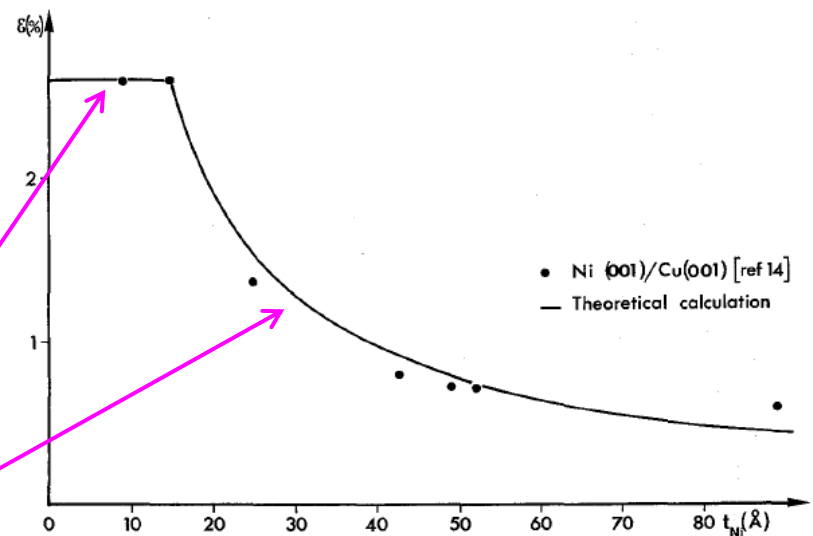
A energia de dislocação é $E_d = S\alpha m|1/a - 1/a_d|$, onde S é a área, m a energia de dislocação por unidade de seu comprimento, o factor numérico $\alpha \sim 1$ depende da geometria da dislocação e $|1/a - 1/a_s|$, com $a = a_d(1 + \varepsilon)$, é a densidade das dislocações por unidade de área (desprezando a interacção entre as dislocações).

O estado de equilíbrio corresponde ao mínimo da energia total $E_s + E_d$ com respeito ao ε .

Debaixo de espessura crítica: $t_c \sim \frac{\alpha\mu}{a_d C |\eta|}$

temos o pseudomorfismo (i.e. $\varepsilon = -\eta$).

Acima de t_c surgem as dislocações de desajuste, baixando a deformação até $\sim -\eta t_c/t$,



Se $|\eta|$ é grande a mais, t_c pode ser inferior de 1 camada atômica e o pseudomorfismo nunca ocorre.

A energia magnetoelástica induzida pelas deformações,

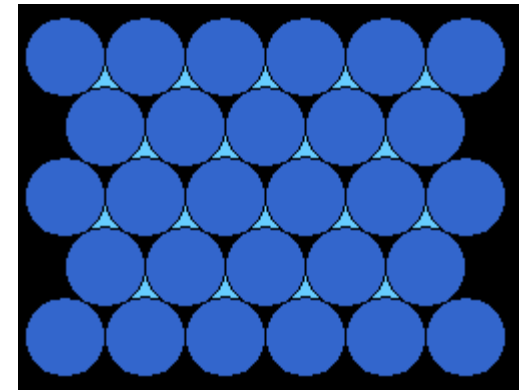
$$E_{ME} = VB\varepsilon \sin^2 \theta$$

onde B é a constante magnetoelástica. As deformações devidas às dislocações não contribuem, porque o seu valor médio é nulo. Assim temos para $t > t_c$,

$$E_{ME} = SK_s \sin^2 \theta$$

onde $K_s = -B\eta t_c$. Para hcp(0001) Co temos

$$B = \frac{2c_{13}^2 - (c_{11} + c_{12})c_{33}}{c_{33}} (\lambda_A + \lambda_B)$$



plano (0001)

onde os C 's e λ 's são, respectivamente, os comuns coeficientes elástico e magnetostrictivo. Para Co ou Au, temos $\eta = -14\%$ e os experimentos de RHEED sugerem que $t_c = 2 \text{ \AA}$. Daqui a anisotropia magnetoelástica superficial de $K_s = 1.8 \text{ erg/cm}^2$ para interface de Au/Co torna-se maior de que no experimento.

Assim, embora a situação considerada (o filme de uma superfície livre) não é exactamente igual aos experimentos (estrutura de sandwich) se acredita que, aparte da possível

anisotropia *magnetocristalina* superficial,

os filmes também são afectados pela contribuição importante da

anisotropia *magnetoelástica* superficial.

A diferença principal entre o último mecanismo e a anisotropia magnetocristalina superficial está em que a anisotropia fica distribuída segundo todo o filme, em vez de ser concentrada nas suas interfaces. Isso vai levar às diferenças no espectro das ondas de spin e portanto na distribuição da magnetização para temperaturas finitas.