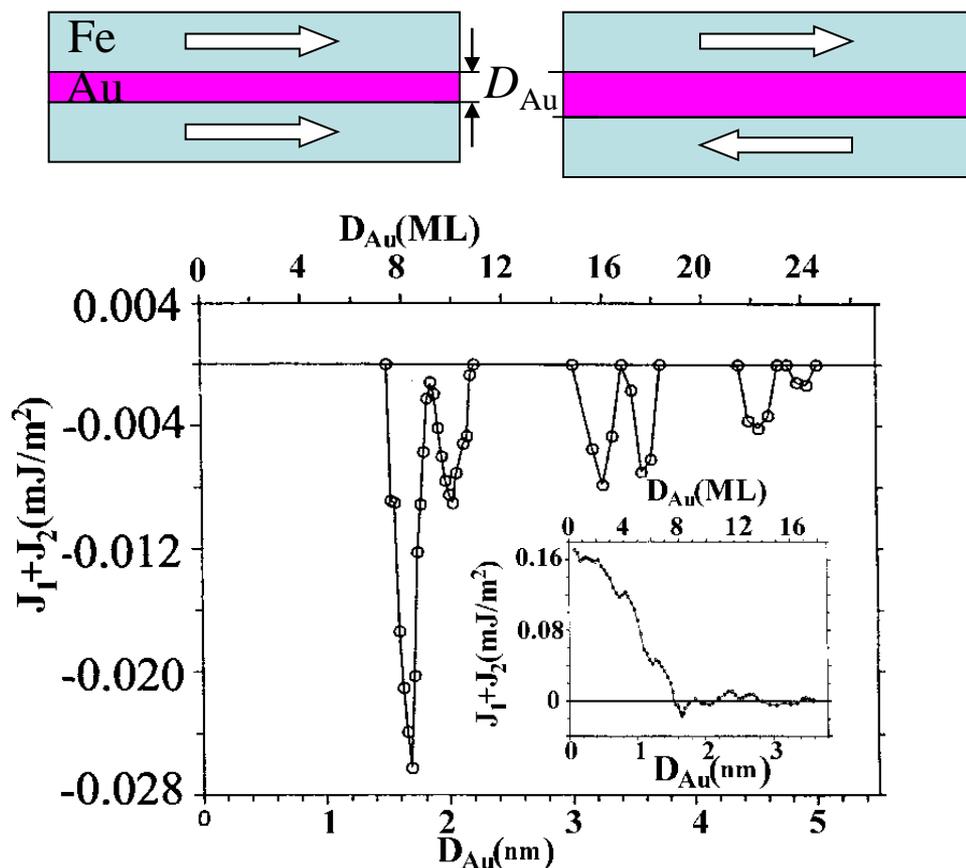


### 3. Teoria de acoplamento magnético entre camadas

P. Bruno

Institut d'Électronique Fondamentale, Université Paris-Sud,  
F-91405 Orsay, France

Depois da primeira observação por Grünberg *et al.* de acoplamento AFM entre os filmes de Fe separados pelo espaçador de Cr, o acoplamento de troca entre as camadas FM separadas pelo espaçador NM foi o objeto dos estudos intensos. A descoberta decisiva foi a de Parkin *et al.* do acoplamento oscilatório entre as camadas em Fe/Cr/Fe e Co/Ru/Co sistemas, *em função da espessura do espaçador*. A mais, Parkin mostrou que este fenómeno espectacular ocorre com quase qualquer metal de transição escolhido para espaçador.



Os dados de J. Unguris *et al.*, Center of  
Nanoscience and Technology, NIST

Os variados modelos foram inventados para obter a melhor visão do mecanismo de acoplamento de troca entre as camadas.

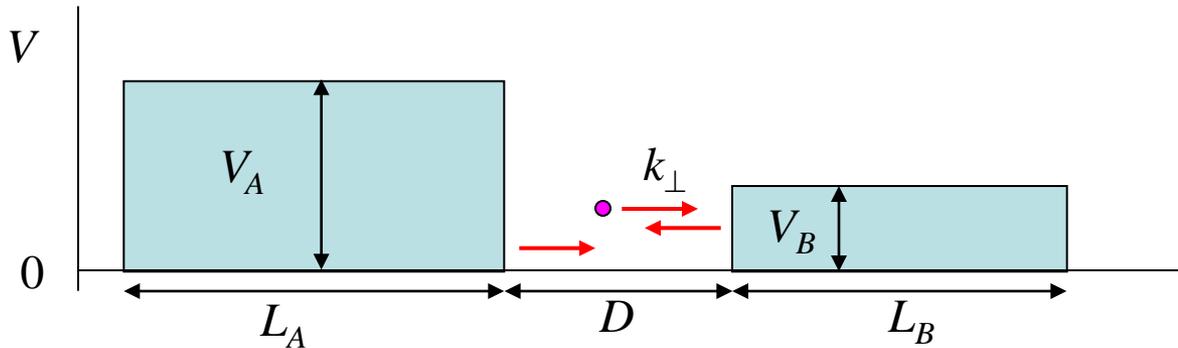
(i) o de electrões livres com muitas versões propostas,

(ii) o confinamento das lacunas o que é essencialmente o modelo de acoplamento forte com os degraus de potencial dependentes de spin, e

(iii) o modelo de Anderson (ou de mistura  $s-d$ ).

(iv) o de **Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida** (RKKY) onde as camadas magnéticas são descritas como massivos dos spins localizados que interagem com electrões de condutância através de potencial de troca de contacto,

## A. Modelo unidimensional



Consideramos um electrão com vector de onda  $k_{\perp} > 0$  propagando-se no espaçador para direita; encontrando este electrão uma perturbação  $B$ , será reflectido com uma amplitude (complexa)  $r_B = |r_B|e^{i\phi_B}$ . A onda reflectida, de vector  $-k_{\perp}$ , esta no seu turno reflectida em  $A$  com a amplitude  $t_A = |t_A|e^{i\phi_A}$ , etc.

As interferências multiplas que ocorrem no espaçador induzem uma variação da densidade espacial. O desfaseamento da função de onda após uma volta completa no espaçador é

$$\Delta\phi = 2k_{\perp}D + \phi_A + \phi_B .$$

A densidade de estados se aumenta quando as interferências são constructivas,  $\Delta\phi = 2n\pi$  ;

e diminui quando são destrutivas,

$$\Delta\phi = (2n + 1)\pi$$

Portanto, na primeira aproximação, variação da densidade de estados devida às interferências,  $\Delta n(\varepsilon)$ , deve seguir  $\cos(2k_{\perp}D + \varphi_A + \varphi_B)$ ; ainda mais, deve ser proporcional à força das reflexões em  $A$  e  $B$ , i.e., ao  $|r_A r_B|$ ; finalmente é proporcional à largura  $D$  de espaçador e à densidade de estados por unidade de comprimento e de energia  $(2/\pi)dk_{\perp}/d\varepsilon$ . Aqui há também o factor de 2 da degenerescência de spin. Assim encontramos

$$\begin{aligned} \Delta n(\varepsilon) &\approx \frac{4D}{\pi} \frac{dk_{\perp}}{d\varepsilon} |r_A r_B| \cos(2k_{\perp}D + \phi_A + \phi_B) \\ &\approx \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left( 2iD \frac{dk_{\perp}}{d\varepsilon} r_A r_B e^{2ik_{\perp}D} \right) . \end{aligned}$$

A densidade de estados integrada (o número dos estados com energias abaixo de  $\varepsilon$ ) :

$$N(\varepsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\varepsilon} n(\varepsilon') d\varepsilon'$$

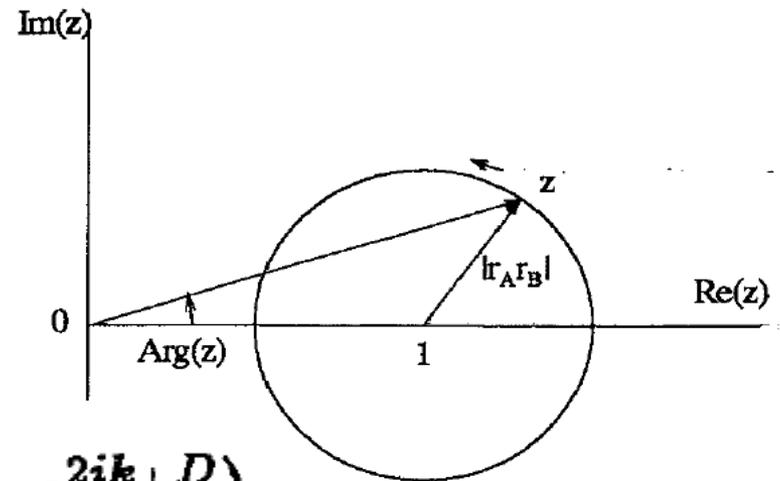
se varia por

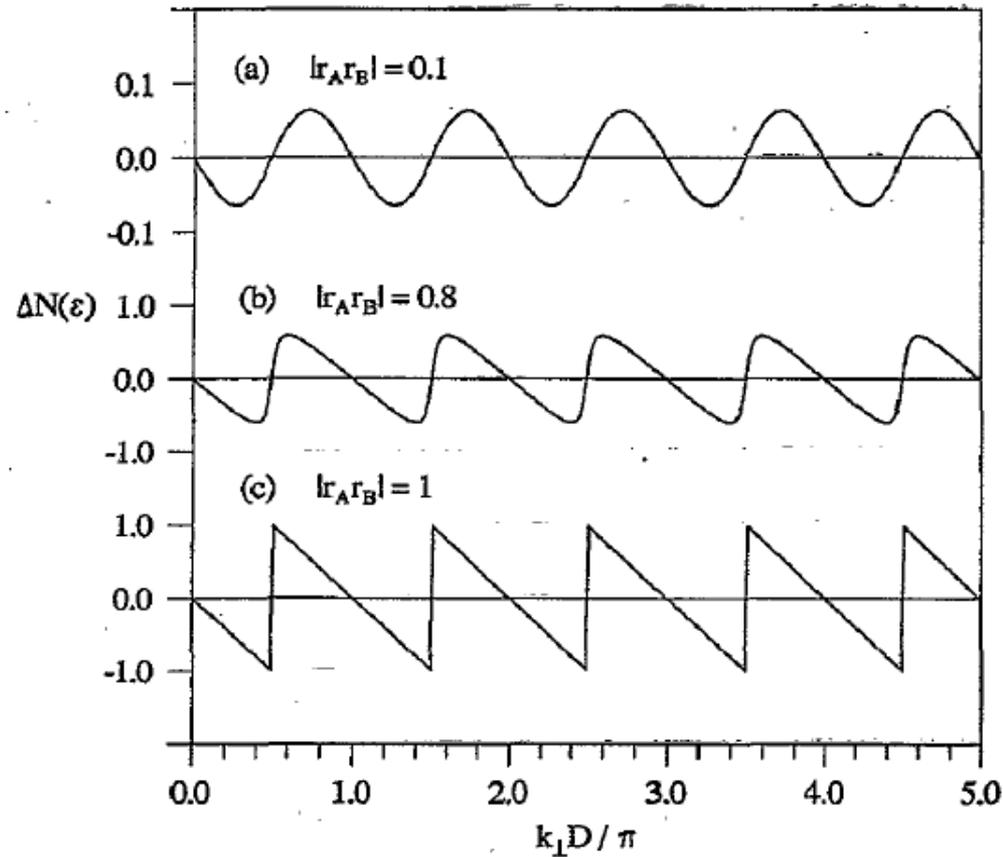
$$\Delta N(\varepsilon) \approx \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} (r_A r_B e^{2ik_{\perp}D})$$

Esta derivação da mudança da densidade de estados integrada não é rigorosa, mas permite ter um entendimento físico claro dos efeitos da of the quantum interferência quântica no espaçador. Ela vale quando os coeficientes de reflexão são pequenos, assim que os termos das ordens superiores podem ser desprezados. Doutro lado, se  $|r_A| = |r_B| = 1$ , as interferências levam aos estados ligados e ao vector de onda  $k_{\perp}$  quantizado; os estados ligados ocorrem quando as interferências são *constructivas*. Com aumento de  $D$ , os estados ligados se movem para as energias mais baixas e a densidade de estados integrada dá um salto cada vés que o estado ligado está passar a energia  $\varepsilon$ .

O produto  $|r_A r_B|$  está avaliar a força de confinamento dos electrões no espaçador. A expressão exacta para mudança da densidade de estados integrada devida à interferência quântica é

$$\Delta N(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \ln \left( 1 - \underbrace{r_A r_B e^{2ik_{\perp} D}}_z \right)$$

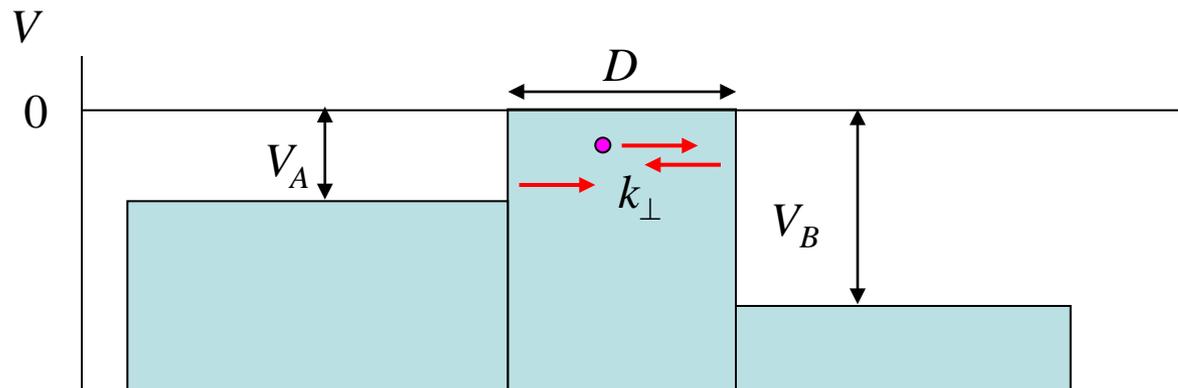




Varição da troca da densidade integrada de estados  $\Delta N(\varepsilon)$  devida à interferência quântica em função da espessura  $D$  do espacador, para diferentes valores da força de acoplamento; (a)  $|r_A r_B| = 0.1$ , (b)  $|r_A r_B| = 0.8$ , (c)  $|r_A r_B| = 1$  (confinamento total).

Até o momento, foram implicitamente considerados só os estados de energia positiva. Estados de energia negativa (i.e., de vector de onda imaginário) estão proibidos em ausência das perturbações  $A$  e  $B$ , porque as suas amplitudes divergem e portanto não podem ser normalizadas. Contudo, isso não vale em presença das perturbações se  $V_A$  ou  $V_B$  (ou ambas) são negativas: os estados da energia negativa, i.e., os que variam exponencialmente no espaçador, podem ser ligados aos estados permitidos em  $A$  ou  $B$ .

Para tratar estes estados de modo consistente, extendemos o conceito dos coeficientes de reflexão para os estados com vectores de onda imaginários. Esta generalização faz a conta completa dos efeitos dos estados da energia negativa (estados evanescentes).



## *Energia associada com a interferência quântica*

Agora estimamos a mudança de energia do sistema, em  $T = 0$ , devida às interferências quânticas no espaçador. Para assegurar a conservação das partículas, trabalhamos em ensemble grande canônico e usamos o potencial grande, para  $T = 0$ ,

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} (\varepsilon - \varepsilon_F) n(\varepsilon) d\varepsilon,$$

integrando por partes, isso resulta em,

$$\Phi = - \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} N(\varepsilon) d\varepsilon.$$

A mudança de energia devida às interferências quânticas

$$\Delta E = - \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \Delta N(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \ln(1 - r_A r_B e^{2ik_{\perp} D}) d\varepsilon.$$

Para o confinamento fraco,  
converte-se para

$$\Delta E = - \frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} r_A r_B e^{2ik_{\perp} D} d\varepsilon.$$

Vê-se que os estados para os quais as interferências são constructivas (destrutivas) contribuem à força repulsiva (atractiva) entre  $A$  e  $B$ . Em seguir,  $\Delta E$  vai chamar-se a *energia de acoplamento*.

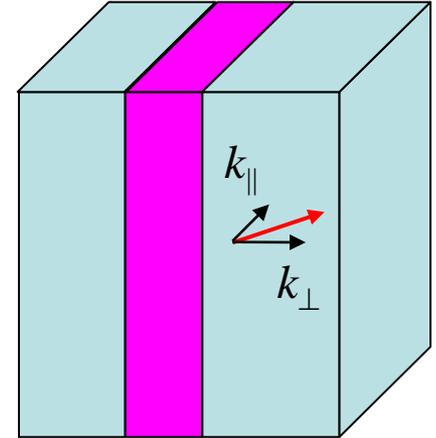
## Sistema de camadas tri-dimensionais

A generalização da discussão anterior para o caso mais realista dum sistema tri-dimensional de camadas é imediata. Resulta de facto de que, sendo o potencial depender só em coordenada na direcção normal às camadas, a componente planar  $k_{\parallel}$  do vector de onda é um número quântico bom. Assim, para cada  $k_{\parallel}$ , temos um problema efectivo uni-dimensional como o discutido acima; o efeito das interferências quânticas no espaçador obteve-se sumando em  $k_{\parallel}$ . A mudança da densidade de estados integrada por unidade de área é

$$\Delta N(\varepsilon) = -\frac{1}{2\pi^3} \operatorname{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \ln (1 - r_A r_B e^{2i k_{\perp} D})$$

e a energia de acoplamento por unidade de área é

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^3} \operatorname{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \ln (1 - r_A r_B e^{2i k_{\perp} D}) d\varepsilon$$



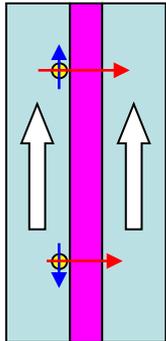
Claro que os coeficientes de reflexão e a componente normal  $k_{\perp}$  do vector de onda são agora as funções, não só da energia, mas também de  $k_{\parallel}$ . Para o confinamento fraco, as expressões acima reduzem-se, respectivamente, às

$$\Delta N(\varepsilon) \approx \frac{1}{2\pi^3} \operatorname{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} r_A r_B e^{2ik_{\perp} D}$$

$$\Delta E \approx -\frac{1}{2\pi^3} \operatorname{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} r_A r_B e^{2ik_{\perp} D} d\varepsilon$$

## Acoplamento de troca entre camadas

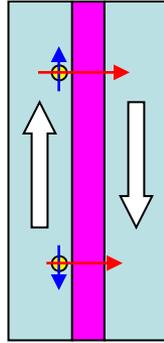
No caso de dois filmes ferromagnéticos serem separados pela camada paramagnética de espaçador, as interferências quânticas no espaçador induzem a interação de troca entre as camadas ferromagnéticas.



Em configuração FM, a energia devida às interferências, para  $T = 0$ , é

$$\Delta E_F = \frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon$$
$$\times \left[ \ln \left( 1 - r_A^{\uparrow} r_B^{\uparrow} e^{2i k_{\perp} D} \right) \right.$$
$$\left. + \ln \left( 1 - r_A^{\downarrow} r_B^{\downarrow} e^{2i k_{\perp} D} \right) \right]$$

Em configuração antiferromagnética, temos



$$\Delta E_{AF} = \frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \times \left[ \ln \left( 1 - r_A^{\uparrow} r_B^{\downarrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right) + \ln \left( 1 - r_A^{\downarrow} r_B^{\uparrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right) \right]$$

Assim que o acoplamento de troca por unidade de área, para  $T = 0$ , é

$$E_F - E_{AF} = \frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \ln \left[ \frac{\left( 1 - r_A^{\uparrow} r_B^{\uparrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right) \left( 1 - r_A^{\downarrow} r_B^{\downarrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right)}{\left( 1 - r_A^{\uparrow} r_B^{\downarrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right) \left( 1 - r_A^{\downarrow} r_B^{\uparrow} e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} \right)} \right] d\epsilon$$

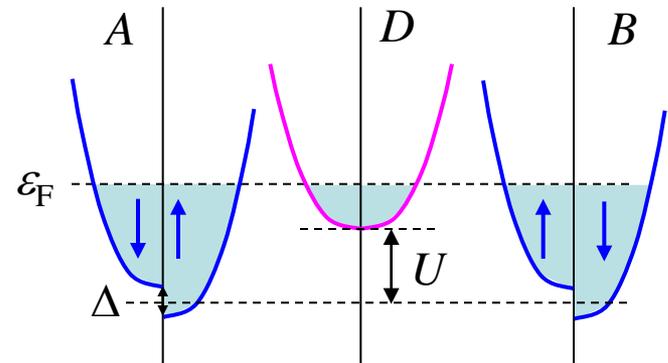
o que para confinamento fraco reduz-se para

$$E_F - E_{AF} \approx - \frac{1}{\pi^3} \text{Im} \int d^2 \mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \Delta r_A \Delta r_B e^{2i\mathbf{k}_{\perp} D} d\epsilon$$

A equação anterior expressa claramente que a variação de acoplamento vs espessura do espaçador depende só do material de espaçador (via os vectores de onda  $k_{\perp}$ ), quando a força e fase de acoplamento determinam-se pela assimetria de spin dos coeficientes de reflexão nas interfaces paramagnet-ferromagnet, os que no seu turno dependem no grau de ajuste das estruturas de banda por dois lados da interface.

## MODELO DOS ELECTRÕES LIVRES

O modelo é seguinte. O zero da energia fixa-se no fundo da banda majoritária das camadas ferromagnéticas; o potencial da banda minoritária se define pelo desdobramento de troca  $\Delta$ , quando o espaçador, de espessura  $D$ , tem o potencial igual a  $U$ . As camadas ferromagnéticas têm a espessura  $L$ , e as suas magnetizações fazem o ângulo  $\theta$  entre si.



$U > \epsilon_F$  relaciona-se ao espaçador metálico e  $U < \epsilon_F$  ao isolador.

A energia de acoplamento de troca entre camadas por unidade de área para ângulo  $\theta$  arbitrário é

$$E_{AB}(\theta) = \frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2\mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} d\varepsilon f(\varepsilon) \\ \times \ln \left[ 1 - 2(\bar{r}_A \bar{r}_B + \Delta r_A \Delta r_B \cos \theta) e^{iq_{\perp} D} \right. \\ \left. + (\bar{r}_A^2 - \Delta r_A^2) (\bar{r}_B^2 - \Delta r_B^2) e^{2iq_{\perp} D} \right],$$

onde  $i0^+$  é uma grandeza imaginária infinitesimal,  $q_{\perp} = k_{\perp}^+ - k_{\perp}^-$ ,  $f(\varepsilon)$  é a função de Fermi-Dirac,

$$e \quad \bar{r} \equiv \frac{r^{\uparrow} + r^{\downarrow}}{2} \quad \Delta r \equiv \frac{r^{\uparrow} - r^{\downarrow}}{2}$$

Ela pode ser expandida em potências de  $\cos \theta$ :  $E_{AB}(\theta) = J_0 + J_1 \cos \theta + J_2 \cos^2 \theta + \dots$

$$\text{onde} \quad J_0 = \frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2\mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} d\varepsilon f(\varepsilon) \\ \times \ln \left[ 1 - 2\bar{r}_A \bar{r}_B e^{iq_{\perp} D} \right. \\ \left. + (\bar{r}_A^2 - \Delta r_A^2) (\bar{r}_B^2 - \Delta r_B^2) e^{2iq_{\perp} D} \right]$$

$J_0$  é uma constante de acoplamento não-magnético,  $J_1$  é o acoplamento de Heisenberg, e  $J_2$  é a constante de acoplamento *biquadrático*; o termo geral da expansão para  $n \geq 1$ , está dada por

$$J_n = -\frac{1}{4\pi^3} \text{Im} \int d^2\mathbf{k}_{\parallel} \int_{-\infty+i0^+}^{\infty+i0^+} d\varepsilon f(\varepsilon) \\ \times \frac{1}{n} \left[ \frac{2\Delta r_A \Delta r_B e^{iq_{\perp} D}}{1 - 2\bar{r}_A \bar{r}_B e^{iq_{\perp} D} + (\bar{r}_A^2 - \Delta r_A^2)(\bar{r}_B^2 - \Delta r_B^2) e^{2iq_{\perp} D}} \right]^n$$

Com a convenção dos sinais usada, o sinal positivo (negativo) para  $J_1$  corresponde ao acoplamento antiferromagnético (ferromagnético) de troca entre camadas.

O cálculo dos coeficientes de reflexão:  $r_A^{\uparrow(\downarrow)} = r_B^{\uparrow(\downarrow)} \equiv r^{\uparrow(\downarrow)}$ .

Começamos do caso das camadas magnéticas semi-infinitas ( $L = +\infty$ ); encontramos

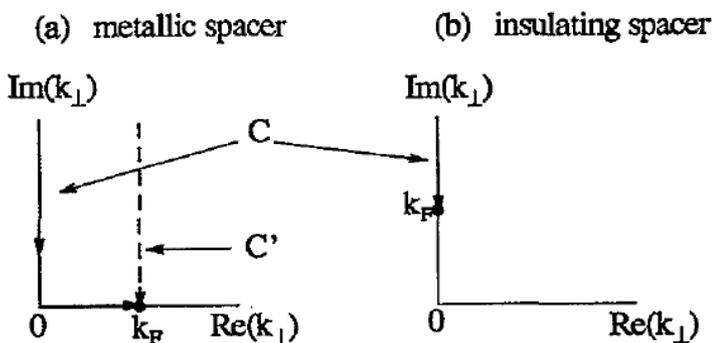
$$r^{\uparrow(\downarrow)} \equiv r_{\infty}^{\uparrow(\downarrow)} = \frac{k_{\perp} - k_{\perp}^{\uparrow(\downarrow)}}{k_{\perp} + k_{\perp}^{\uparrow(\downarrow)}}, \quad \text{com} \quad \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} = \varepsilon + i0^+ - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} - U$$

$$e \quad \frac{\hbar^2 k_{\perp}^{\uparrow 2}}{2m} = \varepsilon + i0^+ - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m},$$

$$\frac{\hbar^2 k_{\perp}^{\downarrow 2}}{2m} = \varepsilon + i0^+ - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} - \Delta,$$

O limite inferior da integração em energia é  $-\infty$ ; doutro lado, os estados proibidos, i. e., os com  $E < \min(0, U)$ , não devem contribuir ao acoplamento. Se pode verificar que este é o caso actual, porque tanto os coeficientes de reflexão e o factor no exponencial são reais para estes estados, assim que a sua contribuição para a parte imaginária desaparece.

## Espaçador metálico vs isolador



Caminhos de integração  $C$  e  $C'$  no plano de  $k_{\perp}$  complexo: (a) espaçador metálico ( $\varepsilon_F > U$ ), (b) espaçador isolador ( $\varepsilon_F < U$ ).

Mudando a variável  $\varepsilon$  para  $k_{\perp}^+$ , e integrando primeiro em  $k_{\parallel}$ , se obteve

$$J_1 = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \text{Im} \int_C dk_{\perp}^+ k_{\perp}^+ (k_F^2 - k_{\perp}^{+2}) \frac{2\Delta r_{\infty}^2 e^{2ik_{\perp}^+ D}}{1 - 2\bar{r}_{\infty}^2 e^{2ik_{\perp}^+ D} + (\bar{r}_{\infty}^2 - \Delta r_{\infty}^2)^2 e^{4ik_{\perp}^+ D}}$$

A integrande nesta equação não tem polos no quadrante superior direito do plano complexo, decrescendo exponencialmente com  $\text{Im}(k_{\perp}) \rightarrow +\infty$ ; assim se pode substituir, para o caso de espaçador metálico, o caminho de integração  $C$  por  $C'$ , como na figura acima.

Daqui segue o resultado

$$J_{\perp} = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \operatorname{Im} \left[ e^{2ik_F D} \int_0^{+\infty} (k_F + ik)(2k_F + ik) \times \frac{2\Delta r_{\infty}^2 e^{-2kD} k dk}{1 - 2\bar{r}_{\infty}^2 e^{-2(k-ik_F)D} + (\bar{r}_{\infty}^2 - \Delta r_{\infty}^2)^2 e^{-4(k-ik_F)D}} \right],$$

valido para ambos casos, onde os coeficientes de reflexão calculam-se para  $k_{\perp}^+ = k_F + i\kappa$ , com

$$\begin{aligned} k_F &= \sqrt{2m(\varepsilon_F - U)} & \text{for } \varepsilon_F > U, \\ k_F &= i\sqrt{2m(U - \varepsilon_F)} & \text{for } \varepsilon_F < U, \end{aligned}$$

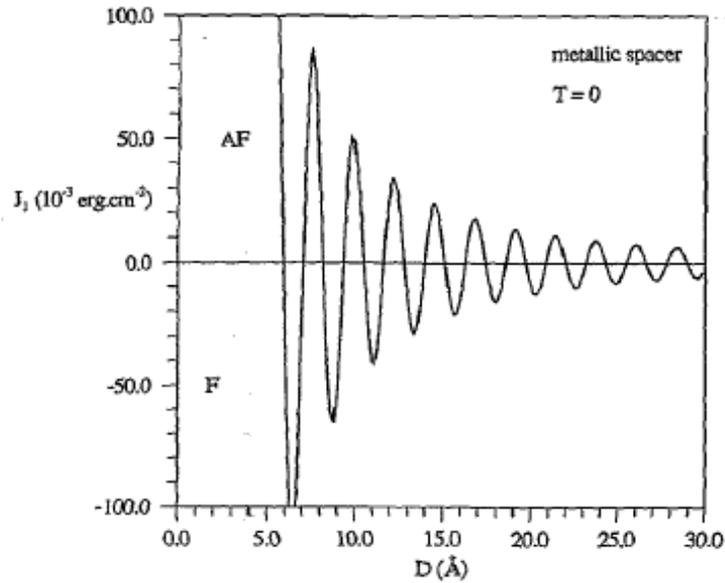
Para diferença de energias entre configurações FM e AFM, temos

$$\begin{aligned} E_F - E_{AF} &= \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} \operatorname{Im} \int_0^{+\infty} d\kappa \kappa (k_F + i\kappa) (2k_F + i\kappa) \\ &\times \operatorname{arctanh} \left[ \frac{2\Delta r_A \Delta r_B e^{2ik_F D} e^{-2\kappa D}}{1 - 2\bar{r}_{\infty}^2 e^{-2\kappa D} e^{2ik_F D} + (\bar{r}_{\infty}^2 - \Delta r_{\infty}^2)^2 e^{-4\kappa D} e^{4ik_F D}} \right] \end{aligned}$$

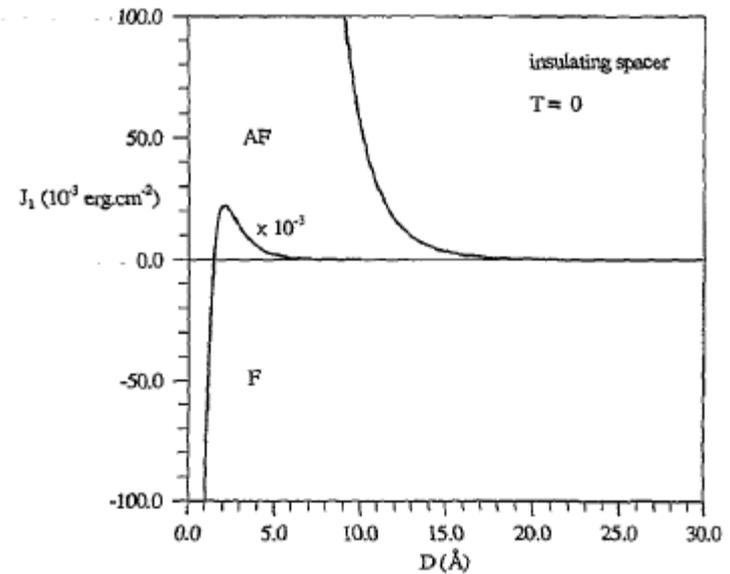
No limite da espessura grande do espaçador, detendo só a contribuição dominante, isso fica reduzido ao

$$J_1 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{4\pi^2 m D^2} \text{Im} (\Delta r_\infty^2 e^{2ik_F D})$$

onde os coeficientes de reflexão são calculados para  $k_\perp = k_F$ . No caso do espaçador isolador, o sinal de acoplamento para espessuras grandes do espaçador está determinado pelo argumento de  $\Delta r_\infty^2$ ; o acoplamento é antiferromagnético (ferromagnético) se  $|k_F|^2 < k_F^\uparrow k_F^\downarrow$  ( $|k_F|^2 > k_F^\uparrow k_F^\downarrow$ ), onde  $k_F^\uparrow$  ( $k_F^\downarrow$ ) é o vector de onda Fermi para electrões com spin majoritário (minoritário) no ferromagnet. Para espessuras menores do espaçador, o acoplamento pode mudar o sinal, devido às contribuições dos estados bém para baixo de  $\varepsilon_F$ .



Acoplamento de troca entre camadas para  $T = 0$  no modelo de elétrons livres e espaçador metálico com parâmetros  $L = +\infty$ ,  $\varepsilon_F = 7.0$  eV,  $\Delta = 1.5$  eV,  $U = 0$ .



Acoplamento de troca entre camadas para  $T = 0$  no modelo de elétrons livres e espaçador isolador com parâmetros  $L = +\infty$ ,  $\varepsilon_F = 7.0$  eV,  $\Delta = 1.5$  eV,  $U - \varepsilon_F = 0.1$  eV.