

Co/CuN/Cu(001)磁性的第一原理研究

由于现代纳米合成技术的发展,人们可以研制合成各种小尺度人工磁性结构并成功地揭示了多种新奇的物理现象.这极大地推动了磁性理论和相关技术的发展.巨磁阻的自旋阀结构在计算机硬盘里的应用是过去十年中磁盘存储量能够每年数倍增长的主因.通信及计算技术的高速发展造成信息量的爆炸并对磁记录的写、存、读三方面都提出了新的挑战.人们期望从纳米磁学的研究中找到突破并已取得可喜的进展.阻碍记录单元不断减小的一个主要瓶颈问题是超小磁结构通常展示所谓的超顺磁性,即在有限温度下的热涨落使信号稳定性极差.寻找特别的磁性材料使其具有超大的磁各向异性是目前基础及应用磁学研究中的一个很重要的前沿课题.

IBM Almadam 的 Heinrich 小组最近用扫描隧道电镜对原子尺度下的超小磁体进行了广泛的研究,并在 Science 上陆续发表了多篇重要文章.有趣的是,单个原子等小体系是理想的量子自旋系统,所以自旋只能有有限个取向.同时,CuN 是绝缘体,所以从 STM 针尖上隧入的电子可在磁性原子上停留较长时间,便于控制和观察电子在自旋能级间的跃迁过程.决定自旋系统行为的哈密顿量及量子态能级依赖于外磁场及磁各向异性.通过非弹性隧穿电子激发不同自旋态间的量子跃迁,Heinrich 小组发现单个 Fe 和 Co 原子置于 CuN/Cu(001)衬底上具有很大的磁晶各向异性.这给磁记录和量子计算方面的探索提供了广阔的新前景.

新奇的物理现象的深入揭示通常需要进行广泛的理论探讨.过去几十年的经验已表明,建立在密度泛函理论基础上的第一性原理研究对理解各类磁学问题极有帮助.例如,30年前关于对磁性在表面界面环境下究竟是否增强的讨论,就是刺激研究金属薄膜乃至纳米材料的现代磁学发展的一个主要动因.利用自旋极化的泛函形式及过去几十年发展起来的各种计算程序包,人们已可以对非常复杂的体系进行深入的定量探讨.当体系同时具有磁及非磁材料,如将 Fe 和 Co 原子置于 CuN/Cu(001)面上,人们自然会问每种成分各起什么作用,它们间如何相互影响,能否发现更好的替代物以降低成本并提高性能.这些问题都可以通过从头计算得到满意的答案.事实上,密度泛函基础上的全电子方法,如全势缀加平面波(FLAPW)法,可以很准确地给出大部分过渡金属体系的磁各向异性和其他磁学性质,包括各种金属单原子、原子对、原子链等.

一般来讲,人们定量计算各种物理量,并由分析电荷及自旋分布密度,能带和态密度等获得启发.和 Heinrich 小组合作,我们对 Co/CuN(001)及很多相关问题做了大量的、系统的研究.作为一个例子,本期封面图中所示为在(001)和(110)面上的 Co/CuN(001)自旋及电荷密度的等高线图.Co 明显地和邻近的 N 原子相互作用并引起了在邻近 N 原子周围的 p_z 型磁化.然而,这种感应磁化在 Cu 原子区很快消失.由于 Co-N 和 Co-Cu 间的相互杂化毕竟没有通常 Co-Co 杂化强,致使 Co 的 d 态变得相当窄,促使磁各向异性大幅度地增强.这是因为磁各向异性取决于在费米面附近态间的自旋轨道耦合相互作用.从二级微扰论的角度,也就是减小了能量附加项的分母.

当然,密度泛函理论基础上的第一性原理磁学研究尚处于快速发展阶段.很多新问题的提出,如用光、电、磁、温度、压力等多种手段交互控制材料的磁学和其他物理性质,磁的动力学及输运性质,促使新的算法不断被提出和更新.程序的不断优化和完善,配合硬件设备的日益强大的功能,已使很多复杂的实际问题得到有效的解决.可以想见,第一性原理方法作为强有力的研究和开发工具,对磁学与相关领域的开拓具有越来越关键的影响.

(美国加州大学欧文分校物理系 武汝前 曹觉先)