

Дискретные магнитные гетероструктуры на основе Si и Fe

© М.М. Отроков¹, С.А. Останин², А. Ernst², В.М. Кузнецов¹, Е.В. Чулков^{3,4}

¹ Томский государственный университет,
Томск, Россия

² Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik,
Halle, Germany

³ Donostia International Physics Center (DIPC),
San Sebastián, Basque Country, Spain

⁴ Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas,
UPV/EHU and Centro de Física de Materiales — CFM (CSIC-UPV/EHU),
San Sebastián, Basque Country, Spain

E-mail: otrokov@phys.tsu.ru

(Поступила в Редакцию 18 ноября 2009 г.)

Представлены результаты *ab initio* расчетов электронных и магнитных свойств дискретных кремниевых гетероструктур, легированных монослоем Fe по типу замещения или внедрения. После проведения структурных релаксаций обнаружено, что гетероструктуры обоих типов демонстрируют двумерный металлический характер и ферромагнитное упорядочение на интервале толщин прослоек Si до 19 атомных слоев. Гетероструктуры с монослоем Fe по типу замещения демонстрируют намагниченность и спиновую поляризацию на уровне Ферми, двукратно превышающие аналогичные характеристики системы с внедренным монослоем Fe.

Работа выполнена при частичной поддержке Университета страны Басков (проект GV-UPV: грант IT-366-07) и Министерства науки и технологии Испании (грант N-FIS2007-06671-C02-01).

1. Введение

Экспериментальные и теоретические исследования магнитных полупроводников являются одной из наиболее актуальных областей физики конденсированного состояния как с технологической, так и с фундаментальной точки зрения. Магнитные полупроводники позволяют управлять не только зарядом, что является основой электроники, но и спином носителей заряда. Поэтому их приложения могут быть весьма разнообразными. Большинство современных исследований в этой области посвящено изучению систем на основе GaAs. Однако на практике более полезными могут оказаться магнитные материалы, приготовленные на основе Si, поскольку именно кремний является основным материалом электроники. Очень важным представляется изучение таких магнитных структур, которые могли бы легко сопрягаться с кремниевыми электронными материалами. В этой связи возрастает важность *ab initio* исследований, что особенно очевидно для так называемых дискретных магнитных гетероструктур (ДМГ), состоящих из монослоев (МС) магнитных переходных металлов в полупроводниковых пленках [1]. ДМГ, основывающиеся на δ -легировании, позволяют достигать концентраций магнитной примеси в полупроводнике, значительно превышающих равновесный предел растворимости. Высокая степень упорядоченности ДМГ и идеальность границ раздела способствуют установлению магнитного порядка. В ферромагнитном (ФМ) случае большая концентрация магнитных атомов приводит к существенному возрастанию температуры Кюри [2]. Кроме того, как предсказывают

ab initio расчеты, ДМГ могут обладать более высокой спиновой поляризацией, чем обычные ферромагнетики [3–5], представляя собой идеальные материалы для спиновой инжекции. Подобные гетероструктуры уже реализованы экспериментально в GaAs/Mn [2,6] и GaSb/Mn [7,8].

В настоящее время исследование Si-ДМГ связано главным образом с легированием Mn ввиду его значительного магнитного момента — примерно $2.3\mu_B$ в α -структуре (см. теоретические исследования [4,5], а также экспериментальную работу [9]). Так как атомы Fe также имеют значительный магнитный момент ($2.2\mu_B$ в α -структуре (ОЦК)), исследование ДМГ на основе Si и Fe представляется столь же целесообразным. Недавно в работе [10] методом присоединенных плоских волн в рамках обобщенного градиентного приближения к обменно-корреляционному функционалу была исследована ДМГ, состоящая из МС Fe в Si. МС Fe был сформирован посредством замещения атомов Si атомами Fe. Авторами работы [10] сообщается, что в расчете на два атома Fe антиферромагнитная (АФМ) конфигурация на 30 meV предпочтительней ФМ. Заметим, что в работе [10] не проводились структурные релаксации, хотя их учет может привести к изменению „магнитного поведения“ ДМГ.

Гетероструктуры Si/Fe с МС внедрения (атомы Fe занимают тетраэдрические междоузлия в решетке Si) до сих пор не были исследованы. Поэтому в данной работе мы представляем *ab initio* исследование электронной структуры и магнитных свойств Si-ДМГ, легированных монослоем Fe как по типу замещения (Fe_S), так и по типу внедрения (Fe_I), с учетом структурных релаксаций.

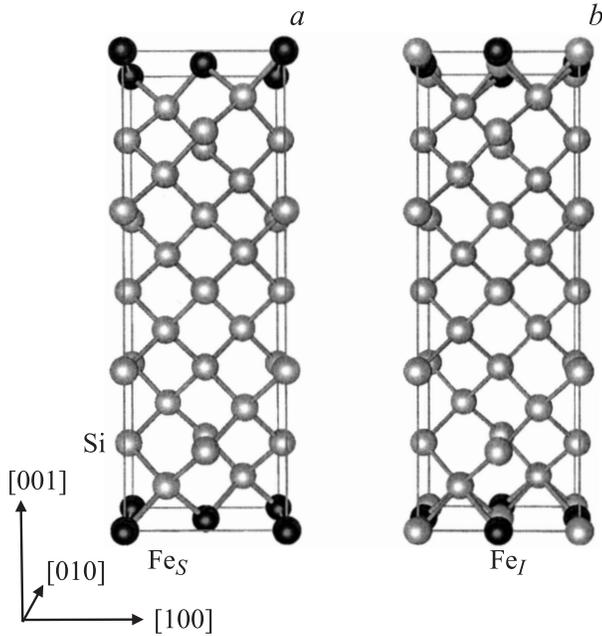


Рис. 1. Элементарные ячейки Si-гетероструктур с монослоем Fe по типу замещения Si_N/Fe_S (a) и внедрения Si_N/Fe_I (b) для $N = 11$. Рисунок подготовлен при помощи программы Balls & Sticks [11].

2. Описание модели и метода расчета

ДМГ моделировались сверхъячейками Si_N/Fe_S и Si_N/Fe_I , состоящими из МС Fe и прослойки Si, толщина которой варьировалась от $N = 7$ до 19 атомных слоев. Базисные векторы элементарной ячейки **a**, **b** и **c** направлены вдоль [100], [010] и [001] соответственно, а их модули $a = b = a_0$ и $c = (N + 1)a_0/4$, где $a_0 = 5.46 \text{ \AA}$ — оптимизированная постоянная решетки объемного Si в структуре алмаза. На рис. 1 изображены гетероструктуры $\text{Si}_{11}/\text{Fe}_S$ и $\text{Si}_{11}/\text{Fe}_I$. Расчеты проводились методом функционала электронной плотности в обобщенном градиентном приближении для обменно-корреляционной энергии [12] с использованием плосковолнового базиса и PAW-псевдопотенциалов [13], реализованных в коде VASP [14–17]. Для релаксации использовался базисный набор плоских волн с энергиями $< 500 \text{ eV}$ и Γ -центрированная сетка специальных **k**-точек [18] $6 \times 6 \times N_z$, где $N_z = 3, 2, 2, 1$ для ДМГ из 8, 12, 16 и 20 слоев соответственно. Использование более плотной сетки в зоне Бриллюэна (ЗБ) $8 \times 8 \times N_z$ обуславливает изменение полной энергии не более чем на 1 meV в расчете на атом. Структурная релаксация проводилась до достижения сил $< 0.01 \text{ eV/\AA}$ для каждого атома в сверхрешетке. При расчетах плотностей электронных состояний использовались сетки $12 \times 12 \times N_z$ ($N_z = 6, 4, 3, 2$).

3. Результаты и обсуждение

3.1. Структурная релаксация. На рис. 2 представлены результаты расчета структурной релаксации в Si_N/Fe_S и Si_N/Fe_I вдоль направления [001]. Каждая плоскость типа (001) при релаксации движется как целое (внутриплоскостные смещения атомов вдоль [001] пренебрежимо малы — порядка $10^{-2}\%$), в то время как плоскость, содержащая МС Fe, и $(N + 1)/2$ атомный слой Si остаются неподвижными в силу периодичности ячейки. Из рис. 2, a видно, что при релаксации во всех системах Si_N/Fe_S расстояние d_{01} между МС Fe_S и ближайшими слоями Si уменьшается. При увеличении N с 7 до 19 Δd_{01} уменьшается от -8.3 до -10.5% . При этом межатомное расстояние Fe–Si составляет около 2.28 \AA , что очень близко к экспериментально наблюдаемому расстоянию Fe–Si в структуре B20, равному 2.29 \AA [19]. Межатомное расстояние, которое „предлагается“ паре Fe–Si до релаксации (оно соответствует расстоянию между ближайшими соседями в идеальном Si), в наших расчетах составляет 2.36 \AA . Таким образом, уменьшение расстояния между МС Fe_S и ближайшими атомными плоскостями Si в системе Si_N/Fe_S обуславливается эффектом „формирования длины химической связи“ между атомами Fe и Si. Данные атомы стремятся сформировать связь с длиной, близкой к длине связи этих же атомов в объемном FeSi. Рис. 2, b иллюстрирует релаксацию в системе с МС Fe_I . Из рисунка видно, что изменения межплоскостных расстояний при релаксации здесь значительно меньше, чем в системе с МС заме-

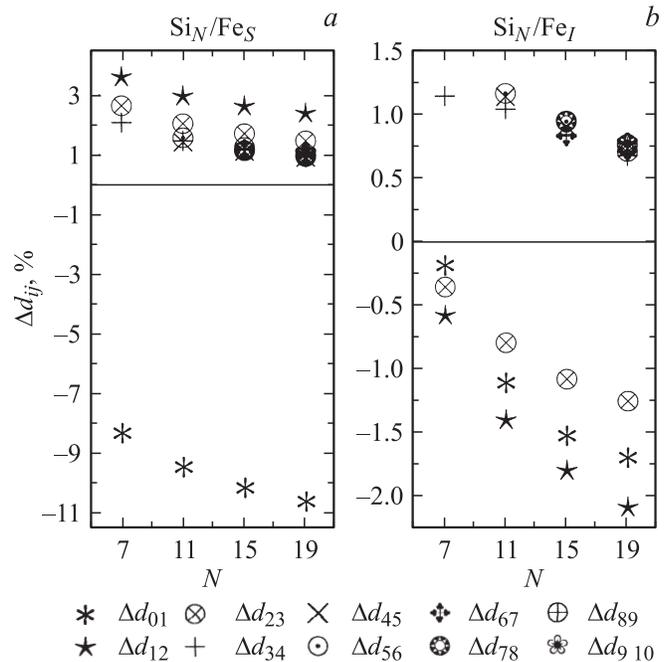


Рис. 2. Относительные изменения межплоскостных расстояний Δd_{ij} после проведения структурной релаксации в системах Si_N/Fe_S (a) и Si_N/Fe_I (b). Монослой Fe имеет номер 0.

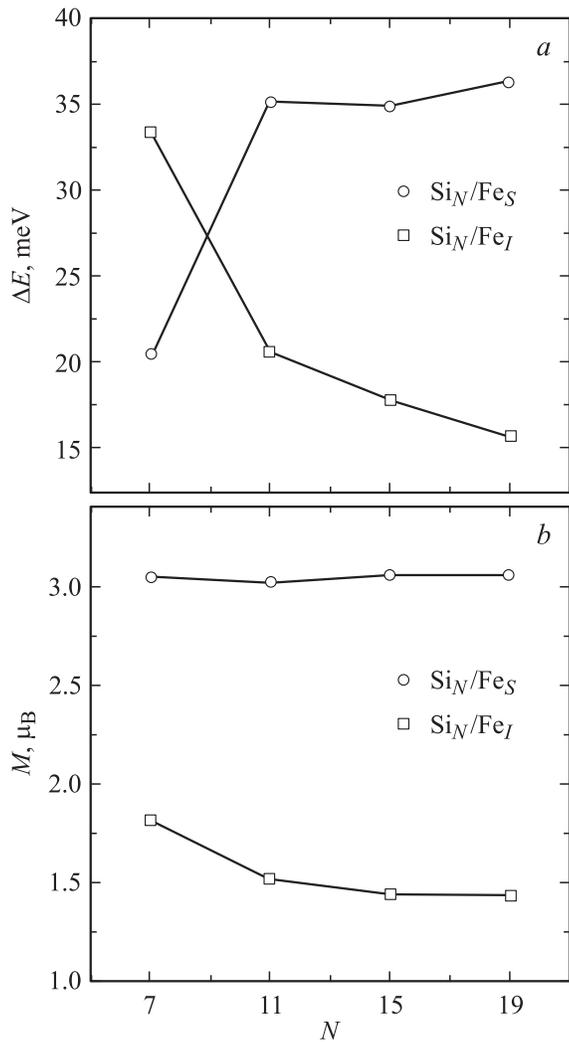


Рис. 3. *a)* Разность энергий $\Delta E = E_{\text{AFM}} - E_{\text{FM}}$ антиферромагнитной и ферромагнитной конфигураций в расчете на два атома Fe в зависимости от N . *b)* Изменение полных магнитных моментов для ферромагнитных конфигураций Si_N/Fe_S и Si_N/Fe_I .

щения: $\Delta d_{01} = -1.7\%$ при толщине прослойки $N = 19$. Столь незначительные релаксации, по-видимому, являются простым следствием того, что добавление атомов Fe в тетраэдрические междоузлия (фактически добавление вещества в фиксированный объем) неизбежно приводит к расталкиванию соседних слоев. Данный эффект конкурирует с механизмом формирования укороченной длины связи между атомами Fe и Si. Тем не менее с ростом N межплоскостные смещения увеличиваются. Очевидно, напряжения, вызванные внедрением MC Fe_I , перераспределяются между большим числом слоев в гетероструктуре, и стремление атомов Fe и Si образовать связь с длиной, близкой к длине связи в объемном FeSi, имеет все большее значение.

3.2. Магнитное упорядочение. Как видно из рис. 3, *a*, при толщинах кремниевых прослоек $7 \leq N \leq 19$ обе исследованные системы Si_N/Fe упоря-

дочиваются ферромагнитно. Интересно отметить, что величина ΔE , претерпевая значительное изменение на интервале N с 7 до 11 слоев, при дальнейшем увеличении толщины прослойки меняется относительно слабо. Это свидетельствует об исключительно двумерном характере наблюдаемого ферромагнетизма, когда вклад межслоевых обменных взаимодействий в полную энергию для $N \geq 11$ становится пренебрежимо мал. Следовательно, формирование ферромагнитного порядка обусловлено прямым обменным взаимодействием между электронами атомов Fe одного и того же MC, находящихся на расстоянии 3.86 \AA друг от друга. По причине малости магнитных взаимодействий вдоль $[001]$ в системах Si_N/Fe не ожидается изменения магнитного порядка внутри интервалов толщин N (7,11), (11,15) и (15,19). Ранее в работе [10], где исследовались ДМГ на основе различных полупроводников (Si, Ge, GaAs, GaSb и GaN) и переходных металлов (Cr, Mn, Fe и Co), было обнаружено, что система Si/Fe_S упорядочивается антиферромагнитно при $\Delta E = -30 \text{ meV}$ в расчете на два атома Fe. Все ДМГ были исследованы без проведения структурных релаксаций и только при конкретной толщине прослойки, равной 23 слоям для ДМГ со структурной алмаза. Действительно, в отдельных случаях учет структурной релаксации не приводит к качественному изменению поведения системы и поэтому может быть опущен, как, например, в Si/Mn_S [4], где расстояние d_{01} изменяется незначительно. Однако при δ -легировании кремния железом по типу замещения d_{01} уменьшается на величину $\sim 10\%$, что оказывает существенное влияние на формирование типа магнитного упорядочения.

3.3. Электронная структура. В кристаллическом кремнии со структурой алмаза дефекты замещения Fe_S и внедрения Fe_I находятся в тетраэдрическом окружении четырех ближайших соседей Si. В этом случае пятикратно вырожденные d -уровни атома Fe расщепляются кристаллическим полем на двукратно вырожденный уровень e и трехкратно вырожденный уровень t_2 [20]. Электронные орбитали атомов Fe и их ближайших соседей Si гибридизуются. Согласно теории молекулярных орбиталей, гибридизовываться могут только состояния, имеющие одинаковую симметрию [21], в нашем случае это $\text{Si } t_2(p)$ - и $\text{Fe } t_2(d)$ -состояния.

На рис. 4 приведены полные и парциальные плотности электронных состояний (ПЭС), рассчитанные для $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$ и $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$. ПЭС остальных систем Si_N/Fe_S и Si_N/Fe_I , за исключением специально оговоренных далее различий, весьма схожи с изображенными на рис. 4 и поэтому здесь не показаны. Как видно из рис. 4, *a* (см. верхнюю панель), система $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$ демонстрирует металлическую ПЭС со спиновой поляризацией на уровне Ферми $P = |n \uparrow - n \downarrow| / (n \uparrow + n \downarrow) = 0.6$ (или 60%), где $n \uparrow = n \uparrow(E_F)$ и $n \downarrow = n \downarrow(E_F)$ — дифференциальные ПЭС для спинов вверх и вниз соответственно. В канале со спином вверх (сплошная линия) состояния в валентной зоне между -2.5 и 1 eV демонстрируют сильную Fe d -Si(1) p -гибридизацию, что

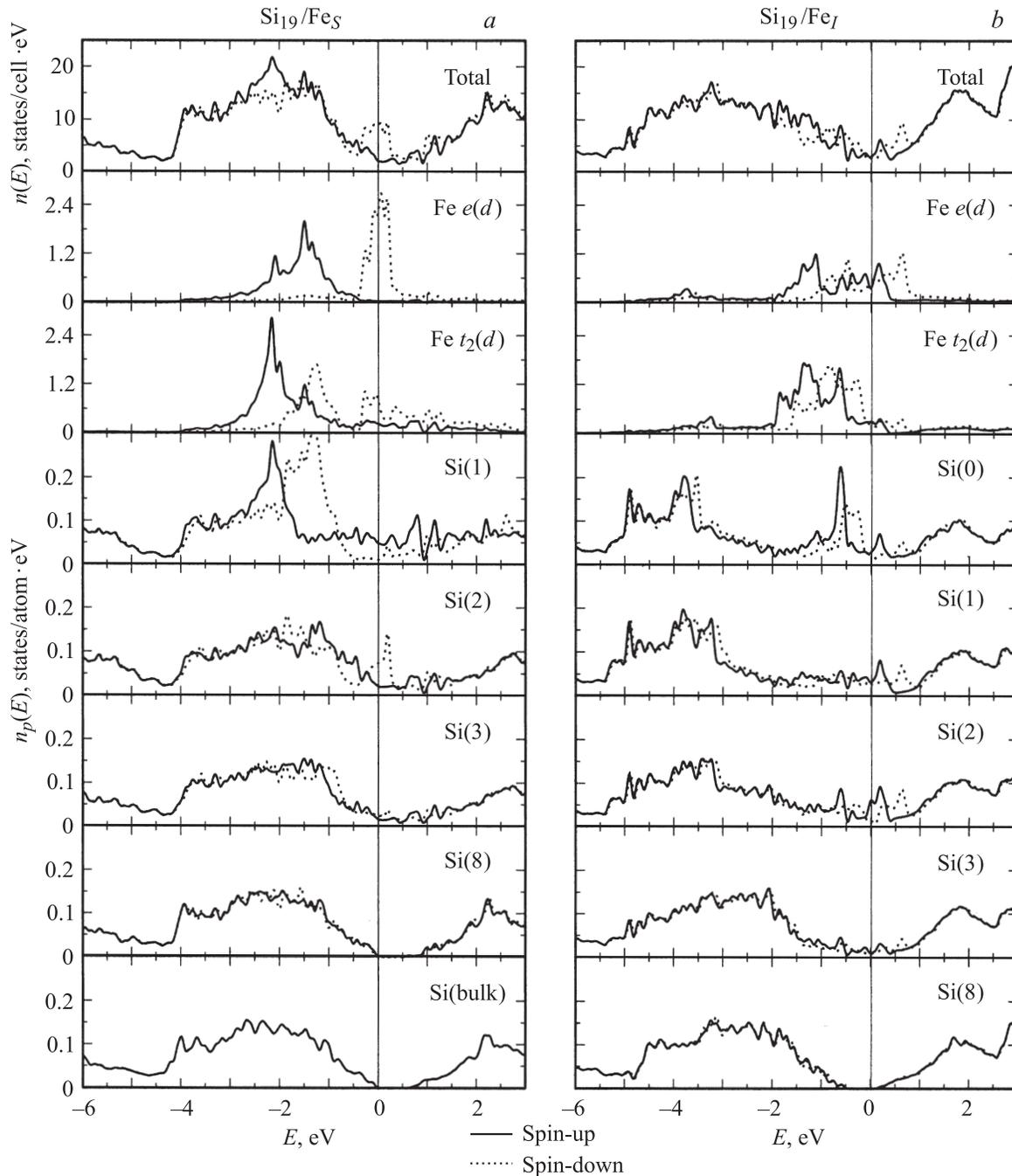


Рис. 4. Полные $n(E)$ и парциальные $n_p(E)$ плотности электронных состояний, рассчитанные для $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$ (a) и $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$ (b). Уровень Ферми соответствует нулю энергии. Si(1), Si(2), Si(3), Si(8) — атомы Si в слоях с номерами 1, 2, 3 и 8 (точка отсчета соответствует монослою Fe). В случае $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$ Si(0) обозначает атом, находящийся в плоскости МС Fe_I . Si(bulk) соответствует атому собственного объемного Si в структуре алмаза (изображенная парциальная ПЭС в данном случае не поляризована по спину). Парциальные ПЭС всех атомов Si отвечают суммарному вкладу от s - и p -состояний в соответствующих спиновых каналах внутри сфер Вигнера–Зейтца.

приводит к „металлизации“ локальных ПЭС атомов Si близлежащих слоев (см. панели $\text{Fe } t_2(d)$ и Si(1), Si(2) и т.д.). Значительный вклад в валентную зону дают также $e(d)$ -состояния, расположенные на 1.5 eV ниже уровня Ферми. Вблизи верхнего края валентной зоны вклады от $e(d)$ -состояний и p -состояний атомов Si незначитель-

ны, что приводит к невысокой полной ПЭС на уровне Ферми в канале со спином вверх. В зоне проводимости доля Fe d -состояний со спином вверх исчезающе мала, и по мере удаления от уровня Ферми ($E > E_F$) все больший вклад приходит от s - и p -состояний атомов Si (ср. панели Total и Si(bulk), рис. 4, a). В канале со

спином вниз (пунктирная линия) наибольший вклад в зону проводимости в интервале 0.5 eV выше уровня Ферми дают $e(d)$ -орбитали Fe. Именно $e(d)$ -орбитали Fe обеспечивают высокую спиновую поляризацию ДМГ Si₁₉/Fe_S на уровне Ферми, поскольку полная ПЭС вблизи верхнего края валентной зоны канала со спином вверх весьма невелика. Орбитали $t_2(d)$ вносят менее значительный вклад в ПЭС на уровне Ферми, так как они преимущественно сосредоточены в интервале 2 eV ниже E_F , где также наблюдается сильная Fe d -Si(1) p -гибридизация. Каждый атом Fe_S имеет магнитный момент 1.53 μ_B . Индуцированные магнитные моменты на четырех ближайших атомах Si(1) отрицательны и составляют $-0.06\mu_B$, атомы второй координационной сферы Si(2) имеют магнитные моменты по 0.02 μ_B , а более удаленные атомы последующих слоев — менее 0.01 μ_B . С учетом магнитного момента 0.13 μ_B вне сфер Вигнера–Зейтца полный магнитный момент на элементарную ячейку составляет 3.06 μ_B (рис. 3, b).

ПЭС для системы Si₁₉/Fe_I показаны на рис. 4, b. Парциальные ПЭС в интервале от -3 до 1 eV обоих спиновых каналов демонстрируют сильную гибридизацию d -состояний Fe с p -состояниями соседних атомов Si(1), Si(2) и Si(0), расстояния до которых равны соответственно 2.35, 2.65 и 2.73 Å. При этом парциальные ПЭС $t_2(d)$ и $e(d)$ принимают более „объемоподобный“ вид по сравнению с Si₁₉/Fe_S (ср., например, ярко выраженный пик $e(d)$ -состояний в Si₁₉/Fe_S и широкие зоны $e(d)$ -состояний Si₁₉/Fe_I в каналах со спином вниз). Вместе с незначительным обменным расщеплением d -состояний Fe это приводит к следующим результатам: 1) относительно невысокой, порядка 20%, спиновой поляризации на уровне Ферми; 2) уменьшению магнитного момента на атомах Fe_I (по сравнению с Si₁₉/Fe_S) до 0.71 μ_B . Вследствие этого магнитные моменты, индуцированные на ближайших атомах Si, весьма незначительны — менее 0.01 μ_B . С учетом магнитного момента 0.01 μ_B вне сфер Вигнера–Зейтца полный магнитный момент на элементарную ячейку составляет 1.43 μ_B (рис. 3, b). Причина уширения d -зон Fe в MC внедрения заключается в более близком расположении атомов и поэтому более сильном межатомном взаимодействии, чем в плоскости MC Fe_S. Действительно, в случае MC замещения первым соседом атома Fe в плоскости MC является также атом Fe, лежащий на расстоянии 3.86 Å. В MC внедрения расстояние между атомами Fe также составляет 3.86 Å, однако на расстоянии 2.73 Å находится атом Si(0) (рис. 1). Таким образом, плотность атомов в плоскости, содержащей MC внедрения, больше, чем в плоскости MC замещения. Возникающая вследствие этого большая концентрация электронов приводит к более сильному межатомному взаимодействию и гибридизации зон. Понять уменьшение обменного расщепления d -подзоны Fe_I по сравнению с обменным расщеплением Fe_S можно при помощи следующего простого рассуждения. Обменное расщепление d -уровней Fe в Si₁₉/Fe_S меньше, чем в ОЦК-Fe, так как ближайшие

соседи атомов Fe в ДМГ — немагнитные атомы Si. Поскольку в Si₁₉/Fe_I у атома Fe появляются четыре дополнительных немагнитных соседа, т.е. атомы Si(0), обменное расщепление его d -уровней становится еще меньше.

Необходимо отметить, что как в Si₁₉/Fe_S, так и в Si₁₉/Fe_I все атомы Si первых семи слоев (нуль отсчета соответствует MC Fe) дают вклад в ПЭС в области фундаментальной щели. Данный вклад убывает по мере увеличения расстояния от атома Si до MC Fe. Начиная с восьмого слоя, локальные ПЭС атомов Si имеют энергетическую щель величиной около 0.6 eV и вид, соответствующий виду локальной ПЭС собственного объемного Si (см. панель Si(bulk)). Следовательно, оба рассматриваемых типа ДМГ представляют собой двумерные металлы. Очевидно, что их проводимость вдоль [001] много меньше проводимости в плоскости, легированной Fe. Указанное свойство сохраняется и у ДМГ с тонкими прослойками Si. Хотя при $N = 7$ ни один из атомов Si не имеет ПЭС с ярко выраженной энергетической щелью, проводимость таких ДМГ перпендикулярно плоскости MC по-прежнему значительно меньше, чем вдоль нее.

На рис. 5 представлены зонные структуры для Si₁₉/Fe_S и Si₁₉/Fe_I вдоль симметричных направлений ЗБ $\Gamma-X-M-\Gamma-Z$. Направления $\Gamma-X-M-\Gamma$ и $\Gamma-Z$, лежащие в плоскостях k_x-k_y и k_z ЗБ соответственно, описывают состояния в плоскости MC Fe (т.е. (001)) и перпендикулярно ей вдоль направления [001] прямой решетки. Размер символов на полях рисунков отражает относительную долю d -состояний. В канале со спином вверх системы Si₁₉/Fe_S (рис. 5, a) три частично занятые зоны обеспечивают металлическую проводимость. Как было отмечено выше, состояния в зоне проводимости канала со спином вверх преимущественно имеют Si $t_2(p)$ -характер в силу того, что $e(d)$ - и $t_2(d)$ -состояния расположены ниже уровня Ферми (см. панель Fe $t_2(d)$ на рис. 4, a). В канале со спином вниз также наблюдается металлическая проводимость. На уровне Ферми и вблизи него расположены узкие зоны, состояния в которых преимущественно имеют $e(d)$ -характер (см. панели Fe $e(d)$ и Fe $t_2(d)$ на рис. 4). Данные состояния обеспечивают высокую спиновую поляризацию на уровне Ферми системы. Вдоль направления $\Gamma-Z$ $p-d$ -гибридизованные зоны локализованы тем сильнее, чем значительнее в них доля d -состояний. Это является следствием специфической структуры ДМГ: вдоль [001] профиль распределения легирующей примеси есть δ -функция. Поэтому вдоль $\Gamma-Z$ располагаются узкие примесные зоны в противоположность уширенным зонам вдоль $\Gamma-X-M-\Gamma$, описывающим состояния электронов в плоскости MC, где образуется двумерная металлическая связь. Кроме того, в обоих спиновых каналах вдоль направления $\Gamma-Z$ отсутствуют состояния на уровне Ферми, т.е. носители заряда преимущественно сосредоточены вблизи MC Fe_S, что также подтверждает двумерную металличность рассматриваемой системы.

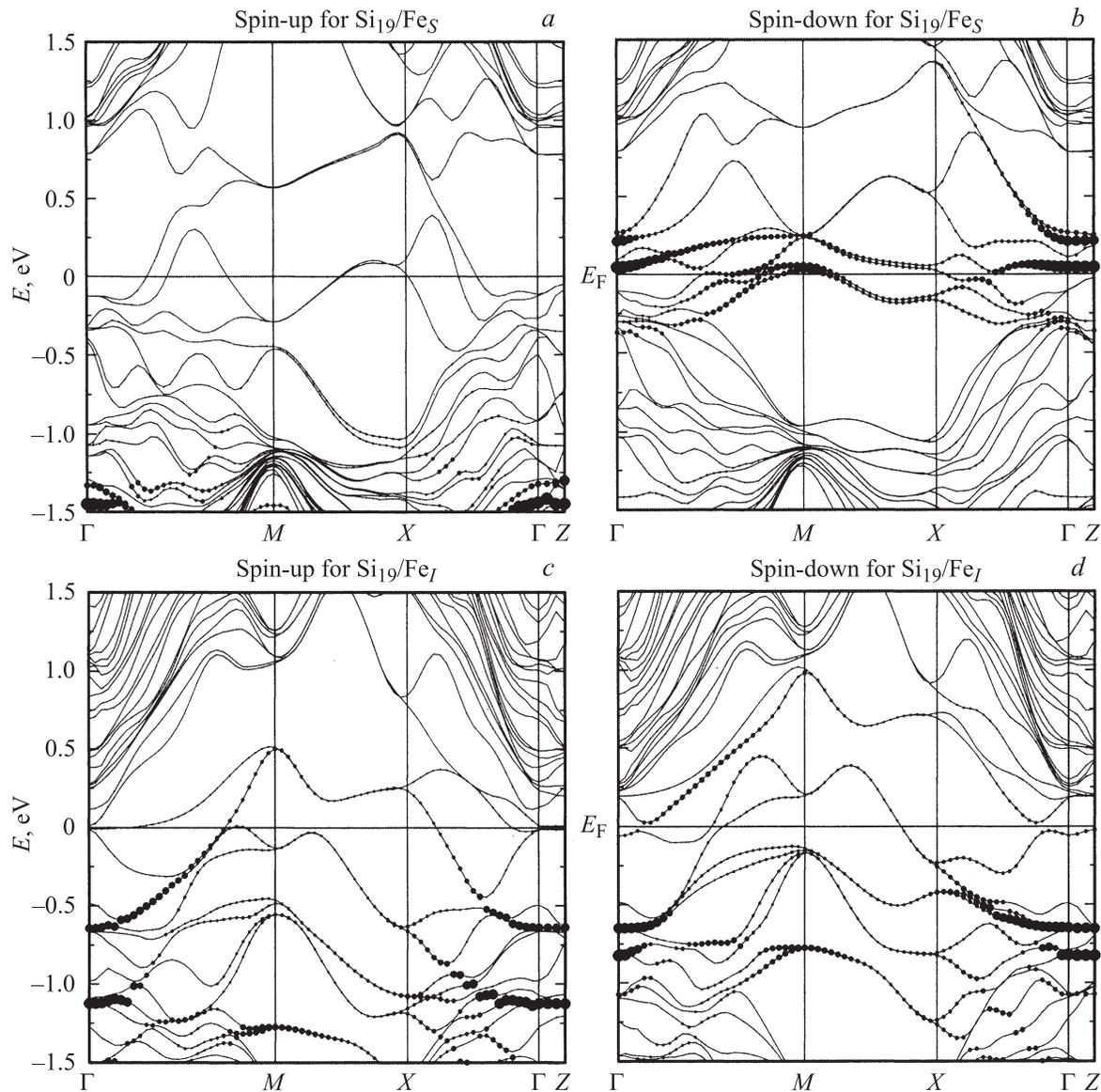


Рис. 5. Спин-поляризованная зонная структура для $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$ (*a, b*) и $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$ (*c, d*) вдоль направления Γ – M – X – Γ – Z зоны Бриллюэна. Симметричные точки зоны Бриллюэна имеют следующие координаты: Γ — (0,0,0), M — (0.5,0.5,0), X — (0.5,0,0) и Z — (0,0,0.5). Размер символов отражает относительную долю d -состояний в данной точке \mathbf{k} .

Металлическую проводимость в системе $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$ обеспечивают три и две частично заполненные зоны в каналах со спинами вверх и вниз соответственно (рис. 5, *c* и *d*), причем, согласно рис. 4, *b*, в зоне проводимости присутствуют состояния обеих симметрий $e(d)$ и $t_2(d)$. В плоскости \mathbf{k}_x – \mathbf{k}_y (направления Γ – X – M – Γ) протяженность p – d -гибридизованных зон в среднем больше, чем в системе $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$, что указывает на более значительное межатомное взаимодействие в монослое Fe_I . Что касается направления Γ – Z , то зоны с преобладанием d -характера также сильно локализованы, как и в системе $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$, что обусловлено δ -профилем распределения легирующей примеси в направлении [001] прямой решетки. Система $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_I$, так же как $\text{Si}_{19}/\text{Fe}_S$, не имеет состояний на уровне Ферми вдоль направления Γ – Z —

в канале со спином вверх присутствует псевдощель величиной в 29 meV. Это обстоятельство указывает на то, что носители заряда в основном сосредоточены вблизи МС Fe_I .

4. Заключение

В рамках *ab initio* расчетов были исследованы N -слойные Si-ДМГ с монослоем Fe по типу замещения (*S*) и внедрения (*I*). Показано, что при исследовании Si_N/Fe_S чрезвычайно важен учет структурной релаксации, поскольку разница энергий между ФМ- и АФМ-конфигурациями ΔE чувствительна к изменению расстояния между МС Fe_S и ближайшими атомными плоскостями Si.

Оба типа легированных систем упорядочиваются ферромагнитно на всем исследованном интервале толщин Si-прослоек N . При $N \geq 11$ исследованные ДМГ демонстрируют исключительно двумерный ферромагнитный порядок, возникающий вследствие прямого обмена между атомами Fe внутри МС. При $N = 7$ возможно наличие незначительных обменных взаимодействий между соседними МС Fe, в то время как при $N \geq 11$ их вклад в ΔE пренебрежимо мал. В системах Si_N/Fe_I , вследствие уменьшения обменного расщепления, d -подзоны с разными направлениями спинов перекрываются более значительно, чем в системах Si_N/Fe_S . В результате в Si_N/Fe_S полный магнитный момент и спиновая поляризация более чем в 2 раза превышают соответствующие величины в Si_N/Fe_I : $1.53\mu_B$ и 60% против $0.71\mu_B$ и 20% соответственно. Согласно настоящим расчетам, а также имеющимся литературным данным [3–5], общим свойством ДМГ независимо от конкретной полупроводниковой матрицы и δ -легирующего переходного металла является двумерная металличность. Это означает, что в таких системах проводимость в направлении, перпендикулярном плоскости МС, много меньше проводимости вдоль нее, поскольку носители заряда главным образом сосредоточены вблизи МС переходного металла.

Расчеты проводились на вычислительном кластере СКИФ Cyberia (г. Томск).

Авторы благодарят С.В. Еремеева и И.А. Нечаева за полезные дискуссии.

Список литературы

- [1] S.A. Crooker, D.A. Tulchinsky, J. Levy, D.D. Awschalom, R. Garcia, N. Samarth. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 505 (1995).
- [2] A.M. Nazmul, T. Amemiya, Y. Shuto, S. Sugahara, M. Tanaka. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 017 201 (2005).
- [3] S. Sanvito. *Phys. Rev. B* **68**, 054 425 (2003).
- [4] M.C. Qian, C.Y. Fong, K. Liu, W.E. Pickett, J.E. Pask, L.H. Yang. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027 211 (2006).
- [5] H. Wu, P. Kratzer, M. Scheffler. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 117 202 (2007).
- [6] R.K. Kawakami, E. Johnston-Halperin, L.F. Chen, M. Hanson, N. Guébels, J.S. Speck, A.C. Gossard, D.D. Awschalom. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2379 (2000).
- [7] X. Chen, M. Na, M. Cheon, S. Wang, H. Luo, B.D. McCombe, X. Liu, Y. Sasaki, T. Wojtowicz, J.K. Furdyna, S.J. Potashnik, P. Schiffer. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 511 (2002).
- [8] G.B. Kim, M. Cheon, S. Wang, H. Luo, B.D. McCombe, X. Liu, Y. Sasaki, T. Wojtowicz, J.K. Furdyna. *Physica E* **20**, 355 (2004).
- [9] S.H. Chiu, H.S. Hsu, J.C.A. Huang. *J. Appl. Phys.* **103**, 07D110 (2008).
- [10] Yu.A. Uspenskii, E.T. Kulatov. *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 7, 931 (2009).

- [11] Balls & Sticks, program designed to create 3D-pictures and animations of crystals. <http://www.softbug.com/toycrate/bs/index.html>; T.C. Ozawa, S.J. Kang. *J. Appl. Cryst.* **37**, 679 (2004).
- [12] J.P. Perdew, W. Wang. *Phys. Rev. B* **45**, 13 244 (1992).
- [13] P.E. Blöchl. *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- [14] G. Kresse, J. Hafner. *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993); *ibid* **49**, 14251 (1994).
- [15] G. Kresse, J. Furthmüller. *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
- [16] G. Kresse, J. Furthmüller. *Phys. Rev. B* **54**, 11 169 (1996).
- [17] G. Kresse, J. Joubert. *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [18] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [19] R. Wartchow, S. Gerighausen, M. Binnewies. *Z. Kristallogr.: New Cryst. Struct.* **212**, 320 (1997).
- [20] F.A. Cotton. *Chemical applications of group theory*. Wiley, N.Y. (1990). 475 p.
- [21] С. Фудзинага. *Метод молекулярных орбиталей*. Мир, М. (1983). 461 с.