

ФЕРРОМАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В СПЛАВАХ КРЕМНИЙ–МАРГАНЕЦ С ФАЗОВОЙ СЕГРЕГАЦИЕЙ

B. H. Меньшов^{}, B. B. Тугушев^{**}*

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

Поступила в редакцию 30 октября 2010 г.

Предложена феноменологическая модель высокотемпературного ферромагнетизма в сплавах Si:Mn. Принята во внимание фазовая сегрегация этих сплавов, при которой внутри обедненной марганцем матрицы почти чистого кремния образуются обогащенные марганцем частицы вторичной фазы (преципитата $MnSi_{2-z}$ с $z \approx 0.25\text{--}0.30$). Преципитат $MnSi_{2-z}$ рассматривается как силицид $MnSi_{1.7}$, содержащий некоторое количество магнитных дефектов, происхождение которых связано с наличием слабогибридизованных 3d-орбиталей марганца. Силицид $MnSi_{1.7}$ является слабым зонным ферромагнетиком, в котором сильные флуктуации спиновой плотности (парамагноны) имеют место при температуре, значительно превышающей его собственную температуру Кюри. Показано, что благодаря термическим возбуждениям спиновой плотности существует ферромагнитное обменное взаимодействие между магнитными моментами дефектов в преципитате и ферромагнитный порядок может возникнуть при температуре, значительно превышающей собственную температуру Кюри силицида. В рамках предложенной схемы описаны пространственные структуры и характеристики такого порядка в случаях как однородного объемного преципитата, так и частиц преципитата различной геометрии и размеров. С учетом наличия неоднородностей в распределении магнитных дефектов в преципитате проанализирован ближний магнитный порядок в окрестности объемного фазового перехода. Экспериментальные данные по магнитным свойствам сплавов Si:Mn интерпретируются в рамках полученных теоретических результатов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитные полупроводники на основе кремния привлекли заметный интерес после наблюдения в них ферромагнитного (ФМ) порядка с высокой температурой Кюри $T_C \approx 400$ К. Первые исследования были выполнены на кристаллических пленках, приготовленных посттермической обработкой аморфного сплава Si:Mn с содержанием марганца 5 ат. % [1] и на монокристаллических Si-пластинах, содержащих 0.1–0.8 ат. % имплантированных ионов Mn^+ [2]. Позднее было обнаружено ФМ-состояние с $T_C \approx 250$ К в однородно допированных пленках $Si_{1-x}Mn_x$, $x \approx 0.03\text{--}0.05$, выращенных магнетронным напылением с последующим быстрым отжигом [3]. Ферромагнетизм выше комнатной температуры был также зарегистрирован в мультислойной структуре $[Si(20\text{ \AA})/Mn(t)]$ с номинальной толщиной дельта-слоя $t = 1, 1.5, 2\text{ \AA}$ [4]. Казалось бы, приведенные экспериментальные факты подтверждают осно-

ванное на численных расчетах теоретическое предсказание [5] о возможности высокотемпературного ФМ-порядка в разбавленных сплавах Si:Mn. Согласно работе [5], такой порядок описывается в рамках известной модели РККИ–Зинера, если предположить, что атомы Mn выполняют двойную роль: 1) обеспечивают существование локальных магнитных моментов (примерно равных $3\mu_B$ на атом Mn) в решетке Si; 2) поставляют свободные носители (дырки), которые осуществляют косвенное обменное взаимодействие между локальными моментами на узлах Mn. Однако детальные рентгеновские измерения [6–8] и данные трансмиссионной электронной микроскопии [9] заставляют усомниться, что описанный выше популярный сценарий (carrier mediated ferromagnetism), используемый для описания ФМ-порядка в разбавленных магнитных полупроводниках (РМП), даже качественно пригоден для сплавов Si:Mn.

Результаты работ [6–8] показывают, что атомы Mn находятся не только в позициях замещения или

^{*}E-mail: vnmenshov@mail.ru

^{**}E-mail: tuvictor@mail.ru

внедрения в решетку Si, как предполагает теория [5]. Напротив, почти весь марганец предпочитает войти в состав молекулярных кластеров, структура которых подобна структуре ближнего порядка в неоднородных или деформированных силицидах марганца, где каждый атом Mn имеет от пяти до восьми атомов Si в качестве ближайших соседей. С ростом концентрации марганца как в имплантированных, так и в быстро отожженных образцах Si:Mn такие кластеры имеют тенденцию к формированию наночастиц преципитата различного состава. Магнитное состояние атома Mn в преципитате принципиально отличается от магнитного состояния изолированного примесного центра Mn в решетке Si. Например, в работе [8] ФМ-порядок в дипированном марганцем аморфном кремнии $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ зарегистрирован не был; в то же время, для широкой области составов ($0.01 \leq x \leq 0.175$) магнитная восприимчивость следовала закону Кюри–Вейсса, но с экстремально низким эффективным моментом. Такое поведение указывает на то, что только малая доля атомов Mn дает вклад в намагниченность, а большинство атомов Mn магнитно-неактивные, вопреки общепринятым положениям о существовании большого локализованного момента на примесном центре Mn в решетке Si. Наблюдавшийся в ряде работ [7–10] низкотемпературный ферромагнетизм с намагниченностью насыщения порядка $0.2\mu_B$ на атом Mn связывался с присутствием наноразмерных преципитатов так называемой тетрагональной фазы $\text{MnSi}_{1.7}$. Известно [11, 12], что фаза $\text{MnSi}_{1.7}$ включает несколько стехиометрических соединений, таких как силициды Mn_4Si_7 , $\text{Mn}_{11}\text{Si}_{19}$ и др., которые, как правило, являются слабыми зонными ферромагнетиками с низкой температурой Кюри $T_C < 50$ К и очень малым эффективным моментом, примерно $0.01\mu_B$ на атом Mn.

Изучение структурных, магнитных и транспортных свойств образцов Si:Mn, в которых марганец присутствовал как в междоузлиях решетки Si (в меньшей степени), так и в частицах преципитата (в большей степени), выявило довольно замысловатое температурное поведение намагниченности [3, 13]. Было показано, что существуют две (около 50 К и 250 К [3]) или даже три (около 45 К, 630–650 К и 805–825 К [13]) различные критические температуры. Авторы объяснили результаты присутствием различных магнитных фаз в исследованных образцах. Отметим, что только нижняя критическая температура (45 или 50 К) может быть с достаточной определенностью связана с возникновением зонного ФМ-порядка в преципитате. При этом ключевой

вопрос о происхождении высокотемпературных магнитных состояний остался открытым.

В работе [14] были исследованы транспортные и магнитные свойства пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ с большим содержанием марганца, $x \approx 0.35$, полученных методом лазерного напыления. Эти пленки обладали аномальным эффектом Холла с гистерезисом и выраженной металлической (дырочной) проводимостью (в отличие от полупроводниковой проводимости в материалах с низким содержанием Mn, изучавшихся в работах [1–3]). В то же время из магнитных измерений [14] были определены температура Кюри $T_C \approx 250$ К и момент $(0.1\text{--}0.2)\mu_B$ на атом Mn, которые близки к соответствующим характеристикам, найденным в [1–3].

Обсужденные выше экспериментальные данные ясно демонстрируют, что в сплаве Si:Mn в широком интервале содержания марганца от 0.5 до 35 ат. % ферромагнетизм часто возникает при температурах порядка комнатной, но природа данного явления остается невыясненной. Принципиально непонятными являются два момента: 1) причина образования магнитных моментов и степень их локализации; 2) механизм обменной связи между моментами. В частности, авторы работы [15] предположили, что ФМ-порядок не связан ни с изолированными центрами Mn в решетке Si, ни с частицами преципитата. Они связали возможное происхождение этого порядка с параметрическими дефектами типа обогреванных связей, которые появляются в кристаллической решетке Si в процессе ионной имплантации не только магнитных (Mn), но и немагнитных (Ar, Si) ионов [15, 16]. Подобное предположение не лишено оснований, хотя само по себе мало что проясняет в проблеме механизма обменной связи между магнитными моментами дефектов.

Попытка объяснения высокотемпературного ферромагнетизма в сплаве Si:Mn в рамках стандартной схемы непрямого обмена между моментами, локализованными на атомах Mn, через свободные носители в матрице Si встречает серьезные возражения. Суть их заключается в том, что в Si:Mn концентрация локальных моментов крайне мала (намного меньше полной концентрации атомов Mn) и не может, в рамках модели РККИ–Зинера, обеспечить высокую температуру ФМ-порядка, наблюдавшуюся в ряде экспериментов. Атомы Mn, легко диффундируя по матрице Si, проявляют выраженную тенденцию к образованию вторичной фазы MnSi_{2-z} , близкой по составу к силициду $\text{MnSi}_{1.7}$. Являясь компонентами химического соединения, атомы Mn в силициде поставляют свои

3d-орбитали для гибридизации и образования химических связей с 4(s, p)-орбиталями атомов Si. Как результат, валентные состояния в силициде имеют квазизонный характер с делокализованной спиновой плотностью. С другой стороны, высокотемпературный ферромагнетизм в системе Si:Mn не может рассматриваться исключительно в терминах теории зонного магнетизма для преципитата. Это связано с тем, что температура Кюри и эффективный магнитный момент, присущие силицидам типа MnSi_{1.7}, значительно (на порядок величины) меньше по сравнению с соответствующими характеристиками, полученными экспериментально для сплавов Si:Mn.

Таким образом, необходим иной подход к описанию механизма обменной связи, обеспечивающей высокотемпературный ФМ-порядок в сплавах Si:Mn. В настоящей работе мы предлагаем один из вариантов такого описания, рассматривая данные сплавы, имеющие сильную тенденцию к фазовому разделению, как двухкомпонентную систему, а именно, считаем, что почти все атомы Mn сосредоточены в частицах преципитата MnSi_{2-z} с $z \approx 0.25\text{--}0.30$, окруженных матрицей Si. Согласно данным работ [15, 17], типичный размер частиц преципитата оценивается как $D_0 \approx 5\text{--}40$ нм. В принципе, состав и размер частиц преципитата зависят от способа приготовления и термической истории образца. С ростом содержания марганца отдельные частицы переклируют и, как следует из [14], могут образовать макроскопически большие (субмикронные) области.

Мы предполагаем, что преципитат MnSi_{2-z} состоит из силицида MnSi_{1.7} и растворенных в нем магнитных дефектов; иными словами, присутствие в объеме силицида MnSi_{1.7} некоторого количества атомов Mn с несвязанными 3d-орбиталями считается неизбежным. Роль таких дефектов могут выполнять, в частности, изолированные атомы Mn, случайно оказавшиеся в «неправильном» окружении атомов Si, либо устойчивые комплексы из двух близко расположенных атомов Mn (димерные комплексы Mn-Si), обладающие локальными моментами. Еще одним источником магнитных дефектов может служить граница (интерфейс) между силицидом MnSi_{1.7} и матрицей Si. В свою очередь, собственно силицид MnSi_{1.7} рассматривается как слабый зонный ферромагнетик, в котором сильные спиновые флуктуации (парамагноны) существуют при температурах, значительно превышающих его температуру Кюри. Через термически возбужденные спиновые флуктуации осуществляются обменные взаимодействия между магнитными дефекта-

ми, растворенными в силициде MnSi_{1.7} и/или присутствующими на границе MnSi_{1.7}/Si. Данное предположение о характере обменной связи в преципитате MnSi_{2-z} лежит в основе рассматриваемого механизма возникновения ферромагнетизма в двухкомпонентном сплаве Si:Mn при температуре, заметно превышающей собственную температуру Кюри силицида MnSi_{1.7}. Отметим, что гипотеза о возможности увеличения температуры Кюри в РМП за счет эффекта стонеровского усиления РККИ-обмена высказывалась в работе [21]. Чтобы прояснить специфику столь деликатного эффекта в нашей ситуации, мы используем феноменологический подход, который дает возможность качественно описать как дальний, так и близкий ФМ-порядок на различных пространственных масштабах.

Необходимо сделать следующее пояснение. Многие авторы относят систему Si:Mn к классу РМП. Мы считаем, что использование термина «разбавленный», строго говоря, не является корректным в случае сплава (материала), в котором один из компонентов (Mn) отнюдь не растворен в другом (Si), а участвует главным образом в образовании вторичной фазы. В нашем изложении для обозначения рассматриваемой системы используются термины «сплав (материал) Si:Mn» или «сплав (материал) Si_{1-x}Mn_x».

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В идеальном объемном силициде MnSi_{1.7} (который допускает несколько фаз, таких как Mn₄Si₇, Mn₁₁Si₁₉, Mn₁₅Si₂₆ и т. д.) 3d-состояния марганца сильно гибридизуются с 4(s, p)-состояниями кремния, так что спиновая плотность почти полностью делокализована [18, 19]. Силицид MnSi_{1.7} может рассматриваться как слабый зонный ферромагнетик или обменно-усиленный парамагнетик. Расчеты *ab initio* [18] показывают, что различные стехиометрические фазы силицида MnSi_{1.7} могут быть полупроводниковыми, металлическими и полуметаллическими. Вычисления с учетом спиновой поляризации для Mn₁₁Si₁₉, Mn₁₅Si₂₆ и Mn₂₇Si₄₇ выявили полуметаллический (half-metallic) характер этих фаз, где дырки на уровне Ферми полностью поляризованы по спину. Идеально стехиометрический и недеформированный силицид Mn₄Si₇ оказался непрямозонным полупроводником, хотя малое отклонение от стехиометрии или слабая деформация ведут к схлопыванию энергетической щели, трансформируя систему в металл.

В реальных образцах Si:Mn, вне зависимости от того, каким способом они были получены, имеется сильный структурный беспорядок. В частности, кристаллическая решетка преципитата MnSi_{2-z} весьма далека от регулярной периодичности силицида $\text{MnSi}_{1.7}$, где каждый атом марганца координирован с восемью атомами кремния. В случае, близком к идеальному, преципитат MnSi_{2-z} можно представить как смесь нескольких фаз силицида $\text{MnSi}_{1.7}$, в которой координационное число марганца локально флуктуирует. В реальном сплаве $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$, согласно исследованию [6], у атома Mn в ближайшем соседстве может находиться от пяти до восьми атомов Si. Подобного рода нарушение структурного порядка в преципитате ведет к локализации волновой функции валентных $3d$ -электронов на узлах Mn. Таким образом, некоторая часть атомов Mn в преципитате обретает локализованный момент. В этом контексте мы можем моделировать преципитат MnSi_{2-z} как силицид $\text{MnSi}_{1.7}$ с растворенными в нем точечными магнитными дефектами, для которых далее используется обозначение Mn_d (Mn_d -дефект). По величине эффективного момента $((2-3)\mu_B$ на атом Mn) и по координации в решетке такие дефекты можно сопоставить с одиночными центрами Mn в тетраэдрическом междоузлии (Mn_t -дефект) или с димерными комплексами ($\text{Mn}_\text{Si}-\text{Mn}_t$, Mn_t-Mn_t) (Mn_Si обозначает атом Mn в позиции замещения), которые свойственны системе Si:Mn с низким содержанием марганца [20].

Магнитное состояние наночастицы преципитата MnSi_{2-z} , помещенной в матрицу Si, может существенно отличаться от магнитного состояния объемного силицида $\text{MnSi}_{1.7}$. Помимо Mn_d -дефектов в объеме силицида источником магнитных моментов может стать граница раздела фаз $\text{MnSi}_{1.7}/\text{Si}$. Так как координационное число для Mn на интерфейсе $\text{MnSi}_{1.7}/\text{Si}$ меньше, чем в объеме $\text{MnSi}_{1.7}$, волновые функции $3d$ -орбиталей атома Mn более локализованы. Полученный на основе расчетов *ab initio* [19] магнитный момент интерфейсного атома Mn составляет примерно $1\mu_B$, т. е. значительно превосходит момент, приходящийся на атом Mn в объеме $\text{MnSi}_{1.7}$. Напомним, что величина момента на межузельном атоме Mn в матрице Si равна $(2-3)\mu_B$ [20], а момент на атом Mn, замещающий галлий в матрице GaAs, имеет номинальное значение $(4-5)\mu_B$ [21].

Из изложенного выше представляется вполне естественным условию разделить спиновую плотность в преципитате MnSi_{2-z} на две составляющие: делокализованную, которая свойственна слабому зонному ферромагнетику $\text{MnSi}_{1.7}$, и локализован-

ную, которая возникает вблизи Mn_d -дефектов и / или на интерфейсных атомах Mn. В рамках такого разделения несложно понять, почему эффективный магнитный момент (в расчете на атом Mn), найденный в экспериментах на сплавах $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ с малым содержанием переходного металла, существенно отличается от эффективного магнитного момента в сплавах с содержанием марганца, достаточно высоким для возникновения вторичной фазы.

Предположим, что размер частицы преципитата (окруженной матрицей Si) столь велик, что можно пренебречь вкладом интерфейсных атомов Mn в полную намагниченность и их влиянием на ФМ-упорядочение внутри частицы. Учитывая, что вклад в эффективную намагниченность (имеется в виду намагниченность насыщения в расчете на атом Mn) вносят два ингредиента — намагниченность объемного силицида Mn_4Si_7 (примерно $0.01\mu_B$ на атом Mn) и намагниченность, происходящая от Mn_d -дефектов ($(2-3)\mu_B$ на атом Mn), формально получаем среднюю намагниченность $(0.1-0.2)\mu_B$ на атом Mn для двухкомпонентного преципитата $(\text{Mn}_4\text{Si}_7)_{1-y}(\text{Mn}_d)_y$ с $y \approx 0.04-0.08$. Полагаясь на эту оценку, приходим к заключению, что лишь 4–8 % атомов Mn в преципитате участвуют в формировании Mn_d -дефектов, которые вносят основной вклад в намагниченность. Столь малая концентрация дефектов, несущих локальный магнитный момент, явно недостаточна для объяснения высокотемпературного ферромагнетизма в сплаве Si:Mn в рамках модели РККИ–Зинера. Действительно, при указанной концентрации дефектов среднее расстояние a_0 между магнитными моментами превышает 1 нм. Предлагая концентрацию свободных носителей порядка 10^{22} см^{-3} (типичную для металлических силицидов) находим, что период РККИ-осцилляций сопоставим с расстоянием a_0 , $2k_F a_0 \approx 5$, где $k_F \approx 2.5 \text{ нм}^{-1}$ — волновой вектор Ферми. Согласно модели РККИ, знак взаимодействия между Mn_d -дефектами является в этом случае знакопеременной величиной, и система имеет тенденцию к переходу в фазу спинового стекла, что не согласуется с экспериментально наблюдаемым ФМ-состоянием преципитата.

Предлагаемый подход постулирует, что Si:Mn является сложным, пространственно-неоднородным материалом. Он состоит из полупроводниковой матрицы Si, в которой присутствует вторичная фаза в виде частиц металлического преципитата MnSi_{2-z} , содержащих почти весь марганец. С увеличением содержания Mn частицы преципитата переколирируют через матрицу и (по достижении некоторой концентрации Mn) образуют бесконечный кластер, прояв-

ляющийся в виде макроскопической области, занятой преципитатом MnSi_{2-z} .

В настоящем исследовании мы сконцентрируемся на вопросе магнитного упорядочения в преципитате, выделив три следующих аспекта. Во-первых, используя континуальное приближение, мы проанализируем спин-флуктуационный механизм обменной связи между магнитными Mn_d -дефектами, однородно растворенными в объемном силициде $\text{MnSi}_{1.7}$. Во-вторых, будет показано, что эффекты ближнего порядка могут в значительной мере модифицировать ФМ-переход в объемном преципитате с позиционным беспорядком в распределении Mn_d -дефектов. В-третьих, мы предложим модель усиления ФМ-порядка в ограниченном преципитате, для которого интерфейс $\text{MnSi}_{1.7}/\text{Si}$ служит источником магнитных моментов. Континуальное приближение вполне оправдано в области температур, намного превышающих собственную температуру Кюри силицида $\text{MnSi}_{1.7}$, где характерный масштаб пространственных изменений спиновой плотности в слабом зонном ферромагнетике (т. е. корреляционная длина) мал по сравнению с размером частицы преципитата. Вопрос о взаимодействии между ФМ-частицами преципитата через изолирующую матрицу, важный для понимания эволюции магнитного порядка в низкотемпературной области (при температурах порядка или ниже собственной температуры Кюри силицида), в данной работе не рассматривается.

3. ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИЗМ В ОДНОРОДНОМ ПРЕЦИПИТАТЕ MnSi_{2-z} С МАГНИТНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

В данном разделе мы коротко напомним основные результаты, которые были получены ранее в рамках приложения феноменологической теории слабого зонного ферромагнетизма к объемному преципитату MnSi_{2-z} [22]. Чтобы описать ФМ-упорядочение в однородном силициде $\text{MnSi}_{1.7}$, необходимо выйти за пределы теории среднего поля, введя в рассмотрение термические спиновые флуктуации. В рамках подхода работ [23, 24] уменьшение критической температуры относительно среднеполевого значения T_C^0 выражается через спин-флуктуационную перенормировку коэффициента при квадратичном члене в функционале свободной энергии слабого зонного ферромагнетика,

$$F_0\{\varphi\} = \int d\mathbf{r} \left[\alpha\varphi^2 + \beta\varphi^4 + \gamma \left(\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{r}} \right)^2 \right], \quad (1)$$

где $\varphi(\mathbf{r})$ — коллективная намагниченность зонных электронов в точке \mathbf{r} , усредненная по ансамблю гауссовых спиновых флуктуаций. Коэффициент α запишем как $\alpha = \alpha^{(0)} + \alpha_{SF}$, где среднеполевой вклад $\alpha^{(0)}$ отрицательный и почти не зависит от температуры при $T < T_C^0$, слагаемое α_{SF} возникает благодаря спиновым флуктуациям; $\beta \approx W^{-3}$, $\gamma \approx v_F^2 W^{-3}$, где W и v_F — соответственно ширина зоны и скорость на поверхности Ферми зонных электронов. Собственная температура Кюри силицида T_C^s ($T_C^s \ll T_C^0 \approx \sqrt{|\alpha^{(0)}|W^3}$) определяется условием $\alpha = 0$ или $|\alpha^{(0)}| = \alpha_{SF}$. В парамагнитной (ПМ) фазе, при $T > T_C^s$, в приближении связанных мод [23, 24] имеем следующее уравнение для корреляционной длины $\zeta = \sqrt{\gamma/\alpha}$:

$$\frac{1}{(\zeta Q)^2} = \frac{T}{T_0} \left[1 - \frac{\arctg(\zeta Q)}{\zeta Q} \right] - \frac{T_C^s}{T_0}, \quad (2)$$

где импульс Q задает эффективное число флуктуационных мод и является параметром феноменологической модели, величина T_0 ($T_0 = \pi^2 \gamma^2 Q / 5\beta a^3 \approx \approx v_F Q \leq W$) задает температурный масштаб, a — постоянная решетки силицида. Полагая $\zeta Q \rightarrow \infty$, получаем из (2) температуру перехода:

$$T_C^s = \frac{|\alpha^{(0)}| T_0}{\gamma Q^2}.$$

Простая оценка показывает, что $T_C^s \ll T_0, T_C^0$. В ПМ-фазе длина ζ значительно перенормируется по сравнению со среднеполевым значением $\sqrt{\gamma/|\alpha^{(0)}|}$. Из (2) можно видеть, что режим $\zeta Q \gg 1$ достигается при выполнении условия $T_C^s < T \ll T_0$. При этом, если $T^2/T_0 \ll T - T_C^s \ll T_0$, находим

$$\zeta Q \approx \sqrt{\frac{T_0}{T - T_C^s}}. \quad (3)$$

Простой подход [24] серьезно переоценивает роль спиновых флуктуаций при низких температурах и дает систематическую ошибку вблизи точки T_C^s из-за плохого учета коротковолновых (критических) мод. Даже для модели Хаббарда не существует общепризнанного микроскопического метода для корректного учета таких мод. Данная проблема хорошо известна для самосогласованной теории слабых зонных ферромагнетиков; в рамках более рафинированных приближений вектор обрезания Q считается той или иной функцией температуры для установления соответствия с результатами соответствующего микроскопического расчета (см. дискуссию

в [23]). С другой стороны, приближение связанных мод [24] на качественном уровне вполне приемлемо в интересующей нас области $T \gg T_C^s$, где оно соответствует результатам высокотемпературного разложения в микроскопической самосогласованной теории спиновых флуктуаций. В дальнейшем мы ограничимся простым приближением, которое включает в рассмотрение длинноволновые флуктуации спиновой плотности в силициде и вполне корректно учитывает температурное поведение корреляционной длины в ПМ-фазе.

Мы рассматриваем преципитат MnSi_{2-z} как сложную систему, состоящую из силицида $\text{MnSi}_{1.7}$ и растворенных в нем Mn_d -дефектов. Силицид $\text{MnSi}_{1.7}$ описывается в терминах слабого зонного ферромагнетика с собственной температурой Кюри T_C^s ; Mn_d -дефект характеризуется как классический локальный момент. В области высоких температур, значительно превышающих T_C^s , Mn_d -дефекты становятся центрами зарождения областей ближнего магнитного порядка на конечной длине порядка ζ — так называемых ФМ-капель. В ПМ-области, $T > T_C^s$, функционал $F_0\{\varphi\}$ (1), описывающий объемный силицид $\text{MnSi}_{1.7}$, достигает минимума при нулевом значении параметра порядка φ . Следуя концепции локального фазового перехода [25], вводим слагаемое

$$F_d\{\varphi\} = \kappa \sum_i \varphi(\mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{S}_i,$$

которое моделирует обменное взаимодействие между делокализованной спиновой плотностью φ (связанной с гибридизованными $3d$ -состояниями Mn и $4(s, p)$ -состояниями Si в силициде), и Mn_d -дефектом, расположенным в точке \mathbf{R}_i и несущим локальный момент \mathbf{S}_i . Параметр обменной связи κ можно оценить как $|\kappa| \propto J_{pd} W^{-1}$, где J_{pd} — матричный элемент $p-d$ -обмена. В рамках функционала свободной энергии для преципитата, $F\{\varphi\} = F_0\{\varphi\} + F_d\{\varphi\}$, удается выявить эффективную обменную связь между Mn_d -дефектами через спиновые флуктуации. Подробности вычислений можно найти в работе [22]. Во втором порядке по параметру κ выражение для энергии парного взаимодействия локальных моментов принимает вид

$$F_{ex}^{SF} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij}^{SF} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} J_{ij}^{SF} &\equiv J^{SF}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) = \\ &= -\frac{\kappa^2}{4\pi\gamma} \frac{\exp(-|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|/\zeta)}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}. \end{aligned} \quad (5)$$

Как видно из (5), обменный интеграл J_{ij}^{SF} имеет ФМ-знак ($J_{ij}^{SF} < 0$) и экспоненциально убывает с увеличением расстояния между Mn_d -дефектами на масштабе спиновых флуктуаций. Этот результат справедлив при относительно низкой концентрации n_d Mn_d -дефектов в преципитате, когда среднее расстояние между ними $a_0 \approx n_d^{-1/3}$ так велико, что $a_0 > \bar{r}$, где \bar{r} — характерный радиус, который можно оценить из соотношения $(\bar{r}/\zeta) \exp(\bar{r}/\zeta) \approx \kappa S \sqrt{\beta/\gamma^3}$ [22]. Специфика ФМ-упорядочения при относительно высокой концентрации дефектов, когда $a_0 \leq \bar{r}$ и, следовательно, $a_0 \ll \zeta$, будет исследована в следующем разделе нашей работы.

Мы рассматриваем появление высокотемпературного ФМ-порядка в преципитате MnSi_{2-z} как фазовый переход из полностью разупорядоченного в частично упорядоченное состояние в двухкомпонентной магнитной системе. С понижением температуры растет перекрытие между ФМ-каплями, индуцированными соседними Mn_d -дефектами, соответственно усиливается обменная связь J_{ij}^{SF} (5). Наконец, по достижении критической температуры T_C^p , во всем объеме преципитата устанавливается дальний ФМ-порядок. В интервале $T_C^p > T > T_C^s$ в преципитате реализуется особое состояние с дальним ФМ-порядком как среди капель (делокализованная спиновая плотность), так и среди моментов \mathbf{S}_i (локализованная на Mn_d -дефектах спиновая плотность), т. е. существуют нетривиальные средние, $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle_C$ и $\langle \sum_i \mathbf{S}_i \rangle_C$, где $\langle \dots \rangle_C$ означает термодинамическое усреднение по ориентациям спиновой плотности и конфигурационное усреднение по позициям Mn_d -дефектов. При этом параметр порядка остается сравнительно малой величиной, $|\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle_C| \ll \sqrt{\langle \eta^2 \rangle}$. Выше температуры T_C^p дальний ориентационный порядок исчезает, но близкий порядок в виде ФМ-капель с $\langle \varphi^2(\mathbf{r}) \rangle_C \neq 0$ сохраняется формально при сколь угодно высокой температуре. Еще раз укажем, что T_C^s — это температура спонтанного замерзания спиновых флуктуаций в объемном силициде $\text{MnSi}_{1.7}$ в отсутствие дефектов. В то же время T_C^p — температура возникновения упорядоченной намагниченности ФМ-капель и одновременно локальных моментов \mathbf{S}_i на Mn_d -дефектах в преципитате MnSi_{2-z} .

Рассмотрим фазовый переход для эффективного гамильтонiana F_{ex}^{SF} (4) в приближении среднего поля, где $\mathbf{S}_i \rightarrow \langle \mathbf{S} \rangle_C$, что аналогично приближению молекулярного поля Вейсса для модели локальных спинов на узлах решетки. Используем хорошо известную формулу для среднего момента на узле:

$$\langle S \rangle_C = SL \left(\frac{J_0^{SF} S \langle S \rangle_C}{k_B T} \right), \quad (6)$$

где $L(b) = \operatorname{cth}(b) - 1/b$ — функция Ланжевена, $J_0^{SF} = \left| \sum_j J_{ij}^{SF} \right|$, k_B — постоянная Больцмана. Соответственно, температура Кюри в преципитате оценивается из уравнения

$$T_C^p = \frac{S^2}{3k_B} J_0^{SF}(T_C^p), \quad (7)$$

поскольку обменный интеграл (5) зависит от температуры, $J_{ij}^{SF} = J_{ij}^{SF}(T)$, через перенормированную корреляционную длину $\zeta(T)$. Далее мы ограничим анализ режимом (3) для зависимости $\zeta(T)$. Вблизи точки перехода T_C^p средний момент на узле изменяется как

$$\frac{\langle S \rangle_C}{S} = \sqrt{\frac{5}{3}} \frac{2T_C^p - T_C^s}{T_C^p - T_C^s} \left(1 - \frac{T}{T_C^p} \right).$$

В общем случае решение уравнения (6) найдено численно, при этом отношение T_C^s/T_C^p играет роль параметра. Кривая 1 на рис. 1 иллюстрирует поведение намагниченности $\langle S \rangle_C$ от температуры при $T_C^s/T_C^p = 0.2$. Примечательно, что зависимость $\langle S \rangle_C(T)$ для локальных моментов, взаимодействующих через спиновые флуктуации, заметно отличается от классической вейссовской формы. Именно,

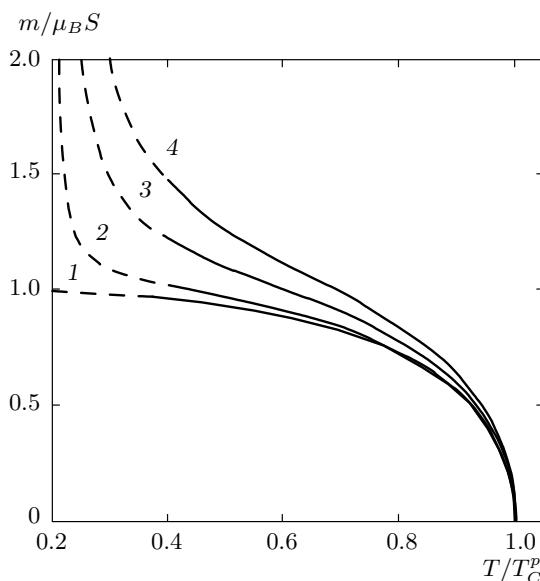


Рис. 1. Температурные зависимости средней величины суммарной намагниченности $m(T)$ (6') в режиме (3) при $T_C^s/T_C^p = 0.2$ для различных значений отношения $(|\kappa|/2|\alpha^{(0)}|)T_C^s/T_C^p = 0$ (1), 0.01 (2), 0.05 (3), 0.1 (4), $\kappa < 0$

с понижением температуры намагниченность $\langle S \rangle_C$ растет более быстро, чем в случае обычного ферромагнетика, и достигает максимума при $T = T_C^s$. Низкотемпературная область $T < T_C^s$ не является предметом нашего исследования.

Суммарная намагниченность преципитата $\mu_B \left(\sum_i \mathbf{S}_i + \int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}) \right)$ включает как локальную, так и нелокальную составляющие. При выполнении условия $a_0 \gg \bar{\rho}$ средняя величина суммарной намагниченности, приходящейся на один Mn_d -дефект, равна

$$m = \mu_B \langle S \rangle_C \left(1 - \frac{\kappa \zeta^2}{2\gamma} \right). \quad (6')$$

Рисунок 1 демонстрирует зависимость $m(T)$ при некоторых значениях безразмерного параметра $(|\kappa|/2|\alpha^{(0)}|)T_C^s/T_C^p$, когда $\kappa < 0$. Если вблизи T_C^p вклад спиновой поляризации носителей незначительный (по отношению к намагниченности локальных моментов в преципитате, пропорциональной $\langle S \rangle_C$), то с приближением к T_C^s он резко возрастает, $\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle_C \propto \zeta^2$. Так как используемое приближение связанных мод плохо учитывает коротковолновые флуктуации, и зависимость $\zeta \propto (T - T_C^s)^{-1/2}$ из (3), строго говоря, не выполняется вблизи T_C^s , кривые в критической области ($T - T_C^s < T_C^s$) на рис. 1 изображены штрихами, чтобы отметить качественный характер зависимости $m(T)$.

Считая, что T_C^p значительно выше, чем T_C^s , оценим при $T_C^p \ll T_0$ корреляционную длину из (3):

$$\zeta(T_C^p) \approx \frac{1}{Q} \sqrt{\frac{T_0}{T_C^p}}.$$

С другой стороны, из определения J_0^{SF} и формулы (5) найдем

$$J_0^{SF} \approx 4\pi n_d \int_0^\infty dR R^2 |J^{SF}(R)| = \frac{n_d \kappa^2 \zeta^2}{\gamma}.$$

Подставляя эти величины в (7), получим

$$T_C^p = \frac{|\kappa| S}{Q} \sqrt{\frac{n_d T_0}{3\gamma k_B}} \approx |\kappa| S \sqrt{\frac{n_d v_F}{\gamma Q k_B}}. \quad (8)$$

В металлическом преципитате $MnSi_{2-z}$ помимо связи локальных моментов через спиновые флуктуации существует связь через одночастичные возбуждения, которая описывается в рамках стандартного подхода РККИ. Сделаем некоторые оценки, чтобы понять, какой из двух механизмов и в какой области параметров является доминирующим. Если принять $a_0 \approx 10-12 \text{ \AA}$ и $k_F^{-1} \approx 3-4 \text{ \AA}^{-1}$, то имеет место ситуация

$a_0 \approx \zeta \gg k_F^{-1}$, пока $\zeta(T_C^p) > k_F^{-1} \sqrt{W/T_C^p} \approx (3\text{--}4)k_F^{-1}$ (k_F — импульс Ферми в преципитате). Соответствующие обменные интегралы равны

$$J_0^{SF} = \frac{n_d J_{pd}^2}{W^2 \alpha}, \quad J_0^{RKKY} \approx n_d J_{pd}^2 / W,$$

$$\frac{J_0^{RKKY}}{J_0^{SF}} \approx W \alpha \ll 1.$$

Соотношение (8) можно переписать в виде

$$T_C^p \approx W \sqrt{\frac{T_C^{RKKY}}{T_0}} \gg (T_C^{RKKY}, T_C^s),$$

$$T_C^{RKKY} \approx \frac{n_d J_{pd}^2}{3Wk_B}.$$

Поэтому, даже если принять «осторожную» оценку $T_C^{RKKY} \approx 10$ К, получим довольно высокую температуру ФМ-перехода в преципитате, $T_C^p \approx \approx 300\text{--}500$ К, в согласии с физически разумными значениями $W \approx 10^4$ К и $T_0 \approx 10^3\text{--}10^4$ К. При очень низкой концентрации дефектов, когда $a_0 \gg (\zeta, k_F^{-1})$, связь между локальными моментами определяется РККИ-взаимодействием, осциллирующий характер которого может привести к состоянию спинового стекла в преципитате. Но этот вопрос лежит за рамками нашего исследования.

4. ВЛИЯНИЕ КРУПНОМАСШТАБНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ КОНЦЕНТРАЦИИ Mn_d-ДЕФЕКТОВ НА ФМ-ПЕРЕХОД В ОБЪЕМНОМ ПРЕЦИПИТАТЕ MnSi_{2-z}

Позиционный беспорядок в распределении Mn_d-дефектов («замороженные» флюктуации концентрации) всегда присутствует в объеме преципитата MnSi_{2-z} и порождает пространственно-неоднородное распределение как зарядовой, так и спиновой плотностей. Особый интерес представляют крупномасштабные (с характерным размером больше a_0) изменения концентрации Mn_d-дефектов, способные, как будет показано ниже, существенно размыть ФМ-переход и вызвать существование сильнонеоднородных магнитных состояний в преципитате. Использованное в предыдущем разделе приближение среднего поля, подразумевающее однородное по системе распределение дефектов, является слишком грубым и не может дать ответ на вопрос о влиянии крупномасштабных флюктуаций распределения Mn_d-дефектов на структуру магнитного порядка в преципитате. Позиционный беспорядок может быть корректно определен при

выполнении условия $a_0 \ll \zeta$, когда можно изначально выполнить усреднение по мелкомасштабным (с характерным размером порядка a_0) флюктуациям концентрации Mn_d-дефектов. После такого усреднения можно записать эффективный функционал «объемной» составляющей свободной энергии $F_0\{\varphi\}$ в прежнем виде (1), но с соответствующим образом перенормированными коэффициентами, учитывающими конечное время жизни носителей, $\tau_f \varepsilon_F \gg 1$ (ε_F — энергия Ферми), и их затухание на длине свободного пробега, $\ell_f \gg a_0$. Кроме того, следует включить в функционал $F_0\{\varphi\}$ член высокого порядка, пропорциональный $\theta\varphi^6$ (смысл этой операции станет ясен из последующего изложения).

Эффективный функционал «дефектной» составляющей свободной энергии $F_d\{\varphi, \Delta\}$ после усреднения по мелкомасштабным флюктуациям концентрации Mn_d-дефектов принимает вид

$$F_d\{\varphi, \Delta\} = \kappa \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \varphi(\mathbf{r}), \quad (9)$$

где $n(\mathbf{r}) = n_d + \Delta(\mathbf{r})$ — флюктуирующая вблизи среднего значения n_d концентрация Mn_d-дефектов, $\Delta(\mathbf{r})$ — крупномасштабная компонента флюктуаций концентрации Mn_d-дефектов, которая вводится таким образом, что $\int d\mathbf{r} \Delta(\mathbf{r}) = 0$; κ — перенормированный параметр обменной связи между спиновой плотностью зонных электронов $\varphi(\mathbf{r})$ и намагниченностью $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle$ Mn_d-дефектов. Вектор $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle$ определяется соотношением

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = -eSL \left(\frac{\kappa S\varphi(\mathbf{r})}{k_B T} \right), \quad (10)$$

e — единичный вектор вдоль направления поларизации $\varphi(\mathbf{r})$. Знак минус в правой стороне уравнения (10) указывает, что векторы $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle$ и $\varphi(\mathbf{r})$ параллельны (антипараллельны) при $\kappa < 0$ ($\kappa > 0$). Выражение (10) предполагает, что намагниченность Mn_d-дефектов ориентируется в эффективном поле, создаваемом крупномасштабной вариацией спиновой плотности носителей, а локальные флюктуации моментов \mathbf{S}_i в позициях \mathbf{R}_i , занятых Mn_d-дефектами, не учитываются. Данное предположение представляется оправданным в пределе «классических» спинов, $S_i \gg 1$, которым мы для простоты ограничиваемся в данной работе. Подставляя соотношение (10) в (9) и разлагая $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle$ в ряд по $\varphi(\mathbf{r})$, удержим в функционале $F_d\{\varphi, \Delta\}$ слагаемые до $\varphi^4(\mathbf{r})$ включительно, что оправдано в области высоких температур, $|\kappa|S\varphi \ll k_B T$. Позиционный беспорядок в распределении Mn_d-дефектов можно теперь рассматривать как беспорядок типа

«случайная температура перехода», поскольку случайная функция $\Delta(\mathbf{r})$ «локально» изменяет коэффициент при члене порядка $\varphi^2(\mathbf{r})$ в полном функционале

$$E\{\varphi, \Delta\} = F_0\{\varphi\} + F_d\{\varphi, \Delta\}. \quad (11)$$

Характер крупномасштабного позиционного беспорядка в распределении Mn_d-дефектов определяется статистическими свойствами случайного поля $\Delta(\mathbf{r})$. Будем считать, что флуктуации концентрации Mn_d-дефектов не коррелированы в пространстве, т. е. $\langle \Delta(\mathbf{r})\Delta(\mathbf{r}') \rangle = \omega\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, а вероятность реализации заданной конфигурации $\Delta(\mathbf{r})$ удовлетворяет гауссову распределению

$$P\{\Delta\} = \exp\left[-\frac{1}{2\omega} \int d\mathbf{r} \Delta^2(\mathbf{r})\right], \quad (12)$$

где существует единственный параметр ω , характеризующий интенсивность беспорядка.

Для нахождения свободной энергии системы, описываемой функционалом (11), необходимо рассчитать вклады в нее от различных конфигураций полей $\varphi(\mathbf{r})$ и $\Delta(\mathbf{r})$, но без каких-либо дополнительных предположений о выделенной роли определенной группы конфигураций эта задача неразрешима. Поэтому рассмотрим качественный сценарий поведения системы, при котором в окрестности температуры объемного ФМ-перехода главный вклад в свободную энергию вносят вариации параметра порядка $\varphi(\mathbf{r})$ в форме изолированных сгустков или разрежений спиновой плотности, формирующихся вблизи редких областей соответственно с локально повышенной или пониженной концентрацией дефектов $n(\mathbf{r})$. Используя метод работы [26], можно показать, что усредненная по крупномасштабным флуктуациям концентрации Mn_d-дефектов свободная энергия состояния с уединенной вариацией спиновой плотности (т. е., без учета взаимного влияния таких вариаций) имеет вид

$$\tilde{\mathcal{F}} = -k_B T \int D\{\Delta\} \exp\left(-\frac{\mathcal{F}\{\varphi, \Delta\}}{k_B T}\right), \quad (13)$$

где

$$\mathcal{F}\{\varphi, \Delta\} = E\{\varphi, \Delta\} - k_B T \ln P\{\Delta\} \quad (14)$$

— функционал свободной энергии для вариации спиновой плотности, а $E\{\varphi, \Delta\}$ определяется соотношением (11). Согласно работе [26], главный вклад в функциональный интеграл (13) вносит та конфигурация случайного поля $\Delta(\mathbf{r})$, которая реализует экстремум функционала $\mathcal{F}\{\varphi, \Delta\}$ (14). Проводя варьирование функционала $\mathcal{F}\{\varphi, \Delta\}$ по $\Delta(\mathbf{r})$ при

условии сохранения полного числа Mn_d-дефектов, $\int d\mathbf{r} \Delta(\mathbf{r}) = 0$, находим оптимальную флуктуацию для распределения дефектов в преципитате:

$$\Delta^{(o)}(\mathbf{r}) = \frac{\omega}{3} \left(\frac{\kappa S}{k_B T} \right)^2 \left[\varphi^2(\mathbf{r}) - \bar{\varphi}^2 \right], \quad (15)$$

где $\bar{\varphi}^2 = V^{-1} \int d\mathbf{r} \varphi^2(\mathbf{r})$ — среднеквадратичное значение параметра порядка, V — объем системы. Заметим, что величина $\bar{\varphi}^2$ может быть отлична от нуля даже в том случае, когда среднее значение параметра порядка $\bar{\varphi} = V^{-1} \int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r})$ равно нулю.

Чтобы упростить расчеты, ограничимся в данной работе рассмотрением только таких вариаций спиновой плотности $\varphi(\mathbf{r})$, для которых разность $\varphi^2 - \bar{\varphi}^2$ исчезающе мала в термодинамическом пределе, когда $V \rightarrow \infty$. Очевидно, что для пространственно-однородных ПМ- и ФМ-фаз соотношение $\bar{\varphi}^2 = \bar{\varphi}^2$ выполняется автоматически. Возможность реализации длиннопериодических магнитных фаз исключается.

Варьируя энергию $E\{\varphi, \Delta\}$ (11) относительно $\varphi(\mathbf{r})$ и подставляя выражение для $\Delta^{(o)}(\mathbf{r})$ (15) в уравнение, отвечающее экстремали функционала $E\{\varphi, \Delta\}$, получаем в термодинамическом пределе уравнение для спиновой плотности $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\gamma \nabla^2 \varphi - \alpha_\omega \varphi - 2\beta_\omega \varphi^3 - 3\theta \varphi^5 = 0, \quad (16)$$

где введены следующие обозначения:

$$\alpha_\omega = \alpha_0 + 2\Omega \bar{\varphi}^2, \quad \alpha_0 = \alpha - \frac{(\kappa S)^2 n_d}{3k_B T}, \quad (17)$$

$$\beta_\omega = \beta_0 - \Omega, \quad \beta_0 = \beta + \frac{(\kappa S)^4 n_d}{45(k_B T)^3}, \quad (18)$$

где

$$\Omega = \frac{\omega}{18} \frac{(\kappa S)^4}{18(k_B T)^3}.$$

Далее ограничимся анализом только коллинеарных конфигураций спиновой плотности, $\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{n}\varphi(\mathbf{r})$. Если позиционный беспорядок в преципитате сравнительно мал, $\beta_\omega > 0$, ниже температуры T_C^p (которая определена уравнением $\alpha_0 = 0$ в (17)) возникает однородное состояние с параметром порядка

$$\varphi_0 = \bar{\varphi} = \sqrt{\frac{\gamma Q^2}{\beta(T = T_C^p)} \frac{T_C^p - T}{T_0}}. \quad (19)$$

Состояние (19) сопровождается однородным ФМ-упорядочением локальных моментов со средним значением $\langle S \rangle = -\kappa S^2 \bar{\varphi} / 3k_B T_C^p$. Если позиционный беспорядок в преципитате так велик,

что $\beta_\omega < 0$, то может возникнуть магнитное состояние с неоднородной пространственной структурой спиновой плотности. Чтобы продемонстрировать это, мы воспользуемся подходом, аналогичным флюктуационной теории зарождения новой фазы для фазового перехода первого рода. Поскольку, как видно из (18), коэффициент β_ω способен изменить свой знак, мы удерживаем в функционале член, пропорциональный $\varphi^6(\mathbf{r})$. К сожалению, анализ трехмерных решений уравнения (16) крайне сложен, поэтому для простоты ограничимся рассмотрением только одномерных решений, для которых удается получить ряд точных результатов, на качественном уровне остающихся справедливыми и в трехмерном случае.

Предположим, что концентрация Mn_d -дефектов локально повышена вблизи точки $x = 0$. Данная неоднородность может индуцировать зарождение состояния с близким ФМ-порядком в ПМ-фазе принципата, т. е. при $T > T_C^p$ ($\bar{\varphi} = 0$, $\alpha_\omega = \alpha_0$). Чтобы уточнить условия существования такого состояния и описать его пространственную структуру, будем искать решение уравнения (16), которое удовлетворяет граничным условиям $\varphi(x) \rightarrow 0$ и $d\varphi/dx \rightarrow 0$, когда $|x| \rightarrow \infty$. В одномерном случае легко построить первый интеграл нелинейного уравнения (16), из которого получаем искомое решение:

$$\varphi_d(x) = \frac{\varphi_+ + \varphi_-}{\sqrt{(\varphi_+^2 - \varphi_-^2) \operatorname{ch}^2(x/x_d) + \varphi_-^2}}, \quad (20)$$

где

$$\varphi_\pm^2 = \frac{|\beta_\omega| \pm \sqrt{\beta_\omega^2 - 4\alpha_0\theta}}{2\theta}, \quad (21)$$

$$x_d = \sqrt{\frac{\gamma}{\theta}} \frac{1}{\varphi_+ + \varphi_-} = \sqrt{\frac{\gamma}{\alpha_0}}. \quad (22)$$

Из (21) ясно, что упорядоченное состояние в форме «капли», $\varphi_d(x)$, зарождается в ПМ-фазе при условии, что позиционный беспорядок достаточно сильный, $\beta_\omega^2 > 4\alpha_0\theta$. Данное неравенство устанавливает область существования решения (20): $T_C^p < T < T_d$. Выше критической температуры T_d какое-либо упорядочение отсутствует: $\varphi(x) = 0$. Этот важный вывод специфичен для нашего подхода, при котором в энергию системы вводится слагаемое, пропорциональное $\varphi^6(\mathbf{r})$. В режиме (3) температуру T_d можно оценить как

$$T_d \approx T_C^p + \frac{T_0\beta_\omega^2}{8\gamma\theta Q^2}, \quad (23)$$

если считать, что параметр β_ω слабо зависит от температуры. Подставляя функцию $\varphi_d(x)$ (20) в выраже-

жение (11) для $E\{\varphi, \Delta\}$, где $\Delta = \Delta^{(o)}$ и $\bar{\varphi} = 0$, получим энергию ФМ-капли:

$$E_d^{(o)} = \sqrt{\frac{\gamma}{\theta}} \left\{ \alpha_0 \ln \left(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{\varphi_+ - \varphi_-} \right) + \frac{1}{4} (\beta_0 - 3\Omega) \times \left[(\varphi_+^2 + \varphi_-^2) \ln \left(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{\varphi_+ - \varphi_-} \right) - 2\varphi_+ \varphi_- \right] \right\}. \quad (24)$$

Величина $E_d^{(o)}$ отрицательная в интервале температур между T_C^p и T_d . Следовательно, неоднородное состояние в форме капли, $\varphi_d(x)$, энергетически предпочтительнее, чем пространственно-однородное ПМ-состояние с $\varphi(x) = \bar{\varphi} = 0$.

Таким образом, ФМ-капли со средней намагниченностью $\langle S(x) \rangle \propto \varphi_d(x)$ возникают в редких пространственных областях, сильно обогащенных Mn_d -дефектами, в то время как объем преципита остался в ПМ-состоянии. Чуть ниже критической температуры T_d , как видим из (20), пространственный профиль капли таков: широкая сердцевина, в пределах $4|x| \leq -x_d \ln(1 - 4\alpha_0\theta/\beta_\omega^2)$, где $\varphi_d(x) \approx \varphi_d(0)$, и экспоненциальное падение $\varphi_d(x) \propto \exp(-|x|/x_d)$ на периферии, вдали от сердцевины. С понижением температуры, при $T = T_d$ ФМ-капля возникает резко, с конечной амплитудой $\varphi_d(0) = \sqrt{\beta_\omega/2\theta}$. Однако вероятность обнаружить оптимальную флюктуацию концентрации при $T \rightarrow T_d$ крайне мала:

$$P_d^{(o)} = \exp \left[\sqrt{\frac{\gamma}{\theta^3}} \frac{\Omega |\beta_\omega|}{2k_B T_d} \ln \left(1 - \frac{4\alpha_0\theta}{\beta_\omega^2} \right) \right]. \quad (25)$$

Вблизи температуры объемного перехода, $T \gtrsim T_C^p$, где $\beta_\omega^2 \gg 4\alpha_0\theta$, имеем

$$\varphi_d(x) \approx \sqrt{\frac{\alpha_0}{|\beta_\omega|}} \frac{1}{\operatorname{ch}(x/x_d)}. \quad (26)$$

Рисунок 2 иллюстрирует пространственный профиль ФМ-капли при различных температурах.

Можно оценить величину намагниченности капли:

$$\begin{aligned} M_d^{(o)} &= \frac{\kappa S^2}{3k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_d(x) \left[n_d + \Delta_d^{(0)}(x) \right] = \\ &= \frac{2\kappa S^2}{3k_B T} \sqrt{\frac{\gamma}{\theta}} \left\{ \frac{n_d}{\varphi_+} K \left(\frac{\varphi_-}{\varphi_+} \right) + \frac{\omega}{3} \left(\frac{\kappa S}{k_B T} \right)^2 \varphi_+ \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[K \left(\frac{\varphi_-}{\varphi_+} \right) - E \left(\frac{\varphi_-}{\varphi_+} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (27)$$

где $K(k)$ и $E(k)$ — полные эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода [27]. Величина $M_d^{(o)}$, растет с повышением температуры от T_C^p

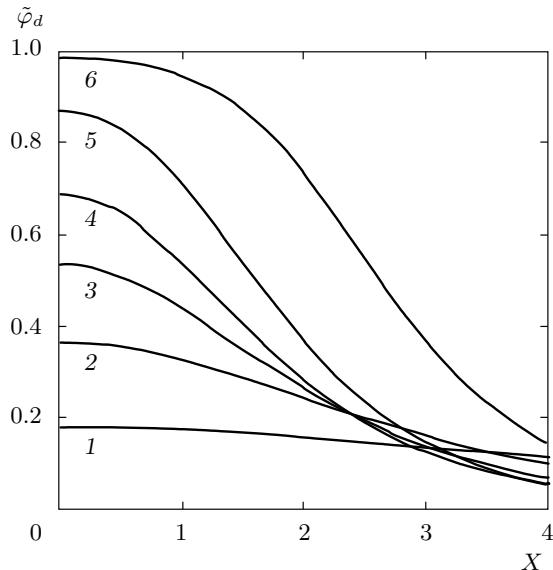


Рис. 2. Пространственные профили $\varphi_d(x)$ ФМ-капли (уравнения (20)–(22)) для значений параметра $2\sqrt{\alpha_0\theta}/\beta_0 = 0.5$ (1), 1.0 (2), 1.4 (3), 1.7 (4), 1.94 (5), 1.999 (6). Использованы безразмерные переменные $\tilde{\varphi}_d = \varphi_d\sqrt{\theta/\beta_0}$ и $X = x\beta_0/\sqrt{\gamma\theta}$; сила беспорядка в безразмерных единицах равна $\Omega/\beta_0 = 3$

до T_d , но вероятность появления капли (и, следовательно, концентрация капель) при этом уменьшается. Поэтому следует ожидать, что эффект формирования близкого ФМ-порядка на концентрационных неоднородностях в преципитате наиболее ярко проявится вблизи некоторой промежуточной температуры T^* , где $T_C^p < T^* < T_d$. Чтобы с большей точностью оценить концентрацию капель и найти T^* , необходимо было бы выйти за рамки флюктуационной теории капель и, используя, например, метод реплик [26], вычислить предэкспоненциальный фактор в выражении (13). Когда $T \rightarrow T_C^p$ и $x_d \rightarrow \infty$, капли сливаются (переклируют), и модель изолированных капель уже не применима.

Следуя принятой терминологии (см., например, работу [26]), мы назвали здесь «каплей» вариацию спиновой плотности $\varphi_d(x)$ (20), которая возникает в области с повышенной концентрацией Mn_d-дефектов. Этот термин уже был использован в разд. 3 для обозначения упорядоченного состояния спиновой плотности, индуцированного локальным магнитным моментом одиночного Mn_d-дефекта. Хотя физика этих состояний различна, использование термина «капля» вполне уместно и в том, и в другом случае и не должно вызвать какой-либо путаницы.

Теперь обратимся к вопросу о влиянии сильного позиционного беспорядка с $\beta_\omega < 0$ на ФМ-состояние ниже температуры T_C^p для объемного преципитата. Вновь возвращаясь к одномерным решениям уравнения (16), считаем теперь, что концентрация Mn_d-дефектов локально либо понижена, либо повышена вблизи начала координат $x = 0$. Соответственно, мы интересуемся двумя решениями уравнения (16), $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$, которые удовлетворяют граничным условиям $\varphi_{1,2}(x) \rightarrow \varphi_{1,2}$ и $d\varphi_{1,2}(x)/dx = \varphi'_{1,2}(x) \rightarrow 0$, когда $|x| \rightarrow \theta$, однако $\varphi''_1(x) > 0$ и $\varphi''_2(x) < 0$. Эти решения существуют и могут быть представлены в одномерном случае явным образом:

$$\varphi_{1,2}(x) = \frac{\Phi_{1,2}\varphi_{1,2} \operatorname{ch}(x/x_{1,2})}{\sqrt{\Phi_{1,2}^2 \operatorname{sh}^2(x/x_{1,2}) + \varphi_{1,2}^2}}, \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{1,2}^2 &= \frac{|\beta_\omega| \pm \sqrt{\beta_\omega^2 - 3\alpha_\omega\theta}}{3\theta}, \\ \Phi_{1,2}^2 &= \frac{|\beta_\omega|}{\theta} - 2\varphi_{1,2}^2, \end{aligned} \quad (29)$$

$$x_{1,2} = \frac{1}{\varphi_{1,2}} \sqrt{\frac{\pm\gamma}{\theta(\varphi_{1,2}^2 - \Phi_{1,2}^2)}}. \quad (30)$$

Отвечающие решениям $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ оптимальные флюктуации (15) имеют противоположные знаки, $\Delta_1^{(o)}(x) < 0$ и $\Delta_2^{(o)}(x) > 0$, и нулевые асимптотические значения $\Delta_{1,2}^{(o)}(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$.

Используя соотношения (17) и (18), можно выразить параметры решения (28), $\varphi_{1,2}$ и $\Phi_{1,2}$, через исходные коэффициенты α_0 и β_0 . Таким образом находим, что $\varphi_1^2 = \varphi_2^2 = \bar{\varphi}^2$, где

$$\bar{\varphi}^2 = \frac{\sqrt{\beta_0^2 + 3|\alpha_0|\theta} - \beta}{3\theta}. \quad (31)$$

Очевидно, что величина $\bar{\varphi}$ из (31) переходит в (19), когда $\beta_0^2 \gg 3|\alpha_0|\theta$. Аналогичным образом получаем $\Phi_1^2 = \Phi_2^2 = \Phi^2$, где

$$\Phi^2 = \bar{\varphi}^2 + \frac{\Omega - \sqrt{\beta_0^2 + 3|\alpha_0|\theta}}{\theta}. \quad (32)$$

Эта величина определяет параметр порядка при $x = 0$: $\varphi_{1,2}(0) = \Phi_{1,2} = \Phi$. Состояние с профилем $\varphi_2(x)$ существует при условии $|\alpha_0|\theta < (\Omega^2 - \beta_0^2)/3$, в то время как область существования состояния с профилем $\varphi_1(x)$ определена неравенством

$$(\Omega^2 - \beta_0^2)/3 < |\alpha_0|\theta < (\Omega - \beta_0)(3\Omega + \beta_0)/4.$$

Введем обозначение T_{12} для температуры, которая удовлетворяет уравнению $|\alpha_0|\theta = (\Omega^2 - \beta_0^2)/3$.

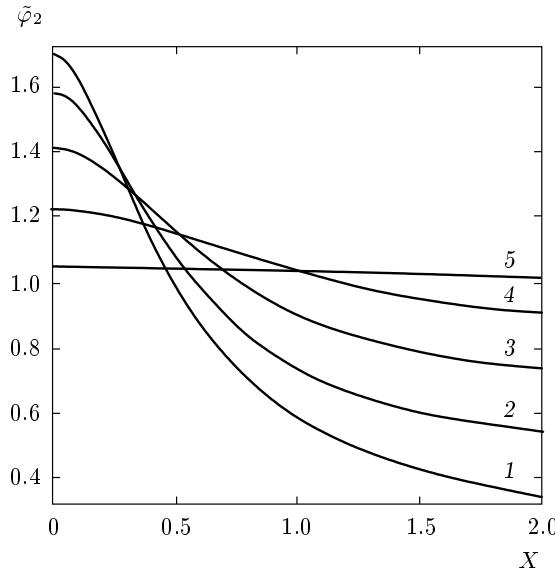


Рис. 3. Пространственные профили состояния $\varphi_2(x)$ (уравнения (28)–(30)) для значений параметра $\theta\bar{\varphi}^2/\beta_0 = 0.05$ (1), 0.25 (2), 0.5 (3), 0.75 (4), 0.95 (5). Использованы безразмерные переменные $\tilde{\varphi}_2 = \varphi_2\sqrt{\theta/\beta_0}$ и $X = x\beta_0/\sqrt{\gamma\theta}$; сила беспорядка в безразмерных единицах равна $\Omega/\beta_0 = 4$

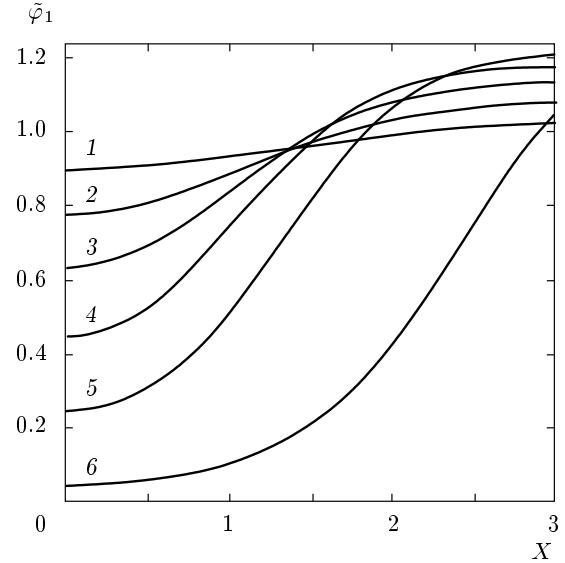


Рис. 4. Пространственные профили состояния $\varphi_1(x)$ (уравнения (28)–(30)) для значений параметра $\theta\bar{\varphi}^2/\beta_0 = 1.1$ (1), 1.2 (2), 1.3 (3), 1.4 (4), 1.47 (5), 1.499 (6). Использованы безразмерные переменные $\tilde{\varphi}_1 = \varphi_1\sqrt{\theta/\beta_0}$ и $X = x\beta_0/\sqrt{\gamma\theta}$; сила беспорядка в безразмерных единицах равна $\Omega/\beta_0 = 4$

При $T = T_{12}$ имеем $\varphi_1(x) = \varphi_2(x) = \bar{\varphi}$. Вывзанное беспорядком перераспределение спиновой плотности в форме $\varphi_1(x)$ или $\varphi_2(x)$ отвечает ситуации, когда соответственно подавление или усиление ФМ-порядка возникает в обедненной или обогащенной Mn_d -дефектами пространственной области, в то время как объем преципитата в целом пребывает в фазе с дальним порядком $\bar{\varphi}$. Вариация концентрации Mn_d -дефектов в этой области достигает величины $\Delta_{1,2}^{(o)}(0) \propto \mp\Phi^2$ (32), а характерный размер самой области составляет порядка $x_{1,2}$ (30). Пространственные профили состояний $\varphi_2(x)$ и $\varphi_1(x)$ при различных температурах представлены соответственно на рис. 3 и 4.

Заметим, что ниже критической температуры T_C^p возможно еще одно неоднородное состояние, $\varphi_k(x)$ (kink), которое топологически принципиально отличается от состояний $\varphi_{1,2}(x)$. В ситуации, когда $|\alpha_0|\theta > (\Omega - \beta_0)(3\Omega + \beta_0)/4$, решение уравнения (16) с граничными условиями $\varphi(x) \rightarrow \pm\bar{\varphi}$, когда $x \rightarrow \pm\infty$, и $\varphi(0+) = \varphi(0-)$ может быть найдено через первый интеграл. Запишем это решение как

$$\varphi_k(x) = \frac{\Phi_k \bar{\varphi} \operatorname{sign} x}{\sqrt{(\bar{\varphi}^2 + \Phi_k^2) \operatorname{cth}^2(x/x_k) - \bar{\varphi}^2}}, \quad (33)$$

Обозначим температуру, которая удовлетворяет уравнению $|\alpha_0|\theta = (\Omega - \beta_0)(3\Omega + \beta_0)/4$, как T_{k1} . Ниже этой температуры реализуется состояние $\varphi_k(x)$ (33), (34) с профилем спиновой плотности в форме доменной стенки, если, конечно, имеет место подходящая конфигурация со значительно пониженной концентрацией Mn_d -дефектов. На рис. 5 мы изобразили зависимости $\varphi_k(x)$ при различных температурах. Состоянию с доменной стенкой $\varphi_k(x)$ (33) отвечает следующий профиль оптимальной флуктуации:

$$\Delta_k^{(o)}(x) = -\frac{\omega}{3} \left(\frac{\kappa S}{k_B T} \right)^2 \frac{\bar{\varphi}^2 (\bar{\varphi}^2 + \Phi_k^2)}{\Phi_k^2 \operatorname{ch}^2(x/x_k) + \bar{\varphi}^2}. \quad (35)$$

Основные черты магнитной фазовой диаграммы слабого зонного ферромагнетика с позиционным беспорядком, исследуемого нами на примере модели преципитата $MnSi_{2-z}$, можно описать следующим образом. Конфигурации с повышенным содержанием Mn_d -дефектов, $\Delta(x) > 0$, проявляют себя в широком температурном интервале $T_d > T > T_{12}$ около точки Кюри T_C^p для объемного образца ($T_d > T_C^p > T_{12}$). Они являются ис-

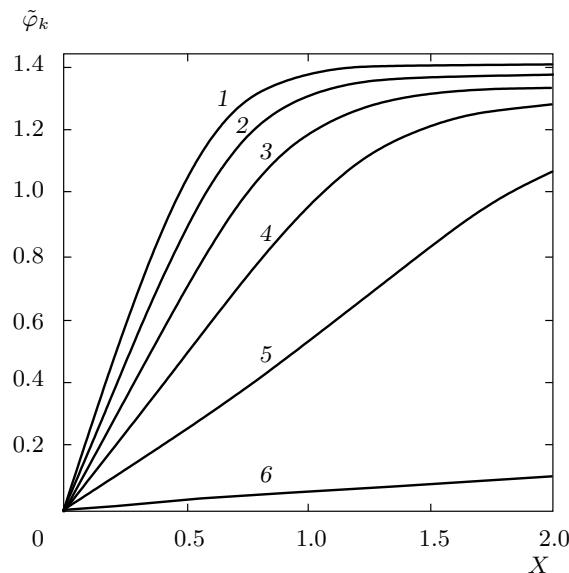


Рис. 5. Пространственные профили состояния с доменной стенкой $\varphi_k(x)$ (уравнения (33), (34)) для различных значений параметра $\theta\bar{\varphi}^2/\beta_0 = 1.51$ (1), 1.6 (2), 1.7 (3), 1.8 (4), 1.9 (5), 2.0 (6). Использованы безразмерные переменные $\tilde{\varphi}_k = \varphi_k \sqrt{\theta/\beta_0}$ и $X = x\beta_0/\sqrt{\gamma\theta}$; сила беспорядка в безразмерных единицах равна $\Omega/\beta_0 = 4$

точниками для зарождения ФМ-капель типа $\varphi_d(x)$ при $T > T_C^p$ или способствуют локальному усилению ФМ-порядка на фоне однородного состояния, $\varphi_2(x) > \bar{\varphi}$, при $T < T_C^p$. Как видно из уравнений (31), (32), амплитуда Φ такого усиления может значительно превышать величину однородного параметра порядка $\bar{\varphi}$. В то же время при $T > T_{12}$ конфигурации с пониженным содержанием Mn_d -дефектов, $\Delta(x) < 0$, не проявляются в схеме оптимальной флюктуации. И наоборот, при $T < T_{12}$ в пространственных областях с $\Delta(x) < 0$ происходит частичное подавление ФМ-порядка, в то время как области с $\Delta(x) > 0$ себя не проявляют. В интервале между T_{12} и T_{k1} в области с пониженным содержанием Mn_d -дефектов ФМ-порядок локально подавляется на фоне однородного состояния, $\varphi_1(x) < \bar{\varphi}$. При температуре T_{k1} такое подавление достигает своего предела, когда $\varphi_1(0) = 0$. При $T < T_{k1}$ актуальными становятся концентрационные флюктуации $\Delta_k^{(o)}(x)$ (35) с большой амплитудой и размером порядка x_k . Поэтому низкотемпературная часть фазовой диаграммы, $T < T_{k1}$, занята состоянием со структурой параметра порядка типа доменной стены $\langle S(x) \rangle \propto \varphi_k(x)$. Можно полагать, что пространственные области типа $\Delta_k^{(o)}$ в трехмерной ситуации

встречаются довольно редко, а отмеченное нарушение ФМ-порядка в них есть исключительное свойство одномерной модели.

Конечно, в рамках метода оптимальной флюктуации мы не можем адекватно описать все особенности магнитной фазовой диаграммы столь сложной системы, как сплав Si:Mn с фазовым разделением. Тем не менее представленный оценочный анализ позволяет уловить такую важную особенность системы, как размытие температуры ФМ-перехода в температурную область, где существуют неоднородные состояния с близким ФМ-порядком. В этой температурной области локально упорядоченные ФМ-структуры — капли — существуют с неупорядоченной ПМ-фазой. Для более низкой температуры характерен профиль спиновой плотности с подъемами и провалами на фоне дальнего ФМ-порядка; кроме того, не исключены магнитные структуры, подобные доменным стенкам. Подчеркнем, что наш подход основан на предположении, что плотность оптимальных флюктуаций в распределении дефектов достаточно низкая, чтобы можно было пренебречь их взаимным влиянием.

5. ФМ-УПОРЯДОЧЕНИЕ В ОГРАНИЧЕННОМ ПРЕЦИПИТАТЕ $MnSi_{2-z}$, ИНДУЦИРОВАННОЕ ИНТЕРФЕЙСОМ $MnSi_{1.7}/Si$

Выше мы обсудили модель ФМ-упорядочения для формально бесконечного преципитата $MnSi_{2-z}$, когда роль его границы с матрицей Si никак не учитывалась. В случае пространственно-ограниченного преципитата (например, частицы $MnSi_{2-z}$, окруженной матрицей Si) корректность нашего подхода может нарушаться под влиянием граничных эффектов. Как отмечалось в работах [17, 19], наличие интерфейса $MnSi_{1.7}/Si$ может сильно изменить магнитные характеристики наночастицы преципита. В численных расчетах [19] было показано, что $3d$ -орбитали атомов Mn гораздо сильнее локализованы на интерфейсе $MnSi_{1.7}/Si$, чем в объеме преципита; в результате рассчитанный магнитный момент атома Mn на интерфейсе составляет примерно $1\mu_B$.

Ниже будет показано, что сценарий высокотемпературного ферромагнетизма в ограниченном преципитате, находящемся в контакте с матрицей Si, в некотором отношении отличается от соответствующего сценария в объемном преципитате. Предполагаем, что внутренняя часть (сердцевина) частицы преципитата состоит из силицида $MnSi_{1.7}$ (который не содержит объемных Mn_d -дефектов), а магнитные моменты S_i локализованы строго на интерфей-

се MnSi_{1.7}/Si (интерфейсные Mn_d-дефекты). Обменная связь между интерфейсными Mn_d-дефектами реализуется через спиновые флюктуации в объеме силицида MnSi_{1.7} согласно механизму, описанному в разд. 3. Поэтому мы можем определить энергию взаимодействия моментов \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j на основе эффективного гамильтониана F_{ex}^{SF} (4) с обменным интегралом J_{ij}^{SF} (5), где узлы i и j принадлежат поверхности f интерфейса. Магнитный момент на интерфейсе чувствует эффективное магнитное поле, пропорциональное $\langle \varphi \rangle_f$ и создаваемое термическими спиновыми флюктуациями вблизи границы. С другой стороны, намагниченность на интерфейсе (порядка $eN_f\langle S \rangle_f$, где $\langle S \rangle_f$ — среднее значение момента \mathbf{S}_i , N_f — поверхностная плотность моментов, e — единичный вектор вдоль направления намагниченности) через те же спиновые флюктуации поляризует носители по спину внутри преципитата. Для простоты используем приближение среднего поля, считая, что позиционный беспорядок в распределении локальных моментов Mn_d-дефектов вдоль интерфейса роли не играет. Предполагаем, что намагниченность моментов \mathbf{S}_i усреднена вдоль интерфейса; в свою очередь, делокализованная компонента спиновой плотности $\varphi(\mathbf{r})$ усреднена вдоль любого внутреннего слоя, параллельного интерфейсу, но сохраняет зависимость от координаты \mathbf{r}_\perp вдоль поперечного направления, т. е.

$$\varphi(\mathbf{r}) \rightarrow \langle \varphi(\mathbf{r}_\perp) \rangle = e \langle \varphi(r_\perp) \rangle.$$

Ограничимся исследованием только коллинеарных состояний, тогда величины $\langle S \rangle_f$ и $\langle \varphi \rangle_f$ связаны соотношением

$$\langle S \rangle_f = -SL \left(\frac{\kappa S \langle \varphi \rangle_f}{k_B T} \right). \quad (36)$$

В рамках данной постановки задачи покажем, что в ограниченном преципитате ФМ-порядок может возникать при температуре, превышающей температуру Кюри объемного однородного силицида.

Для анализа выберем три простейших пространственных конфигурации преципитата: слой, цилиндрическую колонку или шарообразный силицид MnSi_{1.7}, вставленные в матрицу Si. Такой выбор конфигураций не случаен. О частицах преципитата округлой формы, возникающих, например, при посттермической обработке сплава Si_{1-x}Mn_x после ионной имплантации Mn, речь уже шла во Введении. Существуют также свидетельства [28] о формировании обогащенных марганцем длинных нанотрубок в сплаве Si_{1-x}Mn_x, выращенном на подложке

Si(100). Данные работы [29] по локальному окружению марганца в дельта-допированных марганцем образцах, приготовленных молекуллярно-лучевой эпитетаксией на подложке Si(100), не исключают преципитации с образованием слоев MnSi_{1.7}.

В случае частицы преципитата конечного размера нужно решить уравнение для функции $\langle \varphi(r_\perp) \rangle$,

$$\gamma \frac{\partial^2 \langle \varphi \rangle}{\partial \mathbf{r}^2} - \alpha \langle \varphi \rangle - 2\beta \langle \varphi \rangle^3 = \frac{\kappa}{2} N_f \langle S \rangle_f f(\mathbf{r}), \quad (37)$$

которое получается из минимизации полного функционала $F = F_0 + F_f$, где $F_f = \kappa N_f \langle S \rangle_f f(\mathbf{r}) \langle \varphi \rangle_f$ — поверхностная энергия, величина $\langle S \rangle_f$ задана уравнением (36). Геометрический фактор $f(\mathbf{r})$ имеет следующую форму: $f(\mathbf{r}) = \delta(x - l) + \delta(x + l)$ в случае слоя силицида толщиной $2l$; $f(\mathbf{r}) = \delta(\rho - \rho_0)$ в случае цилиндрической колонки силицида радиусом ρ_0 , $\rho = (x, y)$; $f(\mathbf{r}) = \delta(r - r_0)$ в случае шарообразной частицы силицида радиусом r_0 , $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Вне преципитата, т. е. в Si-матрице, $\langle \varphi(\mathbf{r}_\perp) \rangle = 0$.

Для слоистой системы задача допускает точное решение; используем известные результаты, полученные ранее [30]. Профиль спиновой плотности в слое силицида, при $|x| < l$, определяется формулой

$$\langle \varphi(x) \rangle = \sqrt{\frac{\gamma}{\beta}} \frac{k'}{\zeta_k} \text{nc} \left(\frac{x}{\zeta_k}, k \right), \quad (38)$$

где k — модуль эллиптической функции, $k' = \sqrt{1 - k^2}$, $\zeta_k = \zeta \sqrt{2k^2 - 1}$ ($1/2 < k^2 < 1$), $l < \zeta_k K(k)$, $K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, ζ — корреляционная длина флюктуаций спиновой плотности. Здесь использованы стандартные обозначения для эллиптических функций $\text{nc}(z, k)$ и интегралов [27]. Величина k определяется граничными условиями на интерфейсе через уравнение

$$\gamma \frac{d\langle \varphi \rangle}{dx} \Big|_{x=l} = \frac{\kappa S N_f}{2} L \left(\frac{\kappa S \langle \varphi \rangle}{k_B T} \right) \Big|_{x=l}. \quad (39)$$

Переходя в (38) и (39) к пределу $k \rightarrow 1$, получим выражения для профиля и амплитуды спиновой плотности вблизи температуры ФМ-перехода ($T \lesssim T_C^l$) в слое силицида:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \sqrt{\frac{\gamma}{\beta}} \frac{k'}{\zeta} \text{ch} \left(\frac{x}{\zeta} \right), \quad (40)$$

$$k'^2 = \left[\frac{\zeta}{L} \coth \left(\frac{l}{\zeta} \right) - 1 \right] \left[g \left(\frac{l}{\zeta} \right) \right]^{-1}, \quad (41)$$

где

$$g(\nu) = 1 + \frac{1}{4} \text{ch}(2\nu) + \frac{3\nu}{2 \text{sh}(2\nu)} + B \text{ch}^2(\nu), \quad (42)$$

$$B = \frac{2\gamma}{15\beta\zeta^2} \left(\frac{\kappa S}{k_B T} \right)^2, \quad L = \frac{6\gamma k_B T}{\kappa^2 S^2 N_f}.$$

Здесь введена так называемая экстраполяционная длина L . Уравнение $k' = 0$ определяет критическую температуру $T_C^l(l, N_f)$ как функцию толщины слоя и поверхностной плотности моментов, при которых спиновые флуктуации замерзают и слой приобретает намагниченность

$$\langle S \rangle_f = -\frac{\kappa S^2 \langle \varphi(l) \rangle}{3k_B T_C^l}.$$

При $l \gg L \approx \zeta$, принимая во внимание поведение корреляционной длины $\zeta(T)$ (3) в диапазоне $T \gg T_C^s$, для температуры ФМ-упорядочения в слое получим

$$T_C^l(l) = T_C^\infty \left[1 + \frac{4}{3} \exp \left(-\frac{2l}{\zeta(T_C^\infty)} \right) \right], \quad (43)$$

где

$$T_C^\infty = \left[\frac{T_0 N_f^2 (\kappa S)^4}{(6\gamma k_B Q)^2} \right]^{1/3} \quad (44)$$

— температура упорядочения вблизи уединенного интерфейса. Эти формулы справедливы, если параметры модели удовлетворяют требованию

$$\beta Q a^3 N_f (\kappa S)^2 \gg k_B \left(\gamma |\alpha^{(0)}| \right)^{3/2}.$$

Понятно, что температура $T_C^l(l, N_f)$ растет с уменьшением толщины слоя. При $L > \zeta \gg l$ она может стать формально очень высокой, $T_C^l(l) \propto l^{-1/2}$; однако в этой области параметров наш подход не применим.

Представим, что бесконечная вдоль оси z цилиндрическая колонка силицида MnSi_{1.7} радиусом r_0 помещена в матрицу Si. В линейном по параметру порядка приближении профиль поляризации в плоскости xy имеет вид

$$\langle \varphi(\rho) \rangle = \sqrt{\frac{\gamma}{\beta}} \frac{p}{\zeta} I_0 \left(\frac{\rho}{\zeta} \right), \quad (45)$$

где

$$p^2 = \left[\frac{\zeta}{L} \frac{I_0(\rho_0/\zeta)}{I_1(\rho_0/\zeta)} - 1 \right] \left[g_c \left(\frac{\rho_0}{\zeta} \right) \right]^{-1}, \quad (46)$$

$$g_c(\nu) = \frac{2}{\nu I_0(\nu) I_1(\nu)} \int_0^\nu dt t I_0^4(t) + B I_0^2(\nu),$$

$I_0(\nu)$ и $I_1(\nu)$ — модифицированные функции Бесселя соответственно нулевого и первого порядков, величины B и L определены выше в уравнении (42). Условие $p = 0$ в (46) дает температуру ФМ-перехода в колонке как функцию ее радиуса и плотности моментов на поверхности ее границы, $T_C^c(r_0, N_f)$. При $\rho_0 \gg L \approx \zeta$ получаем

$$T_C^c(r_0) = T_C^\infty \left[1 + \frac{\zeta(T_C^\infty)}{3\rho_0} \right]. \quad (47)$$

Температура $T_C^c(r_0, N_f)$ растет с уменьшением радиуса ρ_0 колонки и с увеличением плотности N_f моментов. Удельная намагниченность (на единицу длины в направлении z) цилиндрической поверхности колонки при $T \lesssim T_C^c$ пропорциональна значению спиновой плотности (45) на интерфейсе: $2\pi\rho_0 N_f \kappa S^2 \langle \varphi(\rho_0) \rangle / 3k_B T_C^c$.

Теперь представим, что сферическая частица силицида MnSi_{1.7} радиусом r_0 помещена в матрицу Si. В линейном по параметру порядка приближении профиль поляризации вдоль трехмерного радиус-вектора \mathbf{r} имеет вид

$$\langle \varphi(r) \rangle = \sqrt{\frac{\gamma}{\beta}} \frac{q}{\zeta} \operatorname{sh} \frac{r}{\zeta}, \quad (48)$$

где

$$q^2 = \left\{ \frac{\zeta}{L} \left[\operatorname{cth} \left(\frac{r_0}{\zeta} \right) - \frac{\zeta}{r_0} \right]^{-1} - 1 \right\} \left[g_b \left(\frac{r_0}{\zeta} \right) \right]^{-1},$$

$$g_b(\nu) = \frac{\operatorname{sh}(4\nu) - 2\operatorname{sh}(2\nu) - 2\operatorname{sh}^4(\nu)/\nu}{\operatorname{sh}(\nu) [\operatorname{ch}(\nu) - \operatorname{sh}(\nu)/\nu]} + \\ + B \left[\frac{\operatorname{sh}(\nu)}{\nu} \right]^2, \quad \operatorname{sh} i\nu = \int_0^\nu dt \frac{\operatorname{sh} t}{t}. \quad (49)$$

Условие $q = 0$ в (49) дает температуру ФМ-перехода как функцию радиуса частицы и плотности моментов на интерфейсе, $T_C^b(r_0, N_f)$.

Намагниченность сферической частицы при $T \lesssim T_C^b$ пропорциональна значению спиновой плотности (48) на интерфейсе: $4\pi r_0^2 N_f \kappa S^2 \langle \varphi(r_0) \rangle / 3k_B T_C^b$. При $r_0 \gg L \approx \zeta$ из уравнений (48) и (49) получаем

$$\langle \varphi(r_0) \rangle = Q \sqrt{\frac{3\gamma}{\beta(1+2B)}} \frac{T_C^b(r_0) - T}{T_0}, \quad (50)$$

$$T_C^b(r_0) = T_C^\infty \left[1 + \frac{2\zeta(T_C^\infty)}{3r_0} \right], \quad (51)$$

где величина T_C^∞ определена в (44). Температура $T_C^b(r_0)$ растет с уменьшением радиуса частицы.

Ясно, что в частицах преципитата с объемными Mn_d-дефектами механизм ФМ-упорядочения на интерфейсе MnSi_{1.7}/Si существует с объемным механизмом ферромагнетизма, рассмотренным выше в разд. 3. Однако последний нуждается в ревизии в случае частиц, характерный размер d которых (например, l , ρ_0 или r_0 в зависимости от геометрии системы) становится порядка или меньше корреляционной длины $\zeta(T)$. Собственно говоря, здесь

мы сталкиваемся с необходимостью распространить концепцию самосогласованных спиновых флуктуаций на слабые зонные магнетики конечного размера, что выходит за рамки данной работы. Из общей теории критического поведения [31] следует, что зависимость температуры ФМ-перехода от размера частицы, $T_C(d)$, следует закону (scaling law)

$$1 - \frac{T_C(d)}{T_C^\infty} \propto d^{-\Lambda}, \quad (52)$$

где $\Lambda \approx 1$ — так называемый индекс сдвига (shift exponent), который зависит от распределения обменных связей внутри частицы. Таким образом, на магнитный порядок в ограниченном преципитате, помещенном в матрицу Si, действуют два разнонаправленных фактора: интерфейс MnSi_{1.7}/Si способствует росту температуры Кюри с уменьшением размера d , а размерный эффект подавляет ее.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные выше результаты позволяют составить общее представление о специфике магнитного упорядочения в сплавах Si:Mn с фазовой сегрегацией. Дан детальный ответ на вопрос, почему средний магнитный момент на атом Mn и температура Кюри преципитата MnSi_{2-z}, образующегося в матрице Si [10, 17], намного превышают соответствующие характеристики объемного силицида MnSi_{1.7} [11]. При этом предполагалось, что структура реального преципитата MnSi_{2-z} далека от идеальной структуры силицида MnSi_{1.7} — объем преципитата содержит магнитные Mn_d-дефекты и, кроме того, атомы Mn, несущие локальные магнитные моменты, образуются на границе между преципитатом и полупроводниковой матрицей.

Главный вывод работы состоит в том, что в сплавах Si:Mn с относительно низкой концентрацией Mn может иметь место ФМ-порядок внутри отдельных частиц преципитата MnSi_{2-z} в матрице Si, тогда как в сплавах с высокой концентрацией Mn возможен ФМ-порядок всего сплава в целом. В основной части работы показано, что в объеме преципитата MnSi_{2-z} термические спиновые флуктуации (парамагноны) осуществляют обменную связь между магнитными моментами Mn_d-дефектов, что ведет к ФМ-упорядочению как локализованной, так и делокализованной компонент спиновой плотности. Сильный позиционный беспорядок в распределении Mn_d-дефектов в объеме преципитата, порождающий ближний ФМ-порядок в форме капель и/или доменных стенок, может размывать фазовый ФМ-переход.

В случае частиц преципитата конечного размера температура ФМ-упорядочения может значительно возрасти благодаря высокой плотности локальных магнитных моментов на интерфейсе MnSi_{1.7}/Si. Однако, как отмечено выше, размерный эффект налагает определенное ограничение (52) на ферромагнетизм в частицах преципитата, размер которых $d \approx r_0$ (по порядку величины) меньше корреляционной длины $\zeta(T)$. Какой из этих факторов окажется доминирующим — вопрос открытый. По нашему мнению, магнитные характеристики сплавов Si_{1-x}Mn_x с фазовым разделением нельзя механически связывать с номинальной концентрацией x марганца, поскольку наличие локальных магнитных моментов на Mn_d-дефектах и интерфейсах MnSi_{1.7}/Si напрямую не связано с величиной x (см. разд. 2); кроме того, в сплаве присутствуют сильные концентрационные флуктуации, и частицы преципитата могут образовывать переколяционные макрокластеры. Определяющую роль для магнетизма сплавов Si_{1-x}Mn_x играет технология приготовления материала.

Имеющиеся в литературе экспериментальные данные в определенной степени подтверждают предположения, использованные в нашей работе для построения теоретической модели высокотемпературного ферромагнетизма. Например, чтобы «расшифровать» наблюдавшиеся в полупроводниковом (или полуметаллическом) сплаве Si:Mn с низким содержанием Mn кривые намагниченностей с довольно сложными гистерезисами, авторы работ [17, 19] прибегли к гипотезе о присутствии двух типов ферромагнетизма с различными коэрцитивными силами, происхождение которых было связано с поверхностной и объемной намагниченностями наночастиц преципитата. Такое предположение принципиально не отличается от того, которое используется в нашем подходе. В работе [14], где исследовались металлические пленки Si:Mn с высоким содержанием Mn, наблюдался аномальный эффект Холла гистерезисного типа, проявлявшийся вплоть до температур $T \approx 230$ К. Естественно приписать это явление объемному ферромагнетизму в преципитате MnSi_{2-z} с Mn_d-дефектами, поскольку роль интерфейсов MnSi_{1.7}/Si здесь менее значительная, чем в сплавах с низкой концентрацией Mn, из-за переколяции наночастиц преципитата.

Следует, впрочем, обратить внимание на явную недостаточность исследований магнитных и транспортных свойств сплавов Si:Mn в зависимости от концентрации Mn, а также полное отсутствие нейтронографических и мессбауэровских измерений. К

сожалению, эти обстоятельства пока не позволяют с полной уверенностью говорить о характере пространственного распределения Mn. Здесь хотелось бы обратить внимание на работу [32], в которой методом электронного парамагнитного резонанса исследованы пленки Si:Mn с 35 ат. % марганца (полученные лазерной эпитаксией на подложке GaAs) и обнаружена высокая температура Кюри $T_C \approx 230$ К и небольшая величина среднего магнитного момента $0.32\mu_B$ на ион Mn при $T = 115$ К. При этом указывается на неоднофазность образцов. Результаты работы [32] неплохо согласуются с рассмотренным нами механизмом ФМ-порядка в сплавах Si:Mn.

Магнитные свойства сплавов кремния с переходными металлами весьма чувствительны к технологии их приготовления. Основная проблема заключается в крайне низкой растворимости магнитного донора в полупроводниковой кристаллической матрице. Тем не менее ферромагнетизм с температурой Кюри порядка комнатной температуры наблюдается в кристаллических сплавах $c\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$, полученных той или иной методикой [1–3, 13–15, 17], и, как правило, соответствующие ФМ-образцы $c\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ содержат силициды марганца, формирующиеся, например, во время имплантации или на стадии отжига. Именно этот факт является основным доводом в пользу нашей теории.

С другой стороны, некоторые исследователи [3, 8, 33] пытаются преодолеть трудности, сопряженные с низкой растворимостью марганца, путем использования аморфных материалов $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$, которые допускают высокое содержание Mn без образования вторичных фаз. Однако авторы работ [3] утверждают, что изначально напыленные (as-deposited) пленки $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x:\text{B}$ являются неферромагнитными. В работе [33] сообщается, что аморфные тонкие пленки сплава $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ с $x < 0.09$, выращенные методом термического напыления, показывают только ПМ-поведение. В работе [8] ФМ-порядок в дopedированном марганцем аморфном кремнии $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ также не наблюдается, правда, зарегулировано присутствие локальных моментов малой величины. Такое «замораживание» (по терминологии работы [8]) магнитного момента на марганце в сплаве $a\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ авторы связывают со значительной ковалентной связью между Si и Mn, ведущей к квазизонному характеру носителей, но в условиях сильного беспорядка. Такую картину на качественном уровне можно интерпретировать на основе предложенной выше (см. разд. 5) модели влияния флюктуаций концентрации Mn_d-дефектов на ферромагнетизм в сильнонеоднородном объемном преципитате

MnSi_{2-z}, когда $n_d \ll \sqrt{\langle \Delta^2(\mathbf{r}) \rangle}$ и температура Кюри T_C^p для объемного образца крайне мала. Тогда магнитный порядок реализуется в виде локализованных, очень редких и невзаимодействующих друг с другом капель с малым магнитным моментом $M_d^{(o)}$ (27), которые дают вклад в восприимчивость, следующую закону Кюри–Вейсса.

В цикле работ [3] исследовались поликристаллические пленки $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x:\text{B}$, полученные магнетронным напылением на подложку Si(001) с последующей быстрой термической обработкой с целью кристаллизации. Рентгеновская дифракция явно указывала на присутствие вторичной фазы Mn₄Si₇ в кристаллизованных образцах. Если аморфные (as-deposited) образцы никакого магнитного порядка не показывали, то после кристаллизации они становились ферромагнитными при $T < 250$ К. Детали температурных зависимостей намагниченности, полученные в приложенном поле 1000 Э [3], хорошо (по крайней мере, на качественном уровне) воспроизводятся в рамках спин-флуктуационной теории обменной связи между Mn_d-дефектами в преципитате MnSi_{2-z}, что подтверждает рис. 1. Экспозиция пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ в плазме B₂H₆ ведет к увеличению намагниченности насыщения и росту концентрации дырок. Данный факт также можно объяснить на основе нашего подхода. Действительно, намагниченность слабого зонного ферромагнетика весьма чувствительна к изменению концентрации носителей. Кроме того, мелкие примесные состояния в полупроводниковой матрице, которые создает примесь бора в кремнии, по-видимому, способствуют обменной связи между частицами преципитата.

Выше мы не касались важного вопроса о взаимодействии между ФМ-частицами преципитата MnSi_{2-z} через окружающую их матрицу Si [10]. Величина и знак этого взаимодействия определяют характер магнитного поведения сплавов с низким содержанием Mn при уменьшении температуры. Предварительные оценки показывают, что существует слабая обменная связь между ФМ-частицами через изолирующую матрицу, которая содержит немагнитные дефекты с мелкими уровнями глубиной $|\varepsilon_0| \ll W, E_g$ внутри энергетической щели E_g . По-видимому, соответствующая обменная связь (по сути дела, суперобменное взаимодействие, введенное в работе [34]) будет ФМ-типа и экспоненциально затухающей на масштабе порядка $(\sqrt{2m}|\varepsilon_0|)^{-1} \approx \approx a\sqrt{W/|\varepsilon_0|}$, который может значительно превосходить межатомное расстояние. Следовательно, можно ожидать, что с понижением температуры ансамбль частиц преципитата перейдет из суперпара-

магнитного режима в ФМ-режим. Возможен, однако, и иной сценарий, при котором вследствие эффектов магнитной анизотропии произойдет блокировка ФМ-частиц преципитата в матрице Si и образование структуры типа кластерного стекла.

Авторы выражают благодарность Б. А. Аронзону и В. В. Рылькову за обсуждение некоторых экспериментальных аспектов проблемы ферромагнетизма в сплавах кремний–марганец. Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 10-02-00118-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. F. M. Zhang, X. C. Liu, J. Gao et al., *Appl. Phys. Lett.* **85**, 786 (2004).
2. M. Bolduc, C. Awo-Affouda, A. Stollenwerk et al., *Phys. Rev. B* **71**, 033302 (2005).
3. X. C. Liu, Z. H. Lu, Z. L. Lu et al., *Appl. Phys.* **100**, 073903 (2006); X. C. Liu, Y. B. Lin, J. F. Wang et al., *J. Appl. Phys.* **102**, 033902 (2007); X. C. Liu, X. P. Huang, and F. M. Zhang, *Chin. Phys. B* **19**, 027501 (2010).
4. S. H. Chiu, H. S. Hsu, and J. C. A. Huang, *J. Appl. Phys.* **103**, 07D110 (2008).
5. A. Stoppa, S. Picozzi, and A. Continenza, *Phys. Rev. B* **68**, 155203 (2003).
6. A. Wolska, K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, and M. S. Walczak, *Phys. Rev. B* **75**, 113201 (2007).
7. S. Zhou, K. Potzger, G. Zhang et al., *Phys. Rev. B* **78**, 085203 (2007).
8. L. Zeng, E. Helgren, M. Rahimi et al., *Phys. Rev. B* **77**, 073306 (2008).
9. C. Awo-Affouda, M. Bolduc, M. B. Huang et al., *J. Vac. Sci. Technol. A* **24**, 1644 (2006).
10. S. Zhou, A. Shalimov, K. Potzger et al., *Phys. Rev. B* **80**, 174423 (2009).
11. U. Gottlieb, A. Sulpice, B. Lambert-Andron, and O. Laborde, *Alloys Comp.* **361**, 13 (2003); A. Sulpice, U. Gottlieb, M. Affronte, and O. Laborde, *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276**, 519 (2004).
12. M. Lee, Y. Onose, Y. Tokura, and N. P. Ong, *Phys. Rev. B* **75**, 172403 (2007).
13. V. Ko, K. L. Teo, T. Liew et al., *J. Appl. Phys.* **104**, 033912 (2008).
14. С. Н. Николаев, Б. А. Аронзон, В. В. Рыльков и др., Письма в ЖЭТФ **89**, 707 (2009).
15. А. Ф. Орлов, А. Б. Грановский, Л. А. Балагуров и др., *ЖЭТФ* **136**, 703 (2009).
16. T. Dubroca, J. Hack, R. E. Hummel, and A. Angerhofer, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 182504 (2006); С. В. Адашкевич, Н. М. Лапчук, В. Ф. Стельмах и др., Письма в ЖЭТФ **84**, 547 (2007).
17. S. Yabuuchi, Y. Ono, M. Nagase et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 4487 (2008).
18. D. B. Migas, V. L. Shaposhnikov, A. B. Filinov et al., *Phys. Rev. B* **77**, 075205 (2008).
19. S. Yabuuchi, H. Kageshima, Y. Ono et al., *Phys. Rev. B* **78**, 045307 (2008).
20. Q. Liu, W. Yan, H. Wei et al., *Phys. Rev. B* **77**, 245211 (2008).
21. T. Jungwirth, K. Y. Wang, J. Maek et al., *Phys. Rev. B* **72**, 165204 (2005).
22. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and S. Caprara, *Eur. Phys. J. B* **77**, 337 (2010).
23. Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).
24. K. K. Murata and S. Doniach, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 285 (1972).
25. А. П. Леванюк, В. В. Осипов, А. С. Сигов, А. А. Собянин, *ЖЭТФ* **76**, 345 (1979).
26. Л. Н. Булаевский, С. Б. Панюков, М. В. Садовский, *ЖЭТФ* **92**, 672 (1987).
27. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовича и И. Стиган, Наука, Москва (1979).
28. Y. Zhang, Q. Jiang, D. J. Smith, and J. Drucker, *J. Appl. Phys.* **98**, 033512 (2005).
29. Q. F. Xiao, S. Kahwaji, T. L. Monchesky et al., *J. Phys.: Conf. Series* **190**, 012101 (2009).
30. O. Navarro, V. N. Men'shov, and V. V. Tugushev, *Phys. Rev. B* **72**, 224430 (2005).
31. M. E. Fisher and M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
32. S. Kapelnitsky, in *Book of Abstracts of the International Conference “Micro- and Nanoelectronics-2009*, Moscow, Zvenigorod, Russia (2009), p. 1-52.
33. S. S. Yu, K. H. Kim, Y. E. Ihm et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **304**, e167 (2006).
34. J. Inoue, S. Nonoyama, and H. Itoh, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4610 (2000); J. Inoue, *Phys. Rev. B* **67**, 125302 (2003).