

# МЕЖСЛОЕВАЯ ОБМЕННАЯ СВЯЗЬ В НАНОСТРУКТУРАХ ЖЕЛЕЗО/КРЕМНИЙ

*В. Н. Меньшов\*, В. В. Тугушев\*\**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 февраля 2006 г.

Для наноструктур типа Fe/Si рассмотрен суперобменный механизм межслоевой обменной связи. Предполагается, что важнейшую роль в этом механизме играют границы раздела слоев железа и кремния, в непосредственной близости от которых формируется «контактно-индуцированная» ферромагнитная фаза объемно-центрированного моносилицида железа, и возникают поляризованные по спину интерфейсные состояния. Магнитная связь между слоями железа осуществляется путем взаимодействия интерфейсных состояний через прослойку нормального полупроводника и включает как внутризонные, так и межзонные процессы. При этом немонотонный характер зависимости межслоевой обменной связи от толщины и состава прослойки (наличие максимума, изменение формы, возможная смена знака билинейной компоненты) обусловлен конкуренцией ферро- и антиферромагнитных составляющих суперобмена и сложным характером электронного спектра прослойки (в частности, наличием нескольких эквивалентных экстремумов полупроводниковых зон). Данная модель позволяет на качественном уровне воспроизвести основные черты механизма межслоевой обменной связи в реальных наноструктурах типа Fe/Si.

PACS: 75.70.-i, 75.50.Bb, 75.75.+a

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы слоистые структуры типа Fe/Si стали объектом пристального изучения вследствие их необычных и во многих отношениях непонятных магнитных свойств. Подавляющее число работ было посвящено системам с кристаллографической ориентацией (001) вдоль оси роста (см., например, статью [1] и ссылки в ней). Значительные усилия были предприняты для того, чтобы понять механизм магнитного взаимодействия слоев Fe через прослойку Si и построить модель межслоевой обменной связи (МОС) в обсуждаемых структурах, однако результаты данных исследований остаются крайне противоречивыми.

Интенсивность МОС принято характеризовать эффективными параметрами — билинейным  $J_1(L)$  и биквадратичным  $J_2(L)$  интегралами межслоевого обмена, зависящими от толщины прослойки  $L$ . В феноменологическом выражении для обменной энергии слоистой структуры эти интегралы явля-

ются коэффициентами соответственно при билинейном и биквадратичном по магнитным моментам соседних слоев Fe слагаемых. Заметим, что величина  $J_2(L)$  в указанных системах всегда является положительной, тогда как  $J_1(L)$  может быть как положительной, так и отрицательной; ниже, для определенности, принимаем  $J_1(L) > 0$  для антиферромагнитного (АФМ) и  $J_1(L) < 0$  для ферромагнитного (ФМ) типа МОС. Весьма интригующими особенностями обменной связи в структурах типа Fe/Si являются сильно немонотонная зависимость интегралов  $J_{1,2}(L)$  от толщины прослойки  $L$ , а также возможная смена знака  $J_1(L)$  при изменении  $L$ . В дальнейшем там, где это не вызовет недоразумений, будем употреблять для интеграла  $J_1(L)$  упрощенное обозначение  $J(L)$ .

Антиферромагнитный характер интеграла  $J(L)$  при значениях  $L > 10\text{--}15 \text{ \AA}$  надежно установлен различными группами исследователей, но детали поведения  $J(L)$ , особенно при значениях  $L < 10\text{--}15 \text{ \AA}$ , сильно различаются и остаются неясными. Очень слабая АФМ МОС была найдена в работе [2], но в то же время аномально сильная АФМ МОС наблю-

\*E-mail: vnmenshov@mail.ru

\*\*E-mail: vvtugushev@mail.ru

далась в [3, 4], причем величина  $J(L)$  экспоненциально и монотонно возрастала с уменьшением  $L$ . В других экспериментах имел место ярко выраженный максимум  $J(L)$  при некоторой характерной толщине прослойки  $L_{max}$ , лежащей в широком диапазоне значений, примерно от 8–10 Å до 18–25 Å [1, 5]. Более того, в работе [5] были зафиксированы не только сильное возрастание, а затем резкое убывание  $J(L)$  с уменьшением  $L$ , но также смена знака  $J(L)$  (т. е. переход от АФМ-типа к ФМ-типу МОС) при значениях  $L < 10$ –15 Å. Впрочем, эти результаты, насколько нам известно, не были подтверждены другими группами экспериментаторов. В работах [4, 6–8] наряду с обычным билинейным вкладом в энергию межслоевого обмена был также обнаружен сильный биквадратичный вклад, дискуссия о природе которого не выявила единого понимания ситуации.

Интерпретация экспериментальных данных [2–8] в стандартных терминах туннелирования спин-поляризованных электронов между слоями ферромагнитного металла через тонкую прослойку немагнитного диэлектрика (см. [9]) сильно усложнена из-за значительной неконтролируемой диффузии железа через интерфейс Fe/Si в процессе роста структур. Вследствие такой диффузии внутри прослойки кремния практически по всей ее толщине происходит формирование силицидов железа ( $Fe_{1-x}Si_x$ ) различного состава, от простейшего моносилцида (*c*-FeSi) со структурой объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетки до более сложных соединений [10], т. е. состав материала прослойки в указанных экспериментах остается, по сути дела, неизвестен. Качественно новый уровень понимания особенностей МОС достигнут в исследованиях [1, 11–14] многослойных структур типа Fe/ $Fe_{1-x}Si_x$  с контролируемым составом ( $0.5 < x < 1$ ) силицида железа, выращенных по специальной технологии методом молекулярно-лучевой эпитаксии из двух источников. Экспоненциальное убывание интеграла  $J(L)$  при больших значениях  $L$  наблюдалось во всем диапазоне составов  $x$ , причем для прослоек с низким содержанием Si, когда значение  $x$  близко к 0.5, имел место плавный максимум МОС при  $L \approx 10$ –11 Å.

Сильное (в несколько раз) возрастание  $J(L)$ , а также смещение пика зависимости  $J(L)$  в область толщин  $L \approx 7$ –8 Å и его заметное сужение наблюдались с ростом содержания Si в прослойке, когда значение  $x$  близко к 1. Таким образом, оказалось, что диффузия железа в прослойку не усиливает, а наоборот, значительно подавляет интенсивность МОС, что прямо противоречит стандартному «туннельному» механизму [9]. Действительно, хорошо известно

(см., например, [11]), что твердые растворы  $Fe_{1-x}Si_x$  при  $0.5 < x < 1$  являются либо полуметаллами, либо полупроводниками с шириной запрещенной зоны, заведомо меньшей, чем в чистом кремнии. Казалось бы, что с увеличением содержания Si в прослойке высота энергетического барьера для электронов, туннелирующих между металлическими обкладками через слой диэлектрика, должна возрастать, и, следовательно, интеграл туннелирования и пропорциональная ему величина  $J(L)$  — резко убывать при любой толщине  $L$  из-за уменьшения де-Бройлевской длины волны электрона в диэлектрике. Эксперименты [1, 11–14], в которых наблюдалось прямо противоположное поведение  $J(L)$  с изменением параметра  $x$ , заставили задуматься об истинном механизме МОС в структурах Fe/Si и инициировали наш интерес к данным объектам.

Различные теоретические подходы к проблеме МОС в системах типа ферромагнитный металл/немагнитный диэлектрик, базирующиеся на механизме туннелирования спин-поляризованных квазичастиц через эффективный потенциальный барьер, неоднократно предлагались в литературе. Например, в простейшей модели [15] для расчета интеграла МОС использовалось приближение газа свободных электронов, туннелирующих через прямоугольный барьер, а в более сложной «электронно-оптической» модели [16] применен метод расчета асимметричных по спину парциальных коэффициентов отражения электронных волн различной угловой симметрии при их квантовой интерференции на границе раздела парамагнетик/ферромагнетик. Обе эти феноменологические модели предсказывают знак и монотонное экспоненциальное уменьшение  $J(L)$  с ростом толщины  $L$ , но не способны объяснить наличие максимума функции  $J(L)$ , наблюдаемого в структурах типа Fe/Si. В то же время в схеме [17], базирующейся на расширенной обменной *s-d*-модели, показано, что уменьшение интеграла  $J(L)$  с ростом  $L$  не всегда является строго монотонным. В зависимости от конкретной зонной структуры и кристаллографической ориентации полупроводниковой прослойки функция  $J(L)$  может содержать осциллирующие компоненты и даже быть знакопеременной; иными словами, характер обмена может меняться с АФМ на ФМ и наоборот. Как хорошо известно, такое поведение взаимодействия  $J(L)$  характерно для структур типа ферромагнитный металл/немагнитный металл, где механизм МОС определяется взаимодействием типа РККИ. В модели свободного электронного газа функция  $J(L)$  осциллирует с периодом, определяемым топологией по-

верхности Ферми материала прослойки [18], а в схеме так называемых «слоев Андерсона» предсказывается АФМ-смещение этих осцилляций [19]. В структурах типа  $\text{Fe}/\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  выраженные осцилляции  $J(L)$  наблюдались лишь в случае специально выращенных и заведомо металлических прослоек с высоким содержанием железа ( $x < 0.5$ ), но никогда — в случае полупроводниковых или полуметаллических прослоек с  $x > 0.5$  [1].

Таким образом, можно констатировать, что понимание механизма МОС в структурах типа ферромагнитный металл/немагнитный полупроводник (полуметалл) вообще и  $\text{Fe}/\text{Si}$  в частности остается серьезной проблемой, не нашедшей адекватного объяснения в рамках существующих подходов. Не претендуя в данной работе на какие-либо общие выводы, заметим, что принципиальные сложности, возникающие на пути понимания механизма МОС в реальных слоистых структурах типа  $\text{Fe}/\text{Si}$ , состоят, по нашему мнению, в следующем.

Во-первых, даже в отсутствие диффузии железа в прослойку сильное влияние на характер МОС оказывает перераспределение зарядовой и спиновой плотностей вблизи интерфейса железо/кремний. Поэтому, в частности, необходимо принять во внимание возможность возникновения специфических поверхностных состояний, заполнение и спиновая поляризация которых заметно отличаются от аналогичных характеристик состояний внутри прослойки.

Во-вторых, образующиеся в прослойке при диффузии железа силициды  $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  являются сильно легированными магнитными полупроводниками или полуметаллами со сложной зонной структурой, которую следует учитывать при построении модели МОС и расчете функции  $J(L)$ .

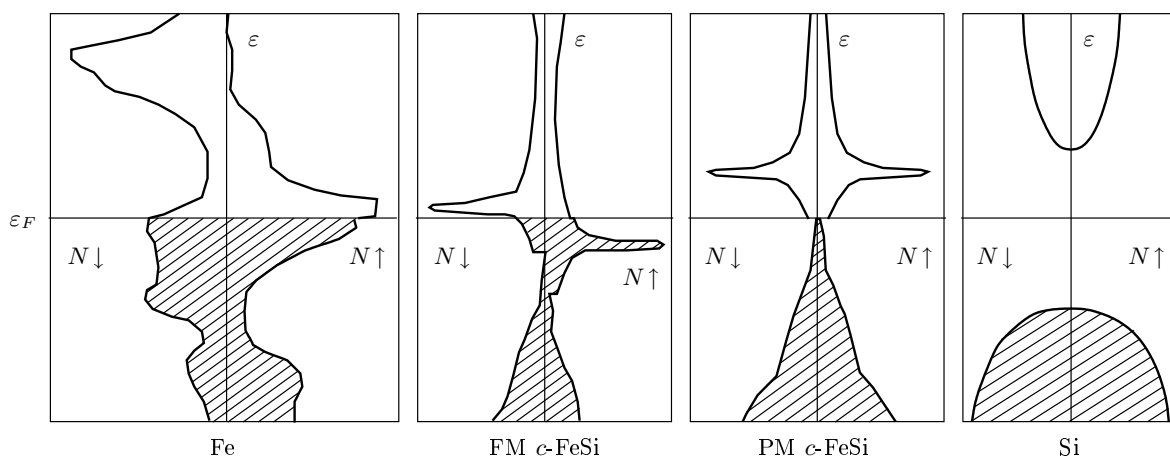
Ниже мы попытаемся хотя бы качественно учесть данные особенности рассматриваемой системы.

## 2. ПОВЕРХНОСТНЫЕ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И КОНТАКТНО-ИНДУЦИРОВАННЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИЗМ НА ИНТЕРФЕЙСЕ ЖЕЛЕЗО/КРЕМНИЙ

В экспериментах по дифракции электронов с малой энергией (LEED) [1] было показано, что рост сверхтонких (менее  $5 \text{ \AA}$ ) слоев  $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  на подложке  $\text{Fe}(001)$  даже при  $x \approx 1$  (т. е. для номинально чистого кремния) является псевдоморфическим. Этот факт также отмечался в более ранних экспериментах по рентгеновской фотоэлектронной спектроско-

пии (см. вторую из работ [3]). Иными словами, имеет место хорошая совместимость кристаллических решеток металла ( $\text{Fe}$ ) и полупроводника ( $\text{Si}$ ) с образованием почти идеально гладкого интерфейса между ними, что само по себе довольно любопытно для обсуждаемой системы. Формально возможным, но крайне маловероятным нам представляется предположение о существовании вблизи интерфейса слоя кремния с метастабильной ОЦК-решеткой (кстати, такой ОЦК-кремний был бы, по-видимому, хорошим металлом). Поэтому в данной работе мы обсудим более реалистичный сценарий, объясняющий данные по LEED [1], при котором за счет химической реакции на интерфейсе  $\text{Fe}/\text{Si}$  происходит формирование тонкого промежуточного слоя силицида железа  $c\text{-FeSi}$  с ОЦК-решеткой. Толщина этого слоя составляет менее  $5 \text{ \AA}$  в случае наноструктур  $\text{Fe}/\text{Si}$  с подавленной диффузией железа в прослойку кремния и может достигать  $10\text{--}14 \text{ \AA}$ , если процесс диффузии идет интенсивно. Межслоевое расстояние для силицида  $c\text{-FeSi}$ , оцениваемое как  $1.43 \text{ \AA}$ , очень близко к соответствующей величине для ОЦК-железа, так что вполне естественно рассматривать это соединение в качестве реального кандидата на роль промежуточного слоя. Как показано в работе [20], модификация  $c\text{-FeSi}$  — это парамагнитный полуметалл, имеющий очень малую плотность электронных состояний (ПЭС) на уровне Ферми и резкий пик ПЭС, лежащий на  $0.2\text{--}0.3 \text{ эВ}$  выше уровня Ферми. Данная модификация неустойчива в форме объемного монокристалла относительно структурного перехода в более сложную, с точки зрения симметрии кристаллической решетки, модификацию  $\varepsilon\text{-FeSi}$ , которая является почти магнитным полупроводником с очень узкой ( $\sim 0.05 \text{ эВ}$ ) запрещенной зоной. Природа магнитных и структурных превращений в  $\varepsilon\text{-FeSi}$  нас здесь не интересует, поэтому мы не будем обсуждать результаты многолетней и противоречивой дискуссии по данному вопросу.

Примечательно, что модификация  $c\text{-FeSi}$  оказывается стабильной в форме тонкого слоя на поверхности  $\text{Fe}$  благодаря отмеченной выше хорошей согласованности параметров решеток  $\text{Fe}$  и  $c\text{-FeSi}$ . Очевидно, что как заполнение, так и спиновая поляризация электронных состояний в таком слое и в объемном монокристалле  $c\text{-FeSi}$  могут значительно отличаться друг от друга. Наше принципиальное предположение заключается в том, что в прилегающем к границе с  $\text{Fe}$  тонком промежуточном слое  $c\text{-FeSi}$  на масштабе нескольких постоянных решетки происходит сильное перераспределение зарядовой и спиновой плотностей. Это перераспределение индуцирует



Схематическое представление структуры плотности состояний  $N_{\uparrow\downarrow}(\epsilon)$  в переходной области от слоя железа к слою кремния: Fe — слой Fe; FM  $c$ -FeSi — поляризованный слой силицида ФМ  $c$ -FeSi; PM  $c$ -FeSi — слой парамагнитного силицида ПМ  $c$ -FeSi; Si — слой кремния Si. Подзоны с различной спиновой поляризацией,  $\uparrow$  или  $\downarrow$ , показаны соответственно на правом и левом фрагментах. Состояния, лежащие ниже уровня Ферми  $\epsilon_F$ , заштрихованы

ся спин-зависимым поверхностным потенциалом, содержащим кулоновскую и обменную составляющие. При перетекании электронов из слоя Fe в слой  $c$ -FeSi кулоновская составляющая поверхностного потенциала изгибает зоны и сдвигает вниз по шкале энергий узкий пик ПЭС в силициде  $c$ -FeSi; в то же время обменная составляющая расщепляет этот пик по спину. В результате, как схематически представлено на рисунке, в области интерфейса Fe/Si образуется двойной заряженный слой (избыточный положительный заряд на Fe и отрицательный — на  $c$ -FeSi), и вблизи уровня Ферми формируются узкие спин-поляризованные подзоны. Для состояний в этих подзонах будем также употреблять термин «интерфейсные состояния», причем, согласно нашему сценарию, состояния со спином, направленным вверх, являются заполненными, а со спином, направленным вниз, — пустыми. Структура плотности электронных состояний в различных слоях схематически изображена на рисунке.

Иными словами, согласно нашей модели, на интерфейсе Fe/Si за счет эффекта близости к слою Fe возникает тонкий промежуточный слой «контактно-индуцированной» ФМ-фазы  $c$ -FeSi. Заметим, что похожий эффект индуцирования ФМ-порядка под влиянием сильного внешнего магнитного поля обсуждался в статьях [21] для упоминавшегося выше объемного моносилицида железа  $\epsilon$ -FeSi. Согласно расчетам [21], наведенная внешним полем объемная ФМ-фаза  $\epsilon$ -FeSi возникает из парамагнитной фазы путем метамагнитного перехода, который сопро-

вождается трансформацией зонной структуры типа полупроводник–металл. В нашем случае, естественно, никакого фазового перехода не происходит, а ФМ-фаза  $c$ -FeSi образуется в форме тонкого поверхностного слоя вблизи интерфейса Fe/Si в процессе роста наноструктуры.

Вообще говоря, для обозначения рассматриваемого сложного интерфейса следовало бы ввести следующие формально строгие обозначения:

- а) Fe/(ФМ  $c$ -FeSi)/Si, если диффузия Fe слабая и промежуточный слой «контактно-индуцированной» ФМ-фазы пространственно почти совпадает со слоем силицида  $c$ -FeSi;
- б) Fe/(ФМ  $c$ -FeSi)/(ПМ  $c$ -FeSi)/Si, если диффузия Fe сильная и в глубине прослойки остается не затронутый эффектом близости слой парамагнитного силицида ПМ  $c$ -FeSi.

Для простоты, однако, будем придерживаться упрощенного традиционного обозначения Fe/Si там, где это не вызовет недоразумений, и перейдем к последовательному построению микроскопической модели МОС в «трехслойной» системе Fe/Si/Fe(001).

### 3. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Рассмотрим слой немагнитного полупроводника с номинальной толщиной  $L = 2l$ , помещенный между двумя слоями ферромагнитного металла. Ось  $z$  направим вдоль направления роста наноструктуры, т. е. перпендикулярно плоскости интерфейса металл/полупроводник, который предполагаем идеаль-

но 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:

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

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

где  $a^+$  и  $a$  — операторы рождения и уничтожения квазичастиц с энергией  $E_i(\mathbf{q}, \pm l)$ ;  $\mathbf{q}$  — двумерный квазиимпульс в плоскости интерфейса  $(x, y)$ , ортогональной к оси  $\mathbf{z}$ ;  $J_i(\pm l)$  — обменный интеграл между состояниями ФМ и промежуточного слоев;  $\mathbf{M}(\pm l)$  — вектор намагниченности на правой (+) и левой (–) ФМ-обкладках, соответственно;  $\boldsymbol{\sigma}$  — вектор, составленный из матриц Паули;  $(\alpha, \beta)$  — спиновые индексы. Ниже предполагается, что величины  $E_i(\mathbf{q}, \pm l)$  и  $J_i(\pm l)$  идентичны для обоих интерфейсов:

$$E_i(\mathbf{q}, +l) = E_i(\mathbf{q}, -l) = E_i(\mathbf{q}), \quad J_i(+l) = J_i(-l) = J_i.$$

Модули векторов  $\mathbf{M}(\pm l)$  также одинаковы, но их направления  $\mathbf{e}(\pm l)$  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

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

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

где  $b_m^+$  и  $b_m$  — операторы рождения и уничтожения квазичастиц для состояний прослойки в  $m$ -й зоне с законом дисперсии  $E_m(\mathbf{k})$ ,  $k_z$  — проекция трехмерного квазиимпульса  $\mathbf{k} = (\mathbf{q}, k_z)$  на ось  $\mathbf{z}$ ,  $V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \pm l)$  — матричные элементы периодического в плоскости  $(x, y)$  потенциала гибридизации на интерфейсах, которые считаем равными, так что  $V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}', +l) = V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -l) = V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ . Следует заметить, что величина  $V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ , в принципе, отлична от нуля при произвольном соотношении между векторами  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{q}'$ , поскольку состояния прослойки

и интерфейсные состояния принадлежат к неприводимым представлениям различных групп пространственной симметрии.

Гамильтониан объемных состояний прослойки  $H_b$  имеет вид

$$H_b = \sum_{m, \alpha} \int d\mathbf{k} b_{m, \alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) E_m(\mathbf{k}) b_{m, \alpha}(\mathbf{k}). \quad (6)$$

Ниже мы ограничимся рассмотрением двухзонной модели ( $m = V, C$ ) невырожденного полупроводника. Предполагаем, что широкая валентная зона (со спектром  $E_V(\mathbf{k})$ ) и широкая зона проводимости (со спектром  $E_C(\mathbf{k})$ ) имеют максимум и минимум соответственно в точках  $\mathbf{K}_V$  и  $\mathbf{K}_C$  в первой зоне Бриллюэна. Вблизи этих точек спектры можно представить в виде

$$E_V(\mathbf{k}) = E_V(\mathbf{K}_V) - \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{K}_V)^2}{2m_V}, \\ E_C(\mathbf{k}) = E_C(\mathbf{K}_C) + \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{K}_C)^2}{2m_C}, \quad (7)$$

где  $m_{V, C}$  — соответствующие эффективные массы. При этом считаем, что ширина каждой зоны,  $W_V \sim W_C \gg E_g$ , велика по сравнению с шириной запрещенной зоны (в общем случае, не прямой),  $E_g = E_C(\mathbf{K}_C) - E_V(\mathbf{K}_V)$ .

#### 4. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И ЭНЕРГИЯ МОС

Из структуры гамильтониана (1)–(6) очевидно, что в отсутствие гибридизации (4), (5) нет никакой связи между интерфейсными состояниями на правой и левой границах прослойки. Рассматривая (4) по теории возмущений и используя стандартную технику функций Грина [22], получим поправку  $\Delta\Omega$  в полный термодинамический потенциал системы  $\Omega$  в форме разложения по степеням потенциала гибридизации  $V$ . Очевидно, что только коэффициенты при четных степенях этого ряда отличны от нуля. В четвертом порядке теории возмущений имеем

$$\Delta\Omega = \Delta\Omega_2 + \Delta\Omega_4, \quad (8)$$

$$\Delta\Omega_2 = \frac{1}{2} \sum_{m, \alpha} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{q}'}{(2\pi)^4} V_m^*(\mathbf{q}, \mathbf{q}') V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \times \\ \times [G_i^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}, -l) G_m^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}', 0) + \\ + G_i^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}, +l) G_m^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}', 0)], \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Delta\Omega_4 = \frac{1}{4} \sum_{mn,\alpha\beta} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{q}' d\mathbf{q}'' d\mathbf{q}'''}{(2\pi)^8} \times \\ \times V_m^*(\mathbf{q}, \mathbf{q}') V_m(\mathbf{q}', \mathbf{q}'') V_n^*(\mathbf{q}'', \mathbf{q}''') V_n(\mathbf{q}''', \mathbf{q}) \times \\ \times \left[ G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, -l) G_i^{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{q}'', -l) \times \right. \\ \times G_m^{\beta\beta}(\omega, \mathbf{q}', 0) G_n^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}''', 0) + G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, +l) \times \\ \times G_i^{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{q}'', +l) G_m^{\beta\beta}(\omega, \mathbf{q}', 0) \times \\ \times G_n^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}''', 0) + G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, -l) G_i^{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{q}'', +l) \times \\ \times G_m^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}', L) G_n^{\beta\beta}(\omega, \mathbf{q}''', -L) + \\ \left. + G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}, +l) G_i^{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{q}'', -l) G_m^{\alpha\alpha}(\omega, \mathbf{q}', -L) \times \right. \\ \left. \times G_n^{\beta\beta}(\omega, \mathbf{q}''', L) \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

Здесь мы ввели обозначения  $G_i$  и  $G_m$  соответственно для функций Грина промежуточного слоя и прослойки;  $\omega$  — частота. В данной 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 [22].

Определим энергию межслоевой обменной связи  $\Delta\Omega_{ex}$  как ту часть термодинамического потенциала  $\Delta\Omega$ , которая является билинейной формой от векторов намагниченности ФМ-обкладок:

$$\Delta\Omega_{ex} = I(L)\mathbf{M}(-l)\mathbf{M}(+l), \quad (11)$$

где  $I(L)$  — обменный интеграл. Из уравнений (8)–(10) видим, что первый не исчезающий вклад в энергию  $\Delta\Omega_{ex}$  возникает в слагаемом  $\Delta\Omega_4$  (10), иными словами, обменный интеграл  $I(L)$  пропорционален величине  $V^4$ .

Чтобы получить явное выражение для функции  $I(L)$ , упростим интегралы в формуле (10) следующим образом. Главный вклад в эти интегралы, очевидно, вносят те квазиимпульсы в функциях Грина  $G_m$ , которые лежат вблизи экстремумов  $\mathbf{K}_V$  и  $\mathbf{K}_C$  объемных зон в прослойке. С другой стороны, при интегрировании необходимо учесть вклад различных (в том числе больших) квазиимпульсов в функциях Грина  $G_i$  интерфейсных состояний, формирующих узкий пик в плотности электронных состояний промежуточного слоя. Ясно, что вклад процессов гибридизации с переносом больших квазиимпульсов в интегралы (9), (10) оказывается при этом весьма существенным. Для учета данной особенности используем в формуле (10) «среднеквадратичное» приближение следующего вида:

$$\begin{aligned} \int \frac{d\mathbf{q}''}{(2\pi)^2} V_m(\mathbf{q}, \mathbf{q}'') G_i^{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q}'', \pm l) V_n^*(\mathbf{q}'', \mathbf{q}') \approx \\ \approx \gamma_{mn} \Gamma^{\alpha\beta}(\omega, \pm l) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}' - \mathbf{K}_{mn}^\perp), \quad (12) \end{aligned}$$

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

$$\gamma_{mn} = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V_m(\mathbf{K}_m^\perp, \mathbf{q}) V_n^*(\mathbf{q}, \mathbf{K}_n^\perp).$$

Таким образом, в приближении (12) влияние интерфейсных состояний на объемные состояния прослойки описывается введением эффективных поверхностных потенциалов  $\gamma_{mn} \Gamma^{\alpha\beta}(\omega, \pm l)$ , зависящих от частоты.

Отметим, что векторы  $\mathbf{K}_{mn} = \mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n$  принадлежат первой зоне Бриллюэна, а вектор  $\mathbf{K}_{mn}^\perp$  — это проекция вектора  $\mathbf{K}_{mn}$  на плоскость  $(x, y)$ . В нашей модели ширины зон в полупроводниковой прослойке  $W_m$  значительно превышают ширину пика ПЭС в промежуточном слое  $W_i$ ; при этом уровень Ферми лежит вблизи этого пика и находится внутри энергетической щели  $E_g$ . Указанные предположения позволяют существенно упростить выражение для интеграла  $I(L)$ :

$$\begin{aligned} I(L) = \frac{J_i^2}{2} \sum_{mn} |\gamma_{mn}|^2 \exp(iK_{mn}^z L) \times \\ \times \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q} dk_z dk'_z}{(2\pi)^4} D^2(\omega) \times \\ \times G_m(\omega, k_z, \mathbf{q}) G_n(\omega, k'_z, \mathbf{q}) \exp(i(k_z - k'_z)L), \quad (13) \end{aligned}$$

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

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

Здесь  $N_i(\varepsilon)$  — плотность электронных состояний в промежуточном слое,  $K_{mn}^z$  — проекция вектора  $\mathbf{K}_{mn}$  на ось  $\mathbf{z}$ , вектор  $\mathbf{k}$  в функциях Грина  $G_m(\omega, \mathbf{k}) = G_m(\omega, k_z, \mathbf{q})$ , фигурирующих в формуле (13), отсчитывается от точки экстремума функции  $E_m(\mathbf{k})$ .

В двухзонной модели (7), где  $(m, n) = (C, V)$ , перепишем выражение (13) следующим образом:

$$I(L) = I_1(L) + I_2(L) \cos(K_0^z L), \quad (14)$$

$$\mathbf{K}_0 = \mathbf{K}_C - \mathbf{K}_V,$$

$$I_1(L) = |\gamma_{CC}|^2 A_C(L) + |\gamma_{VV}|^2 A_V(L),$$

$$I_2(L) = |\gamma_{CV}|^2 A_{CV}(L) + |\gamma_{VC}|^2 A_{VC}(L),$$

$$A_C(L) = \frac{J_i^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} F_C^*(\omega, \mathbf{q}, L) F_C(\omega, \mathbf{q}, L),$$

$$A_V(L) = \frac{J_i^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} F_V^*(\omega, \mathbf{q}, L) F_V(\omega, \mathbf{q}, L),$$

$$A_{CV}(L) = A_{VC}^*(L) = \frac{J_i^2}{2} \oint \frac{d\omega}{2\pi i} \times \\ \times \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} F_C^*(\omega, \mathbf{q}, L) F_V(\omega, \mathbf{q}, L),$$

$$F_{C,V}(\omega, \mathbf{q}, L) = \int \frac{dk_z}{2\pi} D(\omega) G_{C,V}(\omega, k_z, \mathbf{q}) \exp(ik_z L).$$

Как внутризонная, так и межзонная составляющие интеграла (14) могут быть аналитически рассчитаны при условии  $\Omega_{C,V} \ll W_{C,V}$ , где  $\Omega_C$  — расстояние между узким интерфейсным пиком плотности электронных состояний и дном зоны проводимости,  $\Omega_V$  — расстояние между узким интерфейсным пиком плотности электронных состояний и потолком валентной зоны. В этом случае основной вклад в интегралы по квазиимпульсам вносят области вблизи экстремумов зон полупроводника  $\mathbf{K}_V$  и  $\mathbf{K}_C$ , где электронный спектр аппроксимируется простым параболическим законом (7). В противном случае, когда  $\Omega_{C,V} \sim W_{C,V}$ , пришлось бы вести интегрирование по всей зоне Бриллюэна с учетом деталей зонной структуры, что можно сделать только численными методами. Уровень Ферми для рассматриваемого случая невырожденного полупроводника лежит внутри запрещенной зоны,  $E_C(\mathbf{K}_C) > \varepsilon_F > E_V(\mathbf{K}_V)$ ; для определенности совместим его с началом отсчета энергии,  $\varepsilon_F = 0$ . При  $T = 0$  свободные носители в прослойке отсутствуют, поэтому выражение (14) описывает только вклад механизма суперобмена в МОС, а вклад механизма РККИ отсутствует. Явные выражения для компонент обменного интеграла (14) приведены в Приложении.

## 5. РОЛЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

Выражение (14) описывает вклад в эффективный интеграл обменной связи  $I(L)$ , возникающий благодаря механизму суперобмена между ФМ-слоями через немагнитную полупроводниковую прослойку с простым двухзонным спектром (7). При этом два различных по характеру своей зависимости от толщины прослойки  $L$  слагаемых определяют вид функции  $I(L)$ .

Внутризонная компонента  $I_1(L)$  всегда соответствует АФМ-типу связи, в то время как межзонная компонента  $I_2(L) \cos(K_0^z L)$  может соответствовать либо ФМ (если вектор  $\mathbf{K}_0$  строго перпендикулярен оси роста структуры), либо осциллирующему

между ФМ и АФМ с изменением толщины  $L$  типу связи (если ориентация вектора  $\mathbf{K}_0$  такова, что  $(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{z}) \neq 0$ ). Однако для реальной прослойки ситуация оказывается более сложной, поскольку группа пространственной симметрии полупроводника образует неприводимую звезду векторов  $\{\mathbf{K}_{C,V}\}$ , и потому имеется целый набор векторов  $\{\mathbf{K}_0\}$ , которые могут быть различным образом сориентированы относительно направления роста структуры.

Электронный спектр полупроводниковой прослойки имеет, как правило, несколько эквивалентных максимумов и минимумов. Вследствие того что процессы гибридизации на интерфейсах Fe/Si допускают большую передачу квазиимпульса, различные по характеру зависимости от толщины прослойки компоненты МОС (АФМ, ФМ или осциллирующая) возникают как во внутризонном, так и в межзонном слагаемом в интеграле  $I(L)$ . Учет нескольких эквивалентных экстремумов в электронном спектре прослойки ведет к следующему выражению:

$$I(L) = \sum_{CC'} |\gamma_{CC'}|^2 A_C(L) \cos(K_{CC'}^z L) + \\ + \sum_{VV'} |\gamma_{VV'}|^2 A_V(L) \cos(K_{VV'}^z L) + \\ + \sum_{CV} [|\gamma_{CV}|^2 A_{CV}(L) + |\gamma_{VC}|^2 A_{VC}(L)] \times \\ \times \cos(K_{CV}^z L), \quad (15)$$

где суммирование проводится по индексам зонных минимумов ( $C, C'$ ) и максимумов ( $V, V'$ ); функции  $A_C(L)$ ,  $A_V(L)$ ,  $A_{CV}(L)$  и  $A_{VC}(L)$  определены выше в формуле (14).

Рассмотрим два вида спектра, которые качественно соответствуют двум различным предельным ситуациям в системах типа Fe/Si с ориентацией интерфейса (001).

1) Спектр электронов в прослойке имеет максимум валентной зоны в точке  $\Gamma$  и минимум зоны проводимости вблизи точек  $X$  в первой зоне Бриллюэна решетки с кристаллической структурой алмаза. Неприводимая звезда  $\{\mathbf{K}_C\}$  состоит из векторов

$$\mathbf{K}_{\pm 1} = \frac{\pi}{2a}(1 \pm \delta, 0, 0), \quad \mathbf{K}_{\pm 2} = \frac{\pi}{2a}(0, 1 \pm \delta, 0), \\ \mathbf{K}_{\pm 3} = \frac{\pi}{2a}(0, 0, 1 \pm \delta), \quad \delta \ll 1,$$

$\mathbf{K}_V = 0$ ,  $a$  — расстояние между соседними монослоями решетки [23]. Тогда соотношение (15) может быть переписано в форме, аналогичной (14):

$$I(L) = I_1(L) + I_2(L) \cos(K_0^z L), \quad (16)$$

$$K_0^z = \frac{\pi}{2a},$$

$$I_1(L) = I_1'(L) + I_1''(L) \cos\left(\frac{\pi\delta L}{a}\right),$$

$$I_2(L) = I_2'(L) \cos\left(\frac{\pi\delta L}{2a}\right),$$

$$I_1'(L) = |\gamma_{VV}|^2 A_V(L) + [6|\gamma_{CC}|^2 + 2|\gamma_{CC}''|^2] \times \\ \times A_C(L) + |\gamma_{CV}'|^2 A_{CV}(L) + |\gamma_{VC}'|^2 A_{VC}(L), \\ I_1''(L) = 2|\gamma_{CC}|^2 A_C(L),$$

$$I_2'(L) = 4|\gamma_{CC}'|^2 A_C(L) + \\ + 2|\gamma_{CV}'|^2 A_{CV}(L) + 2|\gamma_{VC}'|^2 A_{VC}(L),$$

$$|\gamma_{VV}|^2 = |\gamma_{VV}(0)|^2, \quad |\gamma_{CC}|^2 = |\gamma_{CC}(0)|^2, \\ |\gamma_{VC}|^2 = |\gamma_{VC}(0)|^2,$$

$$|\gamma_{CC}'|^2 = |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{+1})|^2 + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{+2})|^2 + \\ + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{-1})|^2 + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{-2})|^2,$$

$$|\gamma_{CV}'|^2 = |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_{+1})|^2 + |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_{+2})|^2 + \\ + |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_{-1})|^2 + |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_{-2})|^2,$$

$$|\gamma_{VC}'|^2 = |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_{+1})|^2 + |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_{+2})|^2 + \\ + |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_{-1})|^2 + |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_{-2})|^2,$$

$$|\gamma_{CC}''|^2 = |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{+1} + \mathbf{K}_{+2})|^2 + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{-1} + \mathbf{K}_{+2})|^2 + \\ + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{+1} + \mathbf{K}_{-2})|^2 + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_{-1} + \mathbf{K}_{-2})|^2.$$

Модель I) качественно описывает ветви электронного спектра вблизи краев запрещенной зоны в кристаллическом кремнии и может быть использована для анализа МОС при условии отсутствия диффузии Fe в прослойку Si. Как видно из формул (16), одна знакопостоянная и три знакопеременных компоненты присутствуют в зависимости  $I(L)$ ; при этом, конечно, амплитуда  $I(L)$  экспоненциально убывает при большой толщине прослойки  $L$ . Период коротковолновых осцилляций  $I(L)$  равен  $d_s = 4a$ , а длинноволновые периоды составляют соответственно  $d_l' = 2a/\delta$  и  $d_l'' = 4a/\delta$ . Как известно, в чистом кристаллическом кремнии  $a \approx 1.35 \text{ \AA}$ ,  $\delta \approx 0.2$ , поэтому справедлива оценка  $d_s = 5.4 \text{ \AA}$ ,  $d_l' = 13.5 \text{ \AA}$ ,  $d_l'' = 27 \text{ \AA}$ . Отметим, что в наноструктурах с сильно подавленной диффузией Fe в Si более или менее значительная МОС наблюдается из-за резкого затухания амплитуды  $I(L)$  только при толщине прослойки  $L$ , не превышающей 18–20  $\text{\AA}$  [1], т. е. компонента с периодом  $d_l''$  может рассматриваться как практически постоянная по знаку.

II) Спектр электронов в прослойке имеет максимумы валентной зоны в точках  $X$  и минимумы зоны проводимости в точках  $M$  в первой зоне Бриллюэна ОЦК-решетки. Неприводимые звезды состоят из векторов  $\{\mathbf{K}_V\}$ :

$$\mathbf{K}_{1V} = \frac{\pi}{b}(1, 0, 0), \quad \mathbf{K}_{2V} = \frac{\pi}{b}(0, 1, 0),$$

$$\mathbf{K}_{3V} = \frac{\pi}{b}(0, 0, 1);$$

и  $\{\mathbf{K}_C\}$ :

$$\mathbf{K}_{1C} = \frac{\pi}{b}(1, 1, 0), \quad \mathbf{K}_{2C} = \frac{\pi}{b}(0, 1, 1),$$

$$\mathbf{K}_{3C} = \frac{\pi}{b}(1, 0, 1);$$

$b$  — параметр решетки [23]. Перепишем уравнение (15) в виде, аналогичном (14):

$$I(L) = I_1(L) + I_2(L) \cos(K_0^z L),$$

$$K_0^z = \pi/b, \quad (17)$$

$$I_1(L) = [3|\gamma_{VV}|^2 + 2|\gamma_{VV}''|^2] A_V(L) + \\ + [3|\gamma_{CC}|^2 + 2|\gamma_{CC}''|^2] A_C(L) + \\ + 2|\gamma_{VC}|^2 A_{VC}(L) + 2|\gamma_{CV}|^2 A_{CV}(L),$$

$$I_2(L) = 2|\gamma_{VV}'|^2 A_V(L) + 2|\gamma_{CC}'|^2 A_C(L) + [3|\gamma_{VC}'|^2 + \\ + 2|\gamma_{VC}|^2] A_{VC}(L) + [3|\gamma_{CV}'|^2 + 2|\gamma_{CV}|^2] A_{CV}(L),$$

$$|\gamma_{VV}|^2 = |\gamma_{VV}(0)|^2, \quad |\gamma_{CC}|^2 = |\gamma_{CC}(0)|^2,$$

$$|\gamma_{VC}|^2 = |\gamma_{VC}(0)|^2,$$

$$|\gamma_{CC}'|^2 = |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_1)|^2 + |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{VV}'|^2 = |\gamma_{VV}(\mathbf{K}_1)|^2 + |\gamma_{VV}(\mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{CV}'|^2 = |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_1)|^2 + |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{VC}'|^2 = |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_1)|^2 + |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{CC}''|^2 = |\gamma_{CC}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{VV}''|^2 = |\gamma_{VV}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{VC}''|^2 = |\gamma_{VC}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)|^2,$$

$$|\gamma_{CV}''|^2 = |\gamma_{CV}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)|^2.$$

Модель II) качественно описывает ближайшие к краям запрещенной зоны «полупроводниковые» ветви электронного спектра моносилицида железа с ОЦК-решеткой [20] в парамагнитной фазе (будем обозначать ее, как ПМ  $c$ -FeSi, чтобы отличить от контактно индуцированной ферромагнитной фазы



ФМ  $c$ -FeSi). Данная модель качественно применима к анализу МОС в системе с сильной диффузией Fe в прослойку Si, в предположении, что по всей толщине последней образуется однородный слой ПМ  $c$ -FeSi. Величина  $b \approx 2.8\text{--}2.9 \text{ \AA}$  [20], и период коротковолновых осцилляций функции  $I(L)$  оценивается как  $d_s \approx 5.6\text{--}5.8 \text{ \AA}$ .

Конечно, в рамках модели II) мы пренебрегли многими особенностями электронного спектра реального силицида ПМ  $c$ -FeSi. Строго говоря, в этом соединении края зоны «проводимости» и «валентной» зоны вблизи точек  $M$  и  $X$  разделены не истинной энергетической щелью в плотности электронных состояний, но «псевдощелью» величиной  $E_g \sim 0.5 \text{ эВ}$ . Эту «псевдощель» заполняют «полуметаллические» состояния с очень малой плотностью, формирующие поверхность Ферми; при этом уровень Ферми находится всего примерно на  $0.05 \text{ эВ}$  ниже зоны «проводимости» легких электронов  $E_C(\mathbf{K}_C)$  в точке  $M$  [20]. «Полуметаллические» состояния должны, вообще говоря, обеспечивать осциллирующий вклад в МОС, обусловленный механизмом РККИ; однако, ввиду крайне малой величины плотности электронных состояний на уровне Ферми в ПМ  $c$ -FeSi, такой вклад является, по-видимому, практически ненаблюдаемым. В рамках модели II) также не приняты во внимание состояния тяжелых квазичастиц, дающие узкий пик плотности электронных состояний, расположенный в фазе ПМ  $c$ -FeSi заметно выше (примерно на  $0.3 \text{ эВ}$ ) уровня Ферми. Этот пик, как отмечалось выше в разд. 2, сдвигается к уровню Ферми вследствие эффектов близости к слою Fe и играет принципиальную роль при формировании спин-поляризованных интерфейсных состояний в фазе ФМ  $c$ -FeSi. Как показал анализ [24], из-за очень малой длины туннелирования участие состояний тяжелых квазичастиц в суперобмене через ПМ  $c$ -FeSi может стать заметным лишь в случае предельно тонкой (менее  $5 \text{ \AA}$ ) прослойки, поэтому в данной работе ролью таких квазичастиц пренебрегаем.

Таким образом, по нашему мнению, выражение (15) вполне годится для качественного описания суперобмена через прослойки, обладающие различной кристаллической симметрией и приготовленные в различных условиях.

## 6. ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ ТОЛЩИНЫ И СОСТАВА ПРОСЛОЙКИ

До сих пор мы рассматривали только системы с идеальными интерфейсами и без композиционного

беспорядка в прослойке. Интуитивно понятно, что составляющая с коротковолновыми осцилляциями в интеграле  $I(L)$  особенно чувствительна к шероховатостям межслоевых границ и флуктуациям состава в прослойке. К сожалению, довольно сложно включить эти факторы непосредственно в микроскопическую модель суперобмена, поскольку они ведут к потере трансляционной инвариантности системы в плоскости интерфейса и процедура расчета значительно усложняется. Ниже мы попытаемся сделать оценки для вносимых беспорядком поправок в МОС, используя простое феноменологическое приближение.

Характеристики слоистых наноструктур в значительной степени определяются качеством межслоевых границ, которое зависит от технологии их приготовления. Как правило, при сравнительном анализе морфологии межслоевых границ выделяются флуктуации состава и структуры интерфейса на различных масштабах. Во-первых, любые методики выращивания наноструктуры сопровождаются интердиффузией ее компонент и потому неизбежно ведут к флуктуациям атомного масштаба длины (как вдоль, так и поперек направления роста). Эффект нарушения (фрустрации) регулярных межатомных связей за счет коротковолнового беспорядка на границе Fe/Si может быть грубо учтен путем введения конечного времени жизни квазичастиц в состояниях, формирующих спектр промежуточного слоя  $E_i(\mathbf{q}, \pm l)$ , и, как легко показать, данный эффект принципиально не отразится на полученных результатах расчетов МОС. Во-вторых, достаточно качественные наноструктуры обладают более или менее выраженным длинноволновым рельефом поверхности раздела между слоями в виде террас атомной высоты. Такую шероховатость интерфейса принято описывать двумя статистическими параметрами: дисперсией высоты рельефа  $\sigma$  вдоль направления роста слоев и корреляционной длиной  $\xi$  вдоль плоскости интерфейса. Первый параметр обычно составляет величину порядка нескольких постоянных решеток, а второй может меняться в широких пределах (в зависимости от температурного режима роста слоев и совершенства подложки) от нескольких нанометров до нескольких микрон.

В хорошо известной феноменологической схеме МОС с флуктуирующей за счет шероховатости межслоевых границ толщиной прослойки [25] показано, что если знак обменного интеграла  $I(L)$  осциллирует с коротким периодом, не превышающим величину дисперсии шероховатости, т. е.  $d_s \leq \sigma$ , тогда помимо обычной билинейной компоненты возникает также

биквадратичная компонента МОС. В нашей модели биквадратичная компонента также может формально появиться в результате введения в термодинамический потенциал системы (8) феноменологического слагаемого, учитывающего конечную обменную жесткость слоев железа, и последующего усреднения соотношения (11) для обменной части термодинамического потенциала по флуктуациям толщины прослойки кремния. К сожалению, из приведенных выше оценок периодов осцилляций интеграла  $I(L)$  следует, что схема [25] применима лишь к структурам Fe/Si с очень плохими интерфейсами, для которых  $\sigma \geq 5\text{--}6 \text{ \AA}$ , и совершенно теряет смысл в случае наиболее интересных для нас структур с достаточно гладкими интерфейсами, в которых  $\sigma$  составляет величину порядка расстояния между соседними монослоями в кремнии.

Кроме «интерфейсного» беспорядка, проявляющегося в размывании межслоевой границы Fe/Si за счет интердиффузии и шероховатости, значительную роль может играть «композиционный» беспорядок непосредственно внутри прослойки Si, связанный с пространственными неоднородностями ее состава, возникающими в процессе роста наноструктуры. Даже в предположении об отсутствии диффузии железа наличие разорванных ковалентных связей в кремнии (т. е. его частичная аморфизация) нарушает периодичность и симметрию кристаллической решетки; растворенные в прослойке атомы Fe, вакансии, дислокации и т. д. вносят дополнительный беспорядок. Таким образом, квазичастицы, движущиеся в прослойке, испытывают действие кристаллического потенциала, в котором можно выделить два различных вклада: периодический (регулярный) и флуктуирующий на различных пространственных масштабах. Микроскопические флуктуации на атомных масштабах можно учесть тем или иным известным способом (например, в известной схеме когерентного потенциала), что в простейшем приближении сведется к перенормировке параметров зонного спектра и появлению конечного времени жизни квазичастиц в прослойке. «Наноскопические» флуктуации кристаллического потенциала на масштабах нескольких единиц или десятков межатомных расстояний, вызванные, например, неоднородностью состава прослойки  $x(\mathbf{r})$ , включениями иной фазы, кластерами или крупномасштабными флуктуациями оборванных связей, можно принять во внимание посредством усреднения макроскопических характеристик системы по какому-либо случайному распределению этих флуктуаций, т. е. чисто феноменологическим образом.

Рассмотрим вновь выражение (14) для интеграла МОС в двухзонной модели спектра прослойки, но будем теперь считать, что в рамках какого-либо метода микроскопический беспорядок уже включен в эффективные параметры модели. Можно показать, что связанные с таким беспорядком «хвосты» плотности электронных состояний вблизи краев полупроводниковых зон лишь несколько изменяют предэкспоненциальные множители в интегралах (14), но принципиальным образом не отражаются на зависимостях  $I_{1,2}(L)$ . Наиболее серьезная модификация интеграла (14) возникает вследствие введения флуктуаций квазиимпульса  $\mathbf{K}_0$ , на величину которого разнесены экстремумы зон в модели (7). В случае достаточно толстой прослойки даже малая вариация  $\Delta K_0^z$  может привести к изменению знака второго слагаемого в формуле (14), если  $|\Delta K_0^z L| \geq \pi$ . Учитывая для простоты только изоморфные, т. е. не нарушающие локальной симметрии кристалла флуктуации, перепишем данное условие в виде

$$\frac{\Delta a}{a} \frac{L}{2a} \geq 1, \quad (18)$$

где  $\Delta a/a$  — относительное изменение постоянной решетки в прослойке. При толщине прослойки  $L \approx 10\text{--}20 \text{ \AA}$  неравенство (18) выполняется, если  $(\Delta a/a) \approx 0.2\text{--}0.3$ .

Нетрудно показать, что в рамках стандартного метода [25], который мы не будем здесь подробно излагать, усредненное по флуктуациям толщины и (или) состава прослойки выражение для энергии МОС может быть получено в виде суммы билинейного и биквадратичного слагаемых:

$$E_{ex} = \langle \Delta \Omega_{ex} \rangle = J_1(L) \mathbf{M}(-l) \mathbf{M}(+l) + J_2(L) [\mathbf{M}(-l) \mathbf{M}(+l)]^2, \quad (19)$$

где

$$J_1(L) = I_1(L), \quad J_2(L) = \lambda \xi [I_2(L)]^2 / A.$$

Здесь  $J_{1,2}(L)$  — соответственно билинейный и биквадратичный интегралы МОС,  $\xi$  — корреляционная длина продольных флуктуаций толщины и (или) состава прослойки,  $A$  — обменная жесткость в слое Fe,  $\lambda$  — численный коэффициент, зависящий от деталей функции распределения флуктуаций. Соотношение (19) представляет МОС в форме, характерной для стандартной билинейно-биквадратичной модели, в которой коэффициенты  $J_{1,2}(L)$  являются сложными функциями толщины  $L$ .

## 7. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МОС

Чтобы детально описать картину поведения МОС, даваемую соотношением (19), необходимо воспользоваться численными расчетами интегралов  $J_{1,2}(L)$ . Но даже приближенные расчеты интегралов МОС в рамках простейшей зонной схемы, проведенные в Приложении, дают довольно громоздкие выражения. Тем не менее из них видно, что внутризонные  $A_C(L)$ ,  $A_V(L)$  и межзонные  $A_{VC}(L)$ ,  $A_{CV}(L)$  компоненты, формирующие суперобменное взаимодействие  $I(L)$  (14), имеют противоположные знаки, а их амплитуда и масштаб убывания с ростом длины  $L$  определенным образом зависят от параметров электронной структуры полупроводниковой прослойки и промежуточного интерфейсного слоя. Пользуясь формулами (П.1)–(П.10), можно построить несколько различных вариантов зависимости  $J_1(L)$ , варьируя такие величины, как эффективные массы электронов и дырок, ширина запрещенной зоны, положение расщепленных по спину зон интерфейсных состояний относительно краев «объемных зон» и т. д. Однако качественно понять происхождение максимума в зависимостях  $J_{1,2}(L)$  для обсуждаемых структур удается даже в рамках простейшей аппроксимации.

Согласно формулам Приложения, грубая оценка  $J_1(L) = I_1(L)$  в асимптотическом пределе большой толщины прослойки может быть выражена простым феноменологическим соотношением

$$J_1(L) = A_1 \exp\left(-\frac{L}{L_A}\right) - F_1 \exp\left(-\frac{L}{L_F}\right),$$

где  $A_1$  и  $F_1$  — положительные предэкспоненциальные множители, а  $L_{A,F}$  — характерные длины соответственно АФМ- и суперобменной ФМ-связей, выраженные через микроскопические параметры модели. Предполагаем, следуя экспериментальным фактам, что для рассматриваемой системы  $L_A > L_F$ , т. е. при большой толщине прослойки АФМ-тип МОС доминирует. Для такого выбора параметров модели асимптотическое поведение функции  $J_1(L)$  при  $(L/L_A) \rightarrow \infty$  имеет вид  $J_1(L) \approx \exp(-L/L_A) > 0$ , что соответствует АФМ-характеру МОС.

При выполнении соотношения  $(A_1/L_A) < (F_1/L_F)$  функция  $J_1(L)$  имеет максимум в точке

$$L_1^* = \frac{\ln(L_A/L_F) - \ln(A_1/F_1)}{L_F^{-1} - L_A^{-1}}. \quad (20)$$

Если  $A_1 - F_1 > 0$ , то билинейный обменный интеграл  $J_1(L) > 0$  для всех  $L$ , что соответствует

АФМ-характеру МОС, как в экспериментах [1]. С другой стороны, если  $A_1 - F_1 < 0$ , то функция  $J_1(L)$  проходит через нуль в точке

$$L_1^{**} = \frac{-\ln(A_1/F_1)}{L_F^{-1} - L_A^{-1}} < L_1^*, \quad (21)$$

причем  $J_1(L) > 0$  при  $L > L_1^{**}$  и  $J_1(L) < 0$  при  $L < L_1^{**}$ . Таким образом, с уменьшением  $L$  после достижения максимума в точке  $L_1^*$  происходит изменение характера МОС с АФМ на ФМ при толщине прослойки  $L = L_1^{**} < L_1^*$ , что качественно соответствует экспериментальным результатам [5].

Нетрудно также показать, что если задать феноменологическое соотношение вида

$$I_2(L) \approx A_2 \exp\left(-\frac{L}{L_A}\right) - F_2 \exp\left(-\frac{L}{L_F}\right),$$

то биквадратичный обменный интеграл  $J_2(L) \sim [I_2(L)]^2 > 0$  для всех  $L$ , и при условии  $(A_2/L_A) < (F_2/L_F)$  зависимость  $J_2(L)$  достигает максимума в точке

$$L_2^* = \frac{\ln(L_A/L_F) - \ln(A_2/F_2)}{L_F^{-1} - L_A^{-1}}. \quad (22)$$

Заметим, что если  $\ln(L_A/L_F) \gg \{\ln(A_1/F_1), \ln(A_2/F_2)\}$ , то оба максимума  $L_1^*$  и  $L_2^*$  почти совпадают, что согласуется с экспериментальным результатом работы [1].

Один из важных выводов исследования наноструктур  $\text{Fe}/\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  с хорошо контролируемой диффузией Fe [1] заключается в том, что величина интеграла значительно возрастает, а точка его максимума  $L_1^*$  заметно сдвигается в сторону меньшей толщины прослойки с увеличением номинальной концентрации кремния  $x$ . Авторы работы [1] прямо связали факт аномально сильной МОС в структурах с высоким содержанием кремния ( $x \approx 1$ ) с наличием в прослойке полупроводника с широкой запрещенной зоной. Наша модель дает вполне разумное объяснение такому поведению МОС, поскольку с увеличением энергетической щели  $E_g$  в электронном спектре прослойки резко убывает величина ФМ-компоненты МОС, связанная с межзонным вкладом в суперобмен. При этом АФМ-компонента МОС, связанная с внутризонным вкладом в суперобмен, гораздо сильнее доминирует над ФМ-компонентой, чем в структурах с узкозонным полупроводником в качестве прослойки.

Таким образом, наблюдаемые в работе [1] максимумы билинейной и биквадратичной компонент

МОС, а также найденную в работе [5] смену знака МОС при уменьшении толщины прослойки удается интерпретировать в рамках простой феноменологической модели как результат конкуренции между ФМ- и АФМ-составляющими в обменных интегралах  $J_{1,2}(L)$ . К сожалению, мы пока слишком плохо понимаем специфику технологии выращивания структур в работах [1] и [5], чтобы интерпретировать на микроскопическом уровне существенные различия в полученных этими группами результатах.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В нашем подходе МОС описывается в терминах эффективного суперобменного взаимодействия слоев ферромагнитного металла через прослойку нормального полупроводника. Такой подход теряет свой смысл для структур с сильно обогащенной железом прослойкой  $Fe_{1-x}Si_x$  с  $x < 0.5$ , содержащей высшие металлические силициды (см. [11]). Во-первых, с уменьшением концентрации кремния  $x$  значительно возрастает роль обмена по механизму типа РККИ через «металлические» зоны материала прослойки, в то время как суперобмен дает только АФМ-сдвиг интеграла МОС [19]. Во-вторых, хорошо известно [26], что такая особенность электронного спектра, как узкая незаполненная зона, образующая резкий пик в плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, существенно усиливает парамагнитные спиновые флуктуации в обогащенных магнитными ионами силицидах. Поэтому необходимо принять во внимание дополнительный (коллективный) вклад в МОС, вносимый спиновыми флуктуациями [27]. В-третьих, в структурах с металлической прослойкой важную роль в МОС начинает играть взаимодействие через одиночные парамагнитные спины («loose spins» по терминологии работы [28]), растворенные внутри прослойки, что, по-видимому, и наблюдалось в экспериментах [14].

В отличие от систем Fe/Si слоистые наноструктуры Co/Si изучены пока очень слабо, полученные данные выглядят столь противоречиво, что нельзя даже определенно сказать о наличии или отсутствии АФМ-связи в них. Можно лишь предполагать интенсивную и слабо контролируемую в ходе приготовления этих структур диффузию атомов кобальта в слой кремния с последующим образованием силицида кобальта (вероятнее всего, кубической фазы *c*-CoSi) вблизи межслоевой границы Co/Si [29–32]. Тем более интересным представляется обнаружение АФМ-связи в мультислоях необычного состава

$Co_{1-x}Si_x/Si$  с  $x \approx 0.26$  [33]. Данные факты находят удовлетворительное истолкование в рамках нашей модели, если принять во внимание особенности электронных состояний силицида кобальта. В соединении *c*-CoSi, которое изоморфно соединению *c*-FeSi, но имеет на один валентный электрон больше, пик плотности электронных состояний изначально лежит ниже уровня Ферми (а не выше, как в *c*-FeSi). Поэтому, вследствие перераспределения зарядовой плотности вблизи интерфейса Co/Si пик в плотности электронных состояний сдвигается еще ниже по энергии, т. е. удаляется от уровня Ферми, что исключает появление спин-поляризованных состояний и контактно-индуцированной фазы ФМ *c*-CoSi в промежуточном слое на интерфейсе. Однако в металлическом силициде  $Co_{1-x}Si_x$  при определенной концентрации кремния  $x$  положение уровня Ферми могло бы опуститься настолько (по отношению к ситуации в чистом кобальте), чтобы реализовались условия пиннинга пика плотности электронных состояний и возникновения контактно-индуцированной фазы ФМ *c*-CoSi на интерфейсе  $Co_{1-x}Si_x/Si$ . На наш взгляд, именно таким образом в структуре  $Co_{1-x}Si_x/Si$  «запускается» обсуждаемый в настоящей работе механизм суперобмена. Похоже, что в работе [33] удалось нащупать оптимальный для этой цели состав  $x \approx 0.26$ .

Резюмируем полученные в работе результаты. Для наноструктур типа Fe/Si предложен механизм МОС, базирующийся на следующих главных положениях.

1) На границе раздела слоев Fe/Si формируется промежуточный слой контактно-индуцированной фазы ФМ *c*-FeSi и возникают поляризованные по спину интерфейсные состояния.

2) Магнитная связь между слоями Fe, разделенными слоем номинального Si, осуществляется путем суперобменного взаимодействия интерфейсных состояний через прослойку нормального полупроводника, как через внутризонный, так и через межзонный каналы.

3) Немонотонный характер зависимости МОС от толщины и состава прослойки (наличие максимума, изменение формы, возможная смена знака билинейной компоненты) связан с конкуренцией АФМ- и ФМ-составляющих суперобмена и сложным характером электронного спектра прослойки (в частности, наличием нескольких эквивалентных экстремумов полупроводниковых зон).

Эта модель позволяет, по крайней мере, на качественном уровне, непротиворечивым образом воспроизвести основные черты МОС в наноструктурах

типа Fe/Si. Аналитический расчет интегралов МОС осуществлен пока лишь для  $T = 0$ , но весьма желательно распространить его на случай конечных температур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-02-1609а).

### ПРИЛОЖЕНИЕ

При моделировании формы узкого пика в плотности электронных состояний промежуточного слоя ограничимся приближением локального уровня с энергией  $\varepsilon_0$ , так что  $N_i(\varepsilon) \approx n_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$ ,  $\delta(\varepsilon)$  — дельта-функция,  $n_i$  — число состояний, формирующих пик. Такое приближение вполне обосновано, если ширина пика  $W_i \ll (W_{C,V}, J_i M)$ , для определенности полагаем  $J_i M > 0$ .

Для расщепленных по спину интерфейсных состояний считаем, что уровень со спином, направленным вверх, с энергией  $\varepsilon_0 - J_i M < 0$  заполнен, а уровень со спином, направленным вниз, с энергией  $\varepsilon_0 + J_i M > 0$  пуст.

Проведем вначале расчет внутризонной компоненты МОС. В выражении (14) для  $A_C(L)$  или для  $A_V(L)$  выполним, в первую очередь, интегрирование по частоте, замкнув контур в верхней полуплоскости комплексной переменной  $\omega$ , а затем возьмем интеграл по поперечному квазиимпульсу  $k_z$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ . В результате для суперобмена, например, через зону проводимости имеем

$$A_C(L) = \frac{n_i^2 m_C}{16M^2} \times \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \left( \frac{1}{J_i M \Omega_C(q)} + \frac{L\sqrt{2m_C}}{(\Omega_C(q))^{3/2}} \right) \times \exp \left[ -2L\sqrt{2m_C \Omega_C(q)} \right], \quad (\text{П.1})$$

где

$$\Omega_C(q) = \Omega_C + \frac{q^2}{2m_C}, \quad \Omega_C = E_C(\mathbf{K}_C) - \varepsilon_0 + J_i M.$$

Оставшийся в формуле (П.1) интеграл по двумерному квазиимпульсу  $\mathbf{q}$ , лежащему в плоскости интерфейса, можно выразить в довольно компактной форме:

$$A_C(L) = \frac{n_i^2 m_C^2}{8\pi M^2} \times \left[ \frac{\exp(-L/L_C)}{2\Omega_C} - \frac{\text{Ei}(-L/L_C)}{J_i M} \right], \quad (\text{П.2})$$

где  $L_C = (2\sqrt{2m_C \Omega_C})^{-1}$ , а  $\text{Ei}(t)$  — интегральная экспоненциальная функция

$$\text{Ei}(t) = - \int_{-\infty}^t \frac{\exp t}{t} dt.$$

Вклад порядка  $A_C(L)$  возникает благодаря косвенному взаимодействию намагниченностей соседних ФМ-слоев через виртуальные возбуждения электронов с интерфейсных состояний (один электрон от каждой границы, но с различной спиновой поляризацией) в зону проводимости полупроводника.

Аналогично, для суперобмена через валентную зону получим выражение

$$A_V(L) = \frac{n_i^2 m_V^2}{8\pi M^2} \times \left[ \frac{\exp(-L/L_V)}{2\Omega_V} - \frac{\text{Ei}(-L/L_V)}{J_i M} \right], \quad (\text{П.3})$$

где  $\Omega_V = |E_V(\mathbf{K}_V)| + \varepsilon_0 + J_i M$  и  $L_V = (2\sqrt{2m_V \Omega_V})^{-1}$ . Вклад порядка  $A_V(L)$  возникает благодаря косвенному взаимодействию намагниченностей соседних ФМ-слоев через виртуальные дырки, возбуждаемые в заполненной валентной зоне полупроводника при уходе из нее электронов на интерфейсные состояния (по одному электрону с различной спиновой поляризацией к каждой из границ).

Величины  $\Omega_{C,V}$  можно условно трактовать как энергии возбуждения квазичастиц с «донорных» и «акцепторных» уровней на интерфейсах соответственно в зону проводимости и валентную зону объемного полупроводника при внутризонном туннелировании электронов и дырок через прослойку. Асимптотическое поведение функции  $A_{C,V}(L)$  при больших значениях  $L/L_{C,V}$  имеет вид

$$A_{C,V}(L) = \frac{n_i^2 m_{C,V}^2}{8\pi M^2} \times \left[ \frac{1}{2\Omega_{C,V}} + \frac{L_{C,V}/L}{J_i M} \right] \exp \left( -\frac{L}{L_{C,V}} \right). \quad (\text{П.4})$$

Видно, что внутризонный вклад  $I_1(L)$  в суперобмен (14) имеет АФМ-знак, а его характерная длина определяется наибольшей из туннельных длин: электронной или дырочной. Важно отметить, что суперобмен заметно затухает на масштабе, значительно превышающем параметр решетки полупроводника,  $L_{C,V} \sim a\sqrt{W_{C,V}/\Omega_{C,V}} \gg a$ . Благодаря сильной гибридизации с зонными состояниями полупроводниковой прослойки интерфейсные состояния, изначально локализованные на длине нескольких монослоев вдоль оси роста структуры, частично

делокализуются, а их волновые функции приобретают «хвосты» длиной порядка  $L_{C,V}/2$ , сравнимые с толщиной прослойки. При этом в меру перекрытия «хвостов» волновых функций возникает длинноволновый вклад в МОС, отличный от нуля даже в отсутствие свободных носителей в прослойке.

Вычисление межзонной компоненты МОС требует значительно больших усилий, чем расчет внутризонных компонент. После интегрирования по частоте  $\omega$  получаем для соответствующего вклада в формулу (14) выражение

$$A_{CV}(L) = -\frac{n_i^2}{8M^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \int \frac{dk'_z}{2\pi} \frac{\exp(i(k_z - k'_z)L)}{\frac{k_z^2}{2m_C} + \frac{k'^2_z}{2m_V} + E_g(q)} \times \left\{ \frac{1}{J_i M \left( \Omega_C(q) + \frac{k_z^2}{2m_C} \right)} + \frac{1}{\left( \Omega_C(q) + \frac{k_z^2}{2m_C} \right)^2} + \frac{1}{J_i M \left( \Omega_V(q) + \frac{k'^2_z}{2m_V} \right)} + \frac{1}{\left( \Omega_V(q) + \frac{k'^2_z}{2m_V} \right)^2} \right\}, \quad (\text{П.5})$$

где введены следующие обозначения:

$$E_g(q) = E_g + \left( \frac{1}{m_C} + \frac{1}{m_V} \right) \frac{q^2}{2}, \quad \Omega_V(q) = \Omega_V + \frac{q^2}{2m_V},$$

$$E_g = E_C(\mathbf{K}_C) + |E_V(\mathbf{K}_V)|.$$

После замены переменных интегрирования,  $k_z - k'_z = k$  и  $\sqrt{m_V/m_C} k_z + \sqrt{m_C/m_V} k'_z = K$ , формула (П.5) переписется в виде

$$A_{CV}(L) = -\frac{n_i^2}{8M^2} \frac{(m_C + m_V)^4}{\sqrt{m_C m_V}} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dK}{2\pi} \frac{e^{ikL}}{k^2 + K^2 + 2(m_C + m_V)E_g(q)} \times \left[ \frac{1}{J_i M \left( \left( K - \sqrt{\frac{m_C}{m_V}} k \right)^2 + \frac{2(m_C + m_V)^2}{m_V} \Omega_C(q) \right)} + \frac{2(m_C + m_V)^2/m_V}{\left( \left( K - \sqrt{\frac{m_C}{m_V}} k \right)^2 + \frac{2(m_C + m_V)^2}{m_V} \Omega_C(q) \right)^2} + \frac{1}{J_i M \left( \left( K + \sqrt{\frac{m_V}{m_C}} k \right)^2 + \frac{2(m_C + m_V)^2}{m_C} \Omega_V(q) \right)} + \frac{2(m_C + m_V)^2/m_C}{\left( \left( K + \sqrt{\frac{m_V}{m_C}} k \right)^2 + \frac{2(m_C + m_V)^2}{m_C} \Omega_V(q) \right)^2} \right]. \quad (\text{П.6})$$

Выражение (П.6) настолько сложное, что не позволяет в общем случае записать точную аналитическую формулу. Поэтому ограничимся его приближенным вычислением. Совершив в (П.6) интегрирование по переменной  $K$ , заметим, что в оставшемся интеграле по переменной  $k$  подынтегральная функция при ее аналитическом продолжении имеет полюсную особенность на мнимой оси в верхней полуплоскости, именно, в точках

$$k_C^\pm = i\sqrt{2} \times \left| \sqrt{m_V (E_g(q) - \Omega_C(q)) \pm \sqrt{m_C \Omega_C(q)}} \right| \quad (\text{П.7})$$

для первого и второго слагаемых и в точках

$$k_V^\pm = i\sqrt{2} \times \left| \sqrt{m_C (E_g(q) - \Omega_V(q)) \pm \sqrt{m_V \Omega_V(q)}} \right| \quad (\text{П.8})$$

для третьего и четвертого слагаемых, а также разрезы вдоль границ полупроводниковых зон. Понятно, что в пределе большой толщины,  $L \gg L_{C,V}$ , главный вклад в интеграл (П.6) вносит полюс, расположенный ближе других к действительной оси. Оказывается, что суммарный вклад, связанный с полюсами  $k_{C,V}^-$ , точно равен нулю (иными словами,  $k_{C,V}^-$

являются устранимыми особыми точками). Соответственно, справедлива асимптотическая оценка:

$$A_{CV}(L) = -\frac{n_i^2}{M^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \times \\ \times \left[ \Lambda_C(q) \exp \left( -\sqrt{2} \left( \sqrt{m_V(E_g(q) - \Omega_C(q))} + \sqrt{m_C \Omega_C(q)} \right) L \right) + \right. \\ \left. + \Lambda_V(q) \exp \left( -\sqrt{2} \left( \sqrt{m_C(E_g(q) - \Omega_V(q))} + \sqrt{m_V \Omega_V(q)} \right) L \right) \right], \quad (\text{П.9})$$

где  $\Lambda_{C,V}(m_C, m_V, q)$  — коэффициенты, не зависящие от  $L$ , но являющиеся громоздкой комбинацией  $m_C$  и  $m_V$ . Чтобы упростить дальнейшие расчеты, положим  $m_C = m_V = m$ . Рассматривая интеграл по модулю двумерного вектора  $\mathbf{q}$  как интеграл Лапласа, легко получим главный член асимптотики функции  $A_{CV}(L)$ :

$$A_{CV}(L) = -\frac{n_i^2 m^2}{8\pi E_g M^2} \left\{ \left[ \frac{\sqrt{\Omega_C} \sqrt{\Omega_V - 2J_i M}}{J_i M L} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\sqrt{2m}}{2} \left| \sqrt{\Omega_C} - \sqrt{\Omega_V - 2J_i M} \right| \right] L_1^{inter} \times \right. \\ \times \exp \left( -\frac{L}{L_1^{inter}} \right) + \left[ \frac{\sqrt{\Omega_V} \sqrt{\Omega_C - 2J_i M}}{J_i M L} + \right. \\ \left. \left. + \frac{\sqrt{2m}}{2} \left| \sqrt{\Omega_V} - \sqrt{\Omega_C - 2J_i M} \right| \right] L_2^{inter} \times \right. \\ \left. \times \exp \left( -\frac{L}{L_2^{inter}} \right) \right\}, \quad (\text{П.10})$$

где

$$(L_1^{inter})^{-1} = \sqrt{2m} \left( \sqrt{\Omega_C} + \sqrt{\Omega_V - 2J_i M} \right),$$

$$(L_2^{inter})^{-1} = \sqrt{2m} \left( \sqrt{\Omega_V} + \sqrt{\Omega_C - 2J_i M} \right).$$

Эти же величины, как очевидно из формулы (П.9), в случае неравных эффективных масс имеют соответственно вид

$$(L_1^{inter})^{-1} = \sqrt{2m_C \Omega_C} + \sqrt{2m_V (\Omega_V - 2J_i M)},$$

$$(L_2^{inter})^{-1} = \sqrt{2m_V \Omega_V} + \sqrt{2m_C (\Omega_V - 2J_i M)}.$$

Длины  $L_{1,2}^{inter}$  определяют характерный масштаб затухания суперобменного взаимодействия в межзонном канале и превышают межатомное расстояние.

Вклад порядка  $A_{CV} = A_{VC}^*$  в МОС можно представить себе как результат виртуального процесса, в котором электрон со спином, направленным вверх, из интерфейсного состояния на левой границе уходит в зону проводимости полупроводника, при этом освободившееся состояние занимает электрон со спином, направленным вниз, пришедший из валентной зоны полупроводника; далее, на вакантное место в валентной зоне приходит электрон из интерфейсного состояния на правой границе, которое сразу же занимает электрон из зоны проводимости. Аналогичные процессы происходят, разумеется, и в обратном направлении, с заменой левой границы на правую и спина «вверх» на спин «вниз».

Важно подчеркнуть, что межзонный интеграл  $A_{CV}(L)$  имеет ФМ-знак в противоположность АФМ-знаку внутризонного интеграла  $A_C(L)$  или  $A_V(L)$ . Причем абсолютные значения этих интегралов и масштаб их спада с ростом длины  $L$ , как видно из вышеприведенных формул, имеют одинаковый порядок. Вообще говоря, результат конкуренции между ФМ- и АФМ-вкладами зависит от положения расщепленного по спину уровня с энергией  $\varepsilon_0 - J_i M < 0$ ,  $\varepsilon_0 \pm J_i M$  (реально квазидвумерной поверхностной или интерфейсной зоны) относительно краев зон  $E_C(\mathbf{K}_C)$  и  $E_V(\mathbf{K}_V)$  и от отношения эффективных масс  $m_C/m_V$ .

Отметим, что проведенные расчеты интегралов суперобмена формально во многом похожи на соответствующие вычисления, выполненные в работе [34] при исследовании взаимодействия двух точечных магнитных примесей в модели двухзонного полупроводника. Полученные в работе [34] результаты, однако, достаточно сильно отличаются от наших, поскольку в «примесной» ситуации потенциал гибридизации локализованных и зонных состояний не является периодической функцией в плоскости  $(x, y)$ , из-за чего совершенно по-разному выполняется интегрирование по квазиимпульсам. Кроме того, структура интерфейсных спин-поляризованных состояний в пределе слабой электронной корреляции, рассмотренная в нашей модели, совершенно отличается от структуры локальных примесных уровней для модели Андерсона в пределе сильной электронной корреляции, используемой в работе [34].

## ЛИТЕРАТУРА

1. D. E. Burgler, M. Buchmeier, S. Cramm, S. Eisbitt et al., J. Phys.: Condens. Matter **15**, S443 (2003).

2. B. Briner and M. Landolt, Phys. Rev. Lett. **73**, 340 (1994).
3. J. J. de Vries, J. T. Kohlhepp, F. J. A. den Broeder, R. Coehoorn et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 3023 (1997); M. Schleberger, P. Walser, M. Hunziker, and M. Landolt, Phys. Rev. B **60**, 14360 (1999).
4. G. Strijkers, J. T. Kohlhepp, H. G. Swagten, and W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. **84**, 1812 (2000).
5. Г. С. Патрин, С. Г. Овчинников, Д. А. Великанов, В. П. Кононов, ФТТ **43**, 1643 (2001).
6. E. Fullerton and S. Bader, Phys. Rev. B **53**, 5112 (1996).
7. J. Kohlhepp, M. Valkier, A. van der Graaf, and F. J. A. den Broeder, Phys. Rev. B **55**, R696 (1997).
8. R. W. E. van der Kruijs, M. Th. Rekveldt, H. Fredrikze et al., Phys. Rev. B **65**, 06440 (2002).
9. C. B. Duke, *Tunneling in Solids*, in *Tunneling Phenomena in Solids*, ed. by E. Burstein and S. Lundquist, Plenum, New York (1969); M. D. Stiles, in *Ultrathin Magnetic Structures III*, ed. by B. Heinrich and J. A. C. Bland, Springer, New York (2005).
10. Y. P. Lee, C. O. Kim, J. Y. Baek, K. W. Kim et al., J. Magn. Magn. Mater. **226–230**, 1790 (2001).
11. Y. Endo, O. Kitakami, and Y. Shimada, Phys. Rev. B **59**, 4279 (1999).
12. R. R. Gareev, D. E. Burgler, M. Buchmeier, D. Olligs et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 157202 (2001).
13. R. R. Gareev, D. E. Burgler, M. Buchmeier, R. Schreiber et al., J. Magn. Magn. Mater. **240**, 237 (2002).
14. B. Croonenborghs, F. M. Almeida, C. L'abbe, R. R. Gareev et al., Phys. Rev. B **71**, 024410 (2005).
15. J. C. Slonczewski, Phys. Rev. B **39**, 6995 (1989).
16. P. Bruno, Phys. Rev. B **52**, 411 (1995).
17. K. Xia, W. Zhang, M. Lu, and H. Zhai, Phys. Rev. B **56**, 14901 (1997).
18. M. Stiles, J. Magn. Magn. Mater. **200**, 322 (1999).
19. Z.-P. Shi, P. Levy, and J. Fry, Europhys. Lett. **26**, 473 (1994).
20. J. M. Pruneda, R. Robles, S. Bouarab, J. Ferrer et al., Phys. Rev. B **65**, 02440 (2001).
21. E. Kulatov, H. Ohta, T. Arioka, S. Halilov, and L. Vinokurova, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 9043 (1997); E. Kulatov and H. Ohta, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 2386 (1997).
22. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Москва, Наука (1962).
23. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Москва, Наука (1972).
24. V. Tugushev, E. Kulatov, and O. Navarro, Microelectr. J. **36**, 472 (2005).
25. J. C. Slonczewski, Phys. Rev. Lett. **67**, 3172 (1991).
26. Т. Морна, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Москва, Мир (1988).
27. V. Menshov and V. Tugushev, submitted to Physica B (2006).
28. J. C. Slonczewski, J. Appl. Phys. **73**, 5957 (1993).
29. J. M. Fallon, C. A. Faunce, H. J. Blythe, and P. J. Grundy, J. Magn. Magn. Mater. **198–199**, 728 (1999).
30. J. M. Fallon, C. A. Faunce, and P. J. Grundy, J. Appl. Phys. **87**, 6833 (2000); J. Phys.: Condens. Matter **12**, 4075 (2000); J. Appl. Phys. **88**, 2400 (2000).
31. P. J. Grundy, J. M. Fallon, and H. J. Blythe, Phys. Rev. B **62**, 9566 (2000).
32. K. Inomata and Y. Saito, J. Appl. Phys. **81**, 5344 (1997).
33. C. Quirós, J. I. Martín, L. Zárate, M. Vélez et al., Phys. Rev. B **71**, 024423 (2005).
34. V. Barzykin, Phys. Rev. B **71**, 155203 (2005).