

Межслоевой обмен через примесные состояния в мультислоях железо/кремний

© В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев

Российский научный центр „Курчатовский институт“,
123182 Москва, Россия

E-mail: tuvictor@mail.ru

(Поступила в Редакцию 19 декабря 2007 г.)

Рассмотрена модель обменной связи между слоями ферромагнитного металла через прослойку невырожденного полупроводника с точечными дефектами. Рассчитана асимптотика обменных интегралов; показано, что знак межслоевого обмена может меняться в зависимости от положения и заполнения примесных состояний в прослойке. Результаты использованы для качественного объяснения экспериментальных данных в мультислоях железо/кремний.

Работа поддержана грантом РФФИ 07-02-01252-а.

PACS: 73.21.Ac, 75.75.+a

1. Введение

В работах, посвященных изучению механизма межслоевой обменной связи (МОС) в мультислоях типа железо/кремний (см. обзор [1]), неоднократно отмечалась интегрирующая особенность этой связи — возможная смена знака интеграла МОС между соседними слоями железа $J(L)$ при изменении толщины прослойки кремния L . Антиферромагнитный (АФМ) характер интеграла $J(L)$ при больших значениях L (по одним данным при $L > 5-6 \text{ \AA}$ [2]; по другим — при $L > 18-20 \text{ \AA}$ [3]) был достаточно давно и надежно установлен различными группами исследователей, но детали поведения $J(L)$ при малых L сильно различались и во многом противоречили друг другу. В большинстве экспериментов АФМ-характер МОС наблюдался во всем измеренном интервале толщин L , причем величина $J(L)$ экспоненциально и монотонно падала с возрастанием L [4]. В некоторых экспериментах, однако, имел место ярко выраженный максимум $J(L)$ при некоторой характерной толщине прослойки L_{\max} , лежащей в широком диапазоне значений от $L_{\max} \approx 6-8 \text{ \AA}$ [1] до $L_{\max} \approx 20-22 \text{ \AA}$ [3]. В работах [3, 5] была также зафиксирована смена знака $J(L)$ при значениях $L < L_{\max}$, т.е. переход от АФМ- к ферромагнитному (ФМ) типу МОС. Таким образом, в настоящее время можно с уверенностью говорить об усилении ФМ-компоненты межслоевого обмена и конкуренции ФМ- и АФМ-механизмов МОС при уменьшении расстояния между слоями железа в структурах Fe/Si, полученных различными методами.

Стандартное объяснение АФМ-поведения МОС при больших толщинах прослойки [5] состоит в предположении доминирующей роли суперобмена (за счет прямого туннелирования [6] или туннелирования через резонансные примесные состояния [7]) между слоями ферромагнитного металла через прослойку немагнитного диэлектрика. В то же время нарастание ФМ-компоненты МОС при уменьшении толщины прослойки связывается авторами [5] с обменом РККИ-типа через образующиеся

вследствие интердиффузии проводящие мостики внутри диэлектрической прослойки. Однако, как уже отмечалось в литературе (см., например, [1]), столь естественная на первый взгляд интерпретация экспериментальных данных на самом деле далеко не очевидна из-за образования вблизи интерфейса железо/кремний промежуточного слоя, содержащего структурные дефекты, примеси, а также включения силицидов железа ($\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$) различного состава. Этот важный аспект проблемы межслоевого обмена, связанный с неоднородностью прослойки вследствие значительной неконтролируемой интердиффузии компонентов через интерфейс, мы попытались простейшим способом учесть в работе [8], где была предложена модель МОС, базирующаяся на следующих главных предположениях.

1) На границе раздела Fe/Si формируется тонкий химический интерфейс объемно центрированного моносилцида железа ($c\text{-FeSi}$) и возникают поляризованные по спину квазидвумерные интерфейсные состояния.

2) Магнитная связь между слоями Fe осуществляется путем суперобменного взаимодействия интерфейсных состояний через прослойку Si и включает как внутризонные, так и межзонные процессы.

3) Немонотонный характер зависимости МОС от толщины и состава прослойки связан с конкуренцией АФМ- и ФМ-составляющих суперобмена.

Данная модель позволила воспроизвести основные черты МОС в структурах типа [1,2], в которых, по видимому, только межзонные электрон-дырочные возбуждения определяют величину ФМ-вклада в МОС. Согласно оценкам, проведенным в [8], вследствие значительной величины запрещенной зоны в чистом кремнии этот вклад может стать преобладающим лишь при очень малой толщине прослойки (менее 6 \AA , как в [1,2]), но никак не при значительно большей ее толщине (менее 20 \AA , как в [3]). Таким образом, для объяснения смены характера МОС в структурах [3] механизм ФМ-обмена [8] оказался недостаточным, что связано, как нам теперь представляется, с более сложным, чем пред-

полагалось ранее, характером неоднородности переходного слоя. Именно учету этого важного обстоятельства посвящена настоящая работа.

2. Модельный гамильтониан

Рассмотрим слой широкозонного немагнитного полупроводника (Si) с номинальной толщиной $L = 2l$ (где l — половина толщины прослойки), помещенной между двумя слоями ферромагнитного металла (Fe). Согласно модели [8], непосредственного перекрытия волновых функций Fe и Si на интерфейсе Fe/Si не происходит, но вследствие перестройки химических связей возникает тонкий промежуточный слой ФМ-фазы объемно центрированного моносилцида железа c -FeSi, благодаря специфике зонной структуры которого появляются почти бездисперсные спин-поляризованные интерфейсные состояния, гибридирующиеся с состояниями прослойки. Ось z ориентируем вдоль направления роста структуры, т.е. перпендикулярно плоскости интерфейса, который предполагаем идеально гладким, и будем отсчитывать координату z от середины прослойки.

Запишем полный гамильтониан прослойки H_S следующим образом:

$$H_S = H_i + H_{ib} + H_b. \quad (1)$$

Здесь H_i — гамильтониан интерфейсных состояний,

$$H_i = H_i(+l) + H_i(-l), \quad (2)$$

$$H_i(\pm l) = \sum_{\alpha\beta} \int a_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{q}, \pm l) [E_i(\mathbf{q}, \pm l) \delta_{\alpha\beta} + J_i(\pm l) (\mathbf{M}(\pm l) \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta}] a_{\beta}(\mathbf{q}, \pm l) d\mathbf{q}, \quad (3)$$

где a^+ и a — операторы рождения и уничтожения квазичастиц с энергией $E_i(\mathbf{q}, \pm l)$; \mathbf{q} — двумерный квазиимпульс в плоскости интерфейса (\mathbf{x}, \mathbf{y}) , ортогональной оси z ; $J_i(\pm l)$ — обменный интеграл между состояниями ФМ и состояниями промежуточного слоя; $\mathbf{M}(\pm l)$ — вектор намагниченности на правой (+) и левой (–) ФМ-обкладках соответственно; $\boldsymbol{\sigma}$ — вектор, составленный из матриц Паули; (α, β) — спиновые индексы. Далее предполагается, что величины $E_i(\mathbf{q}, \pm l)$ и $J_i(\pm l)$ идентичны для обоих интерфейсов; $E_i(\mathbf{q}, +l) = E_i(\mathbf{q}, -l) = E_i(\mathbf{q})$, $J_i(+l) = J_i(-l) = J_i$. Модули векторов $\mathbf{M}(\pm l)$ также одинаковы, но их направление $\mathbf{e}(\pm l)$ могут быть отличны друг от друга: $\mathbf{M}(\pm l) = M\mathbf{e}(\pm l)$, $\mathbf{e}(+l) \neq \mathbf{e}(-l)$.

Гамильтониан H_{ib} описывает одноэлектронную гибридизацию между интерфейсными состояниями и объемными состояниями прослойки; он может быть записан в рамках модели плоского дефекта как

$$H_{ib} = H_{ib}(+l) + H_{ib}(-l), \quad (4)$$

$$H_{ib}(\pm l) = \sum_{\alpha} \int [a_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{q}, \pm l) V(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \pm l) b_{\alpha}(\mathbf{q}', k_z) \times \exp(\pm i k_z l) + h.c.] d\mathbf{q} d\mathbf{q}' dk_z, \quad (5)$$

где b^+ и b — операторы рождения и уничтожения квазичастиц для состояний прослойки в зоне с законом

дисперсии $E(\mathbf{k})$, k_z — проекция трехмерного квазиимпульса $\mathbf{k} = (\mathbf{q}, k_z)$ на ось z , $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \pm l)$ — матричные элементы периодического в плоскости (\mathbf{x}, \mathbf{y}) потенциала гибридизации на интерфейсах, которые полагаем равными, так что $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}', +l) = V(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -l) = V(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$. Для простоты в настоящей работе считаем, что интерфейсные состояния лежат вблизи какого-либо экстремума зоны полупроводниковой прослойки (например, вблизи дна зоны проводимости) и только эта зона вносит вклад в МОС.

В отличие от работы [8], где рассматривалась прослойка из чистого материала, здесь считаем прослойку достаточно грязной вследствие образования в ней в процессе роста структуры дефектов различного типа, которые будем моделировать набором точечных примесных центров. Гамильтониан объемных состояний прослойки H_b запишем в виде

$$H_b = H_0 + H_1. \quad (6)$$

В (6) H_0 описывает состояния квазичастиц в зоне проводимости,

$$H_0 = \sum_{\alpha} \int b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) E(\mathbf{k}) b_{\alpha}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (7)$$

а H_1 — их рассеяние на точечных дефектах,

$$H_1 = \sum_{\alpha, \beta, m} \int b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \{V_m \delta_{\alpha\beta} + J_m (\mathbf{S}_m \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta}\} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) b_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} U \sum_{\alpha, m} \int n_{\alpha}(\mathbf{r}) n_{-\alpha}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

где

$$n_{\alpha}(\mathbf{r}) = b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) b_{\alpha}(\mathbf{r}).$$

Здесь V_m и J_m — соответственно потенциальная и обменная компоненты электрон-примесного взаимодействия; \mathbf{S}_m — классический вектор магнитного момента на дефекте в точке \mathbf{R}_m ; $n_{\alpha}(\mathbf{r})$ — плотность электронов с проекцией спина α в точке \mathbf{r} . Гамильтониан (6)–(8) использовался ранее [9,10] для расчета эффективного обмена между магнитными моментами точечных дефектов в разбавленных магнитных полупроводниках. Было показано, что наличие резонансных локализованных состояний, отщепленных от широкой разрешенной зоны $E(\mathbf{k})$ вследствие рассеяния носителей на примесных центрах, вызывает значительное усиление РККИ-обмена в вырожденных материалах, в которых уровень Ферми лежит внутри разрешенной зоны. При этом для вычисления поправки к энергии системы, связанной с гамильтонианом возмущения H_1 , применялся метод усредненной по примесным конфигурациям матрицы рассеяния (метод средней t -матрицы) во втором порядке разложения по недиагональной в узельном представлении компоненте функции Грина гамильтониана H_0 . В нашем случае при рассмотрении обмена между моментами плоских дефектов на границах $z = \pm l$ ограничимся учетом лишь

диагональной в узельном представлении компоненты функции Грина гамильтониана H_0 и будем для простоты полагать, что обмен между моментами точечных дефектов внутри полупроводниковой прослойки несуществен (например, вследствие малости соответствующей компоненты электрон-примесного взаимодействия, $J_m S_m \ll V_m$). Везде далее считаем полупроводниковую прослойку невырожденной (отсутствуют свободные носители в разрешенной зоне, т.е. уровень Ферми лежит ниже ее края). Для исключения двукратного заполнения локализованных примесных состояний в гамильтониане (8) аналогично [9,10] для каждого примесного узла вводится „хаббардовское“ ($U > 0$) слагаемое, имеющее чисто технический характер.

3. Энергия межслоевой обменной связи

В отсутствие гибридизации между состояниями прослойки и интерфейса в нашей модели нет никакой обменной связи между моментами $\mathbf{M}(\pm l)$ на правой и левой границах прослойки. Рассматривая гамильтониан (4), (5) по теории возмущений и используя стандартную „примесную“ диаграммную технику [11,12] для функций Грина, получим поправки n -го порядка $\Delta\Omega_n$, пропорциональные V^n , в полный термодинамический потенциал системы Ω в форме разложения в ряд по степеням гибридизации V . Очевидно, что только коэффициенты при четных степенях этого ряда отличны от нуля. Слагаемые второго порядка по гибридизации $\Delta\Omega_2$ в интересующую нас энергию межслоевого обмена вклада не вносят, а первый ненулевой вклад появляется в четвертом порядке теории возмущений

$$\begin{aligned} \Delta\Omega_4 = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q}d\mathbf{q}'d\mathbf{q}''d\mathbf{q}'''}{(2\pi)^8} G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, -l) \\ & \times \left[V^*(\mathbf{q}, \mathbf{q}')V(\mathbf{q}''', \mathbf{q})\Gamma_1(\omega, \mathbf{q}', \mathbf{q}''', L)V^*(\mathbf{q}'', \mathbf{q}''')V(\mathbf{q}', \mathbf{q}'') \right. \\ & + \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} V^*(\mathbf{q}, \mathbf{q}')V(\mathbf{q}''' - \mathbf{p}, \mathbf{q})\Gamma_2(\omega, \mathbf{q}', \mathbf{q}''', \mathbf{p}, L) \\ & \left. \times V^*(\mathbf{q}'', \mathbf{q}''')V(\mathbf{q}' + \mathbf{p}, \mathbf{q}'') \right] G_i^{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{q}'', +l), \quad (9) \end{aligned}$$

где функция $V^*(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ комплексно сопряжена с $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$

$$\begin{aligned} \Gamma_1(\omega, \mathbf{q}', \mathbf{q}''', L) = & \int \frac{dk_z dq_z}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{1}{2} [G(\omega, \mathbf{q}', k_z) \right. \\ & \times G(\omega, \mathbf{q}''', k_z - q_z) + G(\omega, \mathbf{q}''', k_z)G(\omega, \mathbf{q}', k_z + q_z)] \\ & + x\Lambda(\omega) [G^2(\omega, \mathbf{q}', k_z)G(\omega, \mathbf{q}''', k_z - q_z) \\ & \left. + G^2(\omega, \mathbf{q}''', k_z)G(\omega, \mathbf{q}', k_z + q_z)] \right\} \exp(iq_z L), \quad (10) \end{aligned}$$

$$\Gamma_2(\omega, \mathbf{q}', \mathbf{q}''', \mathbf{p}, L) = x\Lambda^2(\omega)$$

$$\begin{aligned} & \times \int \frac{dk_z dk'_z dq_z}{(2\pi)^3} G(\omega, \mathbf{q}', k_z)G(\omega, \mathbf{q}''' - \mathbf{p}, k'_z - q_z) \\ & \times G(\omega, \mathbf{q}' + \mathbf{p}, k'_z + q_z)G(\omega, \mathbf{q}''', k'_z) \exp(iq_z L), \quad (11) \end{aligned}$$

где

$$\Lambda(\omega) = \frac{V_0}{2(1 - V_0 G_0(\omega))}, \quad G_0(\omega) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} G(\omega, \mathbf{k}).$$

Здесь мы ввели обозначения $G_i(\omega, \mathbf{q}, \pm l)$ и $G(\omega, \mathbf{k})$ соответственно для функций Грина „невозмущенных“ гамильтонианов интерфейсов (3), $G_i(\omega, \pm l) = [\omega + i0 - H_i(\pm l)]^{-1}$, и полупроводниковой прослойки (7), $G(\omega) = (\omega + i0 - H_0)^{-1}$, в импульсном представлении; ω — частота, $\Lambda(\omega)$ — одноцентровая амплитуда рассеяния на дефекте в пределе $|J_m S_m / V_m| \rightarrow 0$, причем мы положили $V_m = V_0$ для всех узлов m , $x \ll 1$ — концентрация дефектов. В настоящей работе все вычисления проводятся только при нулевой температуре $T = 0$, но в принципе аналогичная процедура может быть осуществлена и при конечной температуре $T \neq 0$ в рамках температурной диаграммной техники.

Детали громоздкого, но стандартного вывода формул (9)–(11) здесь не приводятся. Заметим только, что метод средней t -матрицы в применении к гамильтониану (8) имеет ряд технических особенностей; в частности, корректный переход к пределу немагнитного дефекта $|J_m S_m / V_m| \rightarrow 0$ может быть проведен только после суммирования всего диаграммного ряда в канале одноцентрового рассеяния и исключения двукратного заполнения локализованных примесных состояний [9,10].

Определим энергию межслоевой обменной связи $\Delta\Omega_{\text{ex}}$ как ту часть термодинамического потенциала $\Delta\Omega_4$, которая является билинейной формой от векторов намагниченности „правой,, и „левой“ обкладок,

$$\Delta\Omega_{\text{ex}} = I(L)\mathbf{M}(-l)\mathbf{M}(+l), \quad (12)$$

где $I(L)$ — обменный интеграл. Чтобы получить явное выражение для функции $I(L)$, упростим интегралы в формулах (9)–(11) следующим образом [8]. Основной вклад в интегралы по переменным $(\mathbf{q}', \mathbf{q}''', \mathbf{p}, k_z, k'_z, q_z)$ в выражениях (9)–(11) вносит область малых квазиимпульсов вблизи дна широкой зоны проводимости, где энергия квазичастиц мала, а на больших квазиимпульсах подынтегральные выражения быстро спадают. В то же время в интегралы по переменным $(\mathbf{q}, \mathbf{q}'')$ вносят вклад все почти бездисперсные интерфейсные состояния, в том числе с большими квазиимпульсами. Поэтому используем „среднеквадратичное“ приближение

$$\begin{aligned} & \int \frac{d\mathbf{q}''}{(2\pi)^2} V(\mathbf{q}, \mathbf{q}'')G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}'', \pm l)V^*(\mathbf{q}'', \mathbf{q}') \\ & \approx \gamma\Gamma^{\alpha\beta}(\omega, \pm l)\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (13) \end{aligned}$$

где

$$\Gamma^{\alpha\beta}(\omega, \pm l) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, \pm l),$$

$$\gamma = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V^*(\mathbf{K}_0^\perp, \mathbf{q}) V(\mathbf{q}, \mathbf{K}_0^\perp),$$

\mathbf{K}_0 — квазиимпульс, соответствующий экстремуму зоны проводимости, \mathbf{K}_0^\perp — проекция вектора \mathbf{K}_0 на плоскость (x, y) ; без ограничения общности примем $\mathbf{K}_0 = 0$. Таким образом, влияние интерфейсных состояний на объемные состояния прослойки описывается в приближении (13) с помощью введения зависящих только от частоты ω эффективных поверхностных потенциалов $\gamma\Gamma^{\alpha\beta}(\omega, \pm l)$. Отметим, что в нашей модели ширина разрешенной зоны в прослойке W значительно превышает ширину пика плотности интерфейсных состояний W_i ; при этом уровень Ферми лежит вблизи этого пика и находится ниже края разрешенной зоны.

Далее при интегрировании в выражениях (9)–(11) по частоте ω запишем вершинную функцию $\Lambda(\omega)$ в „резонансном“ приближении, имея в виду, что потенциал $V_0 < 0$ отщепляет от разрешенной зоны однократно занятое локализованное состояние с энергией $E_0 = -|E_0| < 0$, $|E_0| \ll W$,

$$\Lambda(\omega) \approx \frac{|\partial G_0(E_0)/\partial E_0|^{-1}}{2(\omega - E_0)}, \quad (14)$$

где величина E_0 определяется из соотношения

$$1 - V_0 G_0(E_0) = 0. \quad (15)$$

Принимая во внимание то обстоятельство, что в формировании уровня E_0 вносят вклад все, а не только лежащие вблизи края состояния трехмерной разрешенной зоны полупроводниковой прослойки, грубо оценим $|\partial G_0(E_0)/\partial E_0| \approx N_0/|E_0|$, где N_0 — средняя по зоне плотность электронных состояний.

Указанные предположения позволяют существенно упростить выражение для интеграла $I(L)$

$$I(L) \approx I_1(L) + I_2(L) + I_3(L), \quad (16)$$

$$I_1(L) = \frac{J_i^2 \gamma^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \times \int \frac{d\mathbf{q} dk_z dp_z}{(2\pi)^4} D^2(\omega) A(\omega, \mathbf{q}, k_z, p_z) \exp(ip_z L), \quad (17)$$

$$I_2(L) = x \frac{J_i^2 \gamma^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \times \int \frac{d\mathbf{q} dk_z dp_z}{(2\pi)^4} D^2(\omega) B(\omega, \mathbf{q}, k_z, p_z) \exp(ip_z L), \quad (18)$$

$$I_3(L) = x \frac{J_i^2 \gamma^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{q}' dk_z dk'_z dp_z}{(2\pi)^7} \times D^2(\omega) C(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}', k_z, k'_z, p_z) \exp(ip_z L), \quad (19)$$

где

$$A(\omega, \mathbf{q}, k_z, p_z) = \frac{1}{2} [G(\omega, \mathbf{q}, k_z) G(\omega, \mathbf{q}, k_z + p_z) + G(\omega, \mathbf{q}, k_z) G(\omega, \mathbf{q}, k_z - p_z)],$$

$$B(\omega, \mathbf{q}, k_z, p_z) = \frac{|E_0|}{2N_0(\omega - E_0)} [G^2(\omega, \mathbf{q}, k_z) \times G(\omega, \mathbf{q}, k_z + p_z) + G^2(\omega, \mathbf{q}, k_z) G(\omega, \mathbf{q}, k_z - p_z)],$$

$$C(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}', k_z, k'_z, p_z) = \frac{E_0^2}{4N_0^2(\omega - E_0)^2} G(\omega, \mathbf{q}, k_z) \times G(\omega, \mathbf{q}, k_z + p_z) G(\omega, \mathbf{q}', k'_z) G(\omega, \mathbf{q}', k'_z - p_z),$$

$$G(\omega, \mathbf{q}, k_z) = \frac{1}{\omega - E(\mathbf{k})},$$

$$D(\omega) = \int \frac{d\varepsilon N_i(\varepsilon)}{(\omega - \varepsilon)^2 - (J_i M)^2}.$$

В последнем соотношении введена величина $N_i(\varepsilon)$ — плотность состояний в интерфейсном слое. При моделировании формы $N_i(\varepsilon)$ ограничимся приближением локального интерфейсного уровня с энергией ε_i , так что $N_i(\varepsilon) \cong n_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i)$, $\delta(\varepsilon)$ — дельта-функция, n_i — число состояний, формирующих пик; энергию ε_i отсчитываем от дна зоны проводимости, т.е. $\varepsilon_i = -|\varepsilon_i| < 0$, и для определенности полагаем $J_i M = |J_i M| > 0$. Для расщепленных по спину интерфейсных состояний считаем, что уровень „спин вверх“ с энергией $-(|\varepsilon_i| + |J_i M|)$ заполнен, а уровень „спин вниз“ с энергией $-(|\varepsilon_i| - |J_i M|)$ пуст. Приближение локального интерфейсного уровня обосновано, если ширина пика $W_i \ll (W, |J_i, M|)$.

4. Асимптотическое поведение обменных интегралов

Интегралы (17)–(19) могут быть рассчитаны аналитически и записаны в форме крайне громоздких выражений, содержащих специальные функции и пригодных только для численного анализа. Далее ограничимся рассмотрением качественных особенностей влияния примесного рассеяния на МОС в асимптотическом пределе толстой прослойки и проанализируем некоторые предельные случаи.

Слагаемое (17), которое описывает АФМ-суперобмен в системе с чистой невырожденной прослойкой, было рассчитано в работе [8], и асимптотическое поведение функции $I_1(L)$ имеет вид

$$I_1(L) \approx \frac{J_i^2 \gamma^2 n_i^2 m^2}{16\pi (J_i M)^2} \frac{1}{(|\varepsilon_i| + |J_i M|)} \exp(-L/L_i) \quad (20)$$

при $L/L_i \gg 1$, где $L_i = (2\sqrt{2m(|\varepsilon_i| + |J_i M|)})^{-1}$ — характерный масштаб затухания интерфейсного состояния в глубь прослойки, m — эффективная масса электрона. Вклад (20) возникает благодаря взаимодействию намагниченностей соседних ФМ-слоев через виртуальные переходы электронов с интерфейсных состояний (один

электрон от каждой границы, но с различной спиновой поляризацией) в зону проводимости полупроводника. Вследствие гибридизации с зонными состояниями прослойки интерфейсные состояния, изначально локализованные на длине нескольких монослоев вдоль оси роста структуры, частично делокализуются, а их волновые функции приобретают „хвосты“ длиной $\sim L_i/2$, сравнимые с толщиной прослойки. При этом в меру перекрытия этих „хвостов“ возникает длинноволновый вклад в межслоевой обмен, затухающий на масштабе, значительно превышающем параметр решетки полупроводника, $L_i \gg a$, и отличный от нуля даже в отсутствие свободных носителей в прослойке. Напомним, что формальный переход $|J_i M| \rightarrow 0$ в формуле (20) некорректен, так как условием ее применимости является соотношение $|J_i M| \gg W_i$.

Слагаемые (18) и (19), пропорциональные концентрации дефектов x , описывают соответственно виртуальные одночастичные и двухчастичные переходы между интерфейсными и зонными состояниями через промежуточные примесные состояния. Как нетрудно видеть, вклад двухчастичных процессов (9) всегда дает усиление АФМ-компоненты МОС, так как $I_3(L) > 0$, но характер вклада одночастичных процессов (18), т.е. знак $I_2(L)$, определяется положением примесного уровня E_0 по отношению к интерфейсным уровням $\varepsilon_i \pm J_i M$ и уровню Ферми μ . В нашей модели считаем величину $\mu = -|\mu| < 0$ фиксированным параметром, задаваемым внешним „резервуаром“ (металлическими обкладками железа) и лежащим в интервале $-|\varepsilon_i| - |J_i M| < \mu < -|\varepsilon_i| + |J_i M|$. Если уровень E_0 пуст ($E_0 > \mu$), то вклад слагаемого (18) в интеграл МОС положителен, т.е. происходит усиление АФМ-компоненты МОС. Если же уровень E_0 занят ($E_0 < \mu$), знак слагаемого (18) меняется на противоположный, т.е. возникает ФМ-компонента МОС.

Вначале обсудим ситуацию, когда примесный уровень пуст и лежит гораздо ближе к краю разрешенной зоны, чем занятый уровень „спин вверх“ интерфейсных состояний, т.е. $|E_0| \ll |\varepsilon_i| + |J_i M|$. Для оценки интеграла $I_2(L)$ в асимптотическом приближении по толщине прослойки ($L/L_i \gg 1$) можно получить

$$I_2(L) \approx x \frac{J_i^2 \gamma^2 n_i^2 m^2}{64\pi (J_i M)^2} \frac{|E_0|(L/L_i)}{N_0(|\varepsilon_i| + |J_i M|)^3} \exp(-L/L_i). \quad (21)$$

Таким образом, происходит усиление АФМ-компоненты МОС, пропорциональное концентрации дефектов.

Далее рассмотрим случай, когда примесный уровень занят и лежит гораздо дальше от края разрешенной зоны, чем уровень „спин вверх“ интерфейсных состояний, т.е. $|E_0| \gg |\varepsilon_i| + |J_i M|$. При условии $L/L_i \gg 1$ имеем

$$I_2(L) \approx -x \frac{J_i^2 \gamma^2 n_i^2 m^2}{64\pi N_0 (J_i M)^2} \frac{L/L_i}{(|\varepsilon_i| + |J_i M|)^2} \exp(-L/L_i), \quad (22)$$

т.е. добавка к интегралу МОС по сравнению с (21) меняет знак с АФМ на ФМ, но характерная длина обмена L_i остается прежней.

Наконец, когда примесный уровень занят и лежит гораздо ближе к краю разрешенной зоны, чем уровень „спин вверх“ интерфейсных состояний, т.е. $|E_0| \ll |\varepsilon_i| + |J_i M|$, при больших толщинах прослойки получаем

$$I_2(L) \approx -x \frac{J_i^2 \gamma^2 n_i^2 m^2}{8\pi N_0 (\varepsilon_i^2 - (J_i M)^2)^2} \exp(-L/L_0), \quad (23)$$

где $L/L_0 \gg 1$, а $L_0 = (2\sqrt{2m|E_0|})^{-1}$ — характерная длина затухания примесного состояния в прослойке, причем $L_0 \gg L_i$. В итоге самая длинноволновая компонента МОС оказывается ФМ-типа, что формально может привести к смене знака полного интеграла межслоевого обмена (16) при $L \gg L_0 \gg L_i$.

Пользуясь формулами (14), можно показать, что вклад в МОС слагаемого (19) мал по сравнению со слагаемым (18) в меру параметра $\frac{N(|E_0|)}{N_0} \approx \sqrt{|E_0|/W} \ll 1$. Конечно, малость данного параметра довольно условна, но все же можно надеяться, что для качественных оценок допустимо пренебречь вкладом (19) в интеграл МОС по сравнению с (18).

5. Заключение

В настоящее время отсутствуют надежные данные туннельных, магнитотранспортных и магнитооптических измерений в структурах железо–кремний с сильно неоднородными прослойками, для описания которых предназначена наша модель. Нам, строго говоря, неизвестны ни распределение дефектов внутри прослойки, ни положение интерфейсных и примесных уровней. Поэтому анализ соотношения различных вкладов в МОС (17)–(19) для обсуждаемых структур может быть выполнен лишь косвенным образом. Можно предположить, например, следующий простой сценарий изменения межслоевого обмена в зависимости от расстояния между слоями железа. При толщине прослойки $L > L^* = 2l^*$, где l^* — характерная ширина переходного слоя, когда эффектами интердиффузии и перетекания заряда вблизи интерфейса можно пренебречь, преобладающую роль в МОС играет АФМ-суперобмен между интерфейсными состояниями через широкую зону (20), возможно усиленный за счет непрямого туннелирования через незаполненные примесные состояния (21). С уменьшением толщины прослойки при $L < L^*$ важную роль в МОС могут начать играть примесные состояния в переходной области вблизи интерфейсов, занятые вследствие перетекания заряда между металлом и полупроводником, и тогда возникает конкуренция между АФМ- (20) и ФМ- (22), (23) компонентами суперобмена, что может привести, особенно в ситуации (23), к смене знака МОС.

Из предложенной выше схемы следует, что в образцах типа [3] происходило формирование значительного по толщине и обогащенного дефектами переходного слоя, соответствующего $L^* \approx 18\text{--}20 \text{ \AA}$. В то же время в образцах типа [1,2] толщина такого слоя, судя по

всему, довольно мала ($L^* < 5-6 \text{ \AA}$). Заметим, кстати, что недавно наличие переходного слоя в мультислоях Fe/Si было прямо подтверждено магнитными измерениями [13]. При этом в нашем подходе прослойка остается диэлектрической при всех толщинах в отличие от предложенного в [5] механизма ФМ МОС, связанного с появлением внутри этой прослойки сетки проводящих мостиков.

Список литературы

- [1] D.E. Bürgler, M. Buchmeier, S. Cramm, S. Eisbitt, R.R. Gareev, P. Grünberg, C.L. Jia, L.L. Pohlmann, R. Schreiber, M. Siegel, Y.L. Qin, A. Zimina. *J. Phys.: Cond. Matter* **15**, S 443 (2003).
- [2] B.K. Kuanr, M. Buchmeier, R.R. Garrev, D.E. Bürgler, R. Schreiber, P. Grünberg. *J. Appl. Phys.* **93**, 3427 (2003).
- [3] Г.С. Патрин, С.Г. Овчинников, Д.А. Великанов, В.П. Кононов. *ФТТ* **43**, 1643 (2001).
- [4] J.J. de Vries, J.T. Kohlhepp, F.J.A. den Broeder, R. Coehoorn, R. Jungblut, A. Reinders, W.J.M. de Jonge. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3023 (1997); M. Schleberger, P. Walser, M. Hunziker, M. Landolt. *Phys. Rev. B* **60**, 14 360 (1999); G. Strijkers, J.T. Kohlhepp, H.G. Swagten, W.J.M. de Jonge. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1812 (2000).
- [5] R.R. Gareev, D.E. Bürgler, M. Buchmeier, R. Schreiber, P. Grünberg. *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1264 (2002); R.R. Gareev, M. Weides, R. Schreiber, U. Poppe. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 172 105 (2006).
- [6] J.C. Slonczewsky. *Phys. Rev. B* **39**, 6995 (1989); P. Bruno. *Phys. Rev. B* **52**, 411 (1995).
- [7] M.Ye. Zhuralev, E.Y. Tsybal, A.V. Vedyayev. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 026 806 (2005).
- [8] В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев. *ЖЭТФ* **130**, 89 (2006).
- [9] J. Inoue, S. Nonoyama, H. Itoh. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4610 (2000).
- [10] J. Inoue. *Phys. Rev. B* **67**, 125 302 (2003).
- [11] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Наука, М. (1962). 443 с.
- [12] Г. Эренрейх, Л. Шварц. *Электронная структура сплавов*. Мир, М. (1979). 200 с.
- [13] С.Н. Варнаков, Ж. Бартоломе, Ж. Сесе, С.Г. Овчинников, С.В. Комогорцев, А.С. Паршин, Г.В. Бондаренко. *ФТТ* **49**, 1401 (2007).