

# МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ДИСКРЕТНЫХ СПЛАВАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ IV ГРУППЫ С ПЕРЕХОДНЫМИ 3d-МЕТАЛЛАМИ

М. М. Отроков<sup>a,\*</sup>, В. В. Тугушев<sup>b,c</sup>, А. Эрнст<sup>d,\*\*</sup>,  
С. А. Останин<sup>d</sup>, В. М. Кузнецов<sup>a</sup>, Е. В. Чулков<sup>c,e</sup>

<sup>a</sup> Томский государственный университет  
634050, Томск, Россия

<sup>b</sup> Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия

<sup>c</sup> Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, UPV/EHU  
and Centro de Física de Materiales (CFM) (CSIC-UPV/EHU)  
20080, San Sebastián, Basque Country, Spain

<sup>d</sup> Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik  
D-06120, Halle, Germany

<sup>e</sup> Donostia International Physics Center (DIPC)  
20018, San Sebastián, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 10 августа 2010 г.

Проведено исследование *ab initio* магнитного упорядочения в дискретных сплавах, состоящих из монослоев переходных 3d-металлов Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co и Ni, помещенных в полупроводниковые матрицы Si, Ge или Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub>. С помощью расчетов параметров обменных взаимодействий и полных энергий показано, что ферромагнитный порядок реализуется лишь в монослоях марганца, в то время как в монослоях V, Cr и Fe более вероятно установление антиферромагнитного упорядочения, а монослои Ti, Co и Ni являются немагнитными. На основе расчетов магнитных спектров проведен анализ стабильности ферромагнитной фазы в дискретных сплавах, содержащих монослои марганца.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) типа A<sup>IV</sup>:M на основе элементов IV группы (A<sup>IV</sup> = Si, Ge), легированных магнитными переходными 3d-металлами (M = Cr, Mn, Fe, Co), привлекают в последние годы большой интерес в качестве новых материалов магнитной электроники, используемых, например, для спиновой инжекции [1]. Такие РМП можно, с одной стороны, легко интегрировать в стандартную технологию немагнитных полупроводниковых структур на основе кремния, а с другой, в них, по-видимому, можно успешно реализовать эффективный перенос

спин-поляризованных носителей тока (как правило, дырок). Наибольший прогресс как теоретический, так и экспериментальный, достигнут в изучении РМП типа Ge:Mn и Si:Mn, хотя до полного понимания их магнитных и транспортных свойств еще предстоит долгий и непростой путь.

Согласно традиционной терминологии, РМП типа Ge:Mn и Si:Mn представляют собой неупорядоченные сплавы (твердые растворы) Ge<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub> и Si<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub> с низким или умеренным ( $x \approx 0.001-0.1$ ) содержанием марганца. Согласно теоретическим предсказаниям [2], основанным на *ab initio* расчетах электронной структуры, в таких сплавах должно иметь место ферромагнитное (ФМ) упорядочение при достаточно высоких температурах Кюри ( $T_C \approx 300-500$  К). Это упорядочение обусловлено

\*E-mail: otrokov@phys.tsu.ru

\*\*A. Ernst

непрямым обменом локальных моментов на ионах марганца через свободные носители (дырки), источником которых также являются ионы марганца («carrier mediated ferromagnetism»). При этом эффективный момент на ионе марганца должен составлять  $\mu \approx 3\mu_B$ , слабо меняясь в зависимости от занимаемой этим ионом позиции (напомним, что для изолированного иона марганца наиболее энергетически выгодной является позиция замещения в решетке германия или позиция тетраэдрического внедрения в решетке кремния). В реальных сплавах  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$  и  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  ситуация оказалась намного сложнее, чем предполагалось в модели [2], и вопрос о высокотемпературном ферромагнетизме в этих сплавах остается открытым. Дело в том, что практически при любой методике их выращивания имеет место сильная фазовая сегрегация с образованием различных включений и кластеров, что приводит к противоречию между экспериментальными результатами и теоретическими предсказаниями, сделанными для макроскопически однородных систем.

Вопрос о природе ферромагнетизма в сплавах  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$  нельзя считать окончательно решенным, хотя имеется четкое понимание сложившейся экспериментальной ситуации. Так, в работе [3] изучались эпитаксиальные пленки  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$  ( $x \approx 0.035$ ); в этих пленках ниже  $T = 116$  К наблюдался ФМ-порядок, обусловленный, по-видимому, наличием магнитных включений (преципитатов) размером от 2 до 6 нм с повышенным по отношению к основному материалу содержанием марганца. Как показали исследования [4–7] сплавов с низким или умеренным ( $x \approx 0.02$ – $0.1$ ) содержанием марганца, в состав преципитатов входят различные германаты марганца, например  $\text{Ge}_3\text{Mn}_5$  или  $\text{Ge}_8\text{Mn}_{11}$ , обладающие ближним ФМ-порядком при температурах вблизи и выше комнатной. Это обстоятельство приводит к наблюдаемому в экспериментах выше некоторой характерной температуры блокировки суперпарамагнитному поведению преципитатов, каждый из которых имеет гигантский магнитный момент (до  $2000\mu_B$ ). Чтобы непротиворечиво интерпретировать результаты магнитных измерений в сплавах с низким и умеренным ( $x < 0.09$ ) содержанием марганца, авторам работы [8] пришлось ввести две различные температуры ФМ-упорядочения:  $T_C^*$  и  $T_C$ , где более высокая  $T_C^* \approx 300$  К отвечает появлению ближнего ФМ-порядка внутри преципитата, а более низкая,  $T_C \approx 10$  К, является точкой перколяционного перехода в ФМ-состояние во всем образце. Отметим, однако, что авторы ра-

бот [9, 10] наблюдали ФМ-порядок при комнатной температуре соответственно в сплавах  $\text{Ge}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}$  и  $\text{Ge}_{0.981}\text{Fe}_{0.019}$ . При этом подчеркивалось, что ионы марганца и железа инкорпорируются в решетку германия, а вторичные фазы и кластеры обнаружены не были. Транспортные измерения [11] выявили полупроводниковый характер проводимости сплава  $\text{Ge}_{0.81}\text{Mn}_{0.13}\text{Fe}_{0.06}$  во всем температурном интервале. Как следует из результатов данной работы, не прямое ФМ-взаимодействие осуществляется при этом локализованными дырками с концентрацией около  $10^{20}$   $\text{см}^{-3}$  и подвижностью около  $10$   $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ .

Таким образом, в сплавах  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$  магнитное упорядочение происходит, скорее всего, в несколько этапов. При высоких температурах (выше или порядка комнатной) происходит формирование ближнего ФМ-порядка внутри отдельных нанопреципитатов, образующихся вследствие крупномасштабных флуктуаций состава сплава и содержащих германаты марганца или твердые растворы с повышенной концентрацией марганца. Затем, при более низких температурах происходит блокировка и, возможно, частичное упорядочение магнитных моментов этих нанопреципитатов в матрице  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$  с пониженным содержанием марганца. Наконец, при самых низких температурах начинается процесс ФМ-упорядочения локальных моментов ионов марганца, диспергированных в матрице  $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$ , возможно, по перколяционному сценарию (см., например, дискуссию в работе [5]).

Гораздо более неопределенная ситуация сложилась в понимании природы ферромагнетизма в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ , для которых полученные экспериментальные результаты крайне противоречивы. Имеются данные о высокотемпературном ФМ-порядке ( $T_C^* \approx 250$ – $400$  К) в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  с низким или умеренным ( $x \approx 0.001$ – $0.1$ ) содержанием марганца, полученных методами вакуумного осаждения [12], ионной имплантации [13] и магнетронного напыления [14, 15] марганца, однако механизм этого порядка остается неясным. С другой стороны, в сплавах  $\alpha\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  ( $0.01 < x < 0.175$ ), полученных допированием аморфного кремния марганцем с последующей гомогенизацией сплава, ФМ-порядок не был обнаружен [16], хотя магнитная восприимчивость этих сплавов в широком диапазоне составов отвечает закону Кюри–Вейсса с очень малым эффективным моментом (менее  $0.1\mu_B/\text{Mn}$ ). Авторы работы [16] предположили, что в сплавах  $\alpha\text{-Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  лишь малая часть от общего числа ионов марганца участвует в формировании ФМ-порядка, находясь в решетке кремния в виде изолированных центров

с локальными магнитными моментами, в то время как подавляющая часть ионов марганца находится в немагнитных конфигурациях. Результаты рентгеновской [17, 18] и электронной [19] микроскопии свидетельствуют о том, что в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  большинство ионов марганца не занимает позиции замещения или внедрения в решетке кремния, а входит в состав различных силицидов (типа  $\text{Mn}_4\text{Si}_7$  или  $\text{Mn}_{11}\text{Si}_{19}$ ), образующих кластеры или включения (преципитаты) нанометровых размеров с номинальным составом  $\text{MnSi}_{1.7}$  [20]. При этом средний магнитный момент в пересчете на ион марганца, рассчитанный из данных по насыщению намагниченности в сильном магнитном поле, оказывается весьма малым (около  $0.21\mu_B$ ), что полностью противоречит теоретическим предсказаниям [2]. В работе [21] в пленках  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  с высоким содержанием марганца ( $x \approx 0.35$ ), полученных методом лазерного напыления, наблюдался аномальный эффект Холла с ярко выраженным гистерезисным поведением, указывающим на наличие ФМ-порядка. Была зафиксирована температура Кюри  $T_C \approx 250$  К и эффективный момент на ион марганца  $\mu \approx 0.1\text{--}0.2\mu_B$ . Заметим, однако, что система [21] сильно отличается от обсуждавшихся выше систем с полупроводниковым типом проводимости [12–15], демонстрируя металлический тип проводимости. Кстати, аномальный эффект Холла наблюдался и в эпитаксиальных пленках  $\text{Si}_{1-x}\text{Fe}_x$  с  $x \approx 0.07$  при температурах ниже 26 К, что свидетельствует об отсутствии высокотемпературного ферромагнетизма в этом материале [22].

Полученные результаты ставят серьезные вопросы о природе ферромагнетизма в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ . С одной стороны, очевидно, что модель непрямого обмена между локальными моментами на ионах марганца по механизму «carrier mediated ferromagnetism» не может объяснить возникновение ФМ-порядка в этих системах просто потому, что таких моментов крайне мало. С другой стороны, хотя указанные выше силициды марганца являются слабыми зонными ферромагнетиками (weak itinerant ferromagnets), очень сложно интерпретировать ФМ-порядок в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  в рамках традиционного механизма зонного ферромагнетизма. Дело в том, что для большинства известных силицидов марганца  $T_C \approx 50$  К, а эффективный момент на ион марганца  $\mu \approx 0.01\mu_B$  [23, 24], т. е. являются величинами на порядок меньшими, чем в обсуждаемых системах. В недавней работе [25] было высказано предположение, что ферромагнетизм в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  не связан непосредственно с наличием магнитных ионов марганца в той или иной форме,

а обусловлен появлением магнитных дефектов (типа оборванных связей в решетке кремния) в процессе приготовления сплава, например, при ионной имплантации или лазерном напылении на подложку. Следует признать, таким образом, что вопрос о природе и механизме ФМ-порядка в сплавах  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  в настоящее время остается нерешенным.

Дискретные магнитные сплавы (ДМС, а в англоязычной литературе digital magnetic alloys) типа  $A^{IV}/M$ , о которых пойдет речь в настоящей работе, представляют собой нетрадиционную разновидность РМП на основе элементов IV группы. В этих материалах ионы M (чаще всего, марганца) с номинальной концентрацией, соответствующей моноили субмонослойному покрытию, вводятся в матрицу полупроводника  $A^{IV}$  (Si или Ge) посредством селективного легирования в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии и формируют так называемые магнитные  $\delta$ -слои [1]. Эти  $\delta$ -слои образуют либо отдельные магнитные элементы гибридной полупроводниковой гетероструктуры, либо периодическую решетку таких элементов (собственно говоря, и называемую термином ДМС). Таким способом можно достичь локально высокой концентрации ионов переходных металлов, которая значительно превышает предел их растворимости в объемных полупроводниках. Величина обменного взаимодействия между магнитными моментами внутри  $\delta$ -слоев существенно выше, чем в объемных РМП, а величина обменного взаимодействия между  $\delta$ -слоями может варьироваться подбором состава и геометрических параметров ДМС. Следовательно, в данных материалах можно в широких пределах изменять их магнитные и транспортные свойства.

Наиболее интенсивно за последние годы исследовались ДМС типа  $(A^{III}B^V)/M$ , где  $A^{III}B^V = \text{GaAs}, \text{GaSb}$ . Это связано, в первую очередь, с тем обстоятельством, что для данных систем разработаны надежные методы получения относительно качественных ферромагнитных  $\delta$ -слоев. Так, например, ДМС в виде гетероструктуры  $\text{GaAs}/\text{MnAs}$  был выращен поочередным осаждением нанослоев  $\text{GaAs}$  и  $\text{MnAs}$  [26, 27]. В ДМС типа  $\text{GaAs}/\text{Mn}$  и  $\text{GaSb}/\text{Mn}$  субмонослой ионов марганца были периодически вставлены в матрицу  $\text{GaAs}$  или  $\text{GaSb}$  [28, 29]. Необходимо также отметить оригинальный способ создания одиночных ферромагнитных  $\delta$ -слоев из ионов марганца в гетероструктурах на основе  $\text{GaAs}$ , успешно реализованный в работах [31, 32]. Несмотря на чрезвычайно интересные перспективы, ДМС типа  $A^{IV}/M$  в экспериментальном плане практически не исследованы. Проблемы фазовой сегре-

гации (образование силицидов и германатов переходных металлов в процессе выращивания ДМС), судя по всему, пока препятствуют выращиванию качественных  $\delta$ -слоев в матрицах кремния и германия. Первый успех в этом направлении был достигнут в работе [33] для многослойных структур  $[\text{Si}(20 \text{ \AA})/\text{Mn}(x)]_{30}$  при номинальном составе  $\delta$ -слоя  $x = 1, 1.5$  и  $2.0 \text{ \AA}$ .

В теоретическом плане основное внимание пока уделяется расчетам *ab initio* зонной структуры ДМС типа  $A^{\text{IV}}/M$ , которым посвящена наша работа. Электронный спектр этих ДМС содержит как сильно коррелированные узкие, так и слабо коррелированные широкие зоны. Магнитный порядок внутри каждого слоя возникает благодаря сильной корреляции электронных состояний в узких зонах и их гибридизации с состояниями в широких зонах, т. е. происходит по зонному механизму Андерсона–Хаббарда [34]. В то же время обменная связь между различными слоями переходных металлов носит ярко выраженный характер суперобмена и осуществляется путем туннелирования квазичастиц через квазидвумерные спин-поляризованные состояния [35–38], образуемые слоями в матрице  $A^{\text{IV}}$ .

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследования *ab initio* электронной структуры и магнитного порядка ДМС  $A^{\text{IV}}/M$ , как правило, ограничиваются рассмотрением идеальных монослоев замещения, а в качестве магнитного компонента наиболее часто выбирается марганец. Так, для ДМС  $\text{Ge}/\text{Mn}$  с толщиной прослоек германия вплоть до 31 атомного слоя (в дальнейшем мы будем использовать обозначение  $\text{Ge}_{31}/\text{Mn}$ ) были предсказаны ФМ-упорядочение в слое марганца и электронная структура, близкая к полуметаллической [39, 40]. Авторы работы [41], введя параметр Хаббарда  $U = 2 \text{ эВ}$  для  $p$ -состояний  $\text{Ge}^1$ , предсказали полуметаллический электронный спектр для  $\text{Ge}_7/\text{Mn}$  и усиление тенденции к формированию ФМ-порядка в металлическом слое. Магнитный порядок и электронный спектр в ДМС  $\text{Si}/\text{Mn}$  качественно не отличаются от  $\text{Ge}/\text{Mn}$  [42]. Дополнительно известно, что в  $\text{Si}_{15}/\text{Mn}$  полуметаллическое состояние сохраняется при наличии в плоскости  $\delta$ -слоя вплоть до

25 % вакансий или атомов кремния (располагающихся в узлах решетки) той же концентрации [43]. ДМС  $\text{Si}_{23}/M$  ( $M = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$ ) были недавно исследованы в работе [44], где сообщалось о ФМ-порядке в монослое хрома и об антиферромагнитном (АФМ) — в слоях Fe и Co; результаты, полученные относительно ДМС с  $\delta$ -слоем марганца находились в согласии с расчетами [42]. В работе [44] было предположено незначительное влияние структурных релаксаций на магнитный порядок в слоях переходных металлов и рассматривались нерелаксированные ДМС. Однако позднее авторами статьи [45] было обнаружено, что в полностью релаксированных ДМС  $\text{Si}_N/\text{Fe}$  ( $7 \leq N \leq 19$ )  $\delta$ -слои железа являются ферромагнитными. Кроме того, при помощи расчетов полных энергий было предсказано ФМ-упорядочение в слое железа, помещенном в матрицу кремния по типу внедрения. Ферромагнитный порядок в 0.25, 0.5 и полном монослое марганца по типу внедрения в матрице кремния был предсказан в работе [46]. Однако полная процентная спиновая поляризация на уровне Ферми была обнаружена лишь в системе с 0.25 монослоя марганца. Согласно проведенным расчетам, наличие межузельных атомов кремния в  $\delta$ -слое замещения приводит к потере полуметаллическости вследствие энергетически выгодного обмена позициями, приводящего к оккупированию атомом кремния узла, а атомом марганца тетраэдрической пустоты.

Следует отметить, что, за исключением работы [41], во всех упомянутых выше исследованиях тип магнитного порядка определялся на основе расчетов полных энергий АФМ- и ФМ-конфигураций локальных моментов в  $\delta$ -слое переходного металла. При этом использовалась упрощенная модель, в которой рассматривались взаимодействия только между ближайшими соседями в  $\delta$ -слое, однако правомерность применения такой модели не является очевидной. В настоящей работе для определения типа магнитного порядка в ДМС используются высокоточные расчеты *ab initio* интегралов обменного взаимодействия и полных энергий АФМ- и ФМ-конфигураций, поскольку такой подход является достаточно надежным при определении типа магнитного порядка.

Что касается компонентов изучаемых сплавов, то кроме германия и кремния в данной работе в качестве матрицы впервые рассматривается неупорядоченный твердый раствор  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  в котором атомы кремния и германия хаотически распределены по узлам решетки. Помимо марганца, в качестве  $\delta$ -легирующего элемента мы так же исследуем переходные металлы Ti, V, Cr, Fe, Co и Ni. В отношении Ti, V, Co и Ni необходимо отметить, что наличие

<sup>1)</sup> В рамках полнопотенциального линейаризованного метода присоединенных плоских волн в обобщенном градиентном приближении к обменно-корреляционному функционалу  $U = 2 \text{ эВ}$  приводит к экспериментальной величине фундаментальной щели в объемном германии.

(отсутствие) локального магнитного момента в объемном переходном металле не обязательно означает наличие (отсутствие) локального момента на ионе данного сорта в дискретном сплаве с  $A^{IV}$ .

Как было показано в работе [45], в ДМС Si/Fe разница энергий внутрислоевых АФМ- и ФМ-конфигураций локальных моментов чувствительна к изменению кратчайшей длины связи между атомами железа и кремния, возникающему при структурной релаксации. В соответствии с этим, в наших расчетах исследование внутрислоевого магнитного упорядочения в дискретных сплавах проводится как для релаксированных, так и для нерелаксированных систем.

### 3. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДА РАСЧЕТА

Дискретные магнитные сплавы моделировались сверхячейками  $(A^{IV})_7/M$ , состоящими из монослоя замещения  $M = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$  и полупроводниковой прослойки  $A^{IV} = Si, Si_{0.5}Ge_{0.5}, Ge$  толщиной семь атомных слоев. Согласно проведенным расчетам обменных параметров, прослойка данной толщины эффективно ослабляет межслоевые обменные взаимодействия. Поэтому качественные различия в магнитном упорядочении в  $\delta$ -слоях ДМС  $A_7^{IV}/M$  и  $A_{11}^{IV}/M$  отсутствуют, что подтверждается тестовыми расчетами для  $A^{IV} = Si, Ge$  и  $M = Mn, Fe$ . Далее в обозначении  $A_7^{IV}/M$  мы не будем указывать нижний индекс «7» за исключением тех случаев, когда такое обозначение необходимо. Плоскостью роста ДМС была выбрана плоскость (001). Базисные векторы элементарных ячеек  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  и  $\mathbf{c}$  направлены соответственно вдоль [100], [010] и [001], а их модули  $a = b = a_0^{A^{IV}}$  и  $c = 2a_0^{A^{IV}}$ , где  $a_0^{A^{IV}}$  — оптимизированная постоянная решетки объемного полупроводника  $A^{IV}$  в структуре алмаза. Равновесные параметры решеток полупроводников определялись при помощи нахождения экстремумов расчетных кривых зависимости полной энергии от объема, подогнанных под уравнение состояния Бёрча второго порядка [47]. Полученные таким образом значения постоянных решеток составили  $a_0^{Si} = 5.46 \text{ \AA}$ ,  $a_0^{Si_{0.5}Ge_{0.5}} = 5.61 \text{ \AA}$  и  $a_0^{Ge} = 5.77 \text{ \AA}$ .

Расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности в обобщенном градиентном приближении (ОГП) к обменно-корреляционному потенциалу [48]. Для проведения структурных релаксаций в ДМС использовались плоско-волновой базис и PAW-псевдопотенциалы [49], реали-

зованные в коде VASP (Vienna *ab initio* simulation package) [50, 51]. Базисный набор плоских волн с энергиями менее 500 эВ и Г-центрированная сетка специальных  $\mathbf{k}$ -точек [52]  $6 \times 6 \times 2$  обеспечивали сходимость полной энергии с точностью до 0.1 мэВ в расчете на атом. При использовании более плотной сетки в зоне Бриллюэна величины релаксаций изменялись не более чем на 0.25 %. Оптимизация атомных позиций продолжалась до достижения сил менее 0.01 эВ/Å для каждого атома в сверхрешетке. После этого проводились расчеты электронной структуры методом Корринги–Кона–Ростокера (ККР) [53, 54] в приближении атомных сфер (ПАС), использование которого для исследования систем с высокой симметрией в рамках метода сверхячейки, как известно, приводит к разумным результатам [55]. Мы провели также тестовые расчеты, используя полнопотенциальную версию ККР, которые не выявили значительных расхождений с расчетами в ПАС для полных энергий, магнитных моментов и обменных параметров. Поскольку расчеты в рамках ККР–ПАС являются вычислительно менее затратными, мы ограничились использованием именно данного приближения. При этом использовалась сетка специальных  $\mathbf{k}$ -точек  $12 \times 12 \times 6$ . Изменение полной энергии при расчетах на более точных сетках составляло менее 1 мэВ на элементарную ячейку.

Полностью релаксированный неупорядоченный сплав  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  моделировался в приближении когерентного потенциала (ПКП), сформулированном в рамках метода ККР [56, 57]. Корректность описания неупорядоченного сплава  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  в наших расчетах подтверждается удовлетворительным согласием рассчитанного ( $10^{-2} \text{ \AA}$ ) и экспериментального ( $7 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$  [58]) значений отклонения параметра решетки  $a_0^{Si_{0.5}Ge_{0.5}}$  от значения, полученного в предположении линейного поведения  $a_0^{Si_{1-x}Ge_x}(x)$  (закон Vegard [59]). Для оптимизации атомных позиций в ДМС  $Si_{0.5}Ge_{0.5}/M$  мы интерполировали значения смещений, наблюдавшихся при релаксациях в Si/M и Ge/M, в соответствии с рассчитанной зависимостью  $a_0^{Si_{1-x}Ge_x}(x)$ .

Как известно, в рамках теории функционала электронной плотности невозможно корректно описать электронные структуры полупроводников и изоляторов, что выражается в недооценке величин запрещенных зон. В то же время зонные спектры, полученные в рамках GW-приближения находятся в хорошем согласии с экспериментом [60]. В наших расчетах электронные структуры собственных объемных Si,  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  и Ge приводятся в соответствие с полученными в рамках GW-приближения [61] при

помощи комбинированного подхода [62, 63], в котором энергия валентных  $p$ -электронов полупроводника учитывается путем введения эффективного кулоновского потенциала  $U$ , а остовные и валентные  $s$ -электроны описываются потенциалом ОГП. Таким образом, согласие с GW-расчетами зонных спектров Si,  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  и Ge достигается при значениях эффективного кулоновского потенциала соответственно  $U = 1.38, 1.25$  и  $1.53$  эВ. Величины запрещенных зон при этом соответствуют экспериментальным значениям  $E_g^{\text{Si}} \approx 1.12$  эВ,  $E_g^{\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}} \approx 1$  эВ (величина щели для полностью релаксированного сплава [61]) и  $E_g^{\text{Ge}} \approx 0.65$  эВ.

Расчет интегралов обменного взаимодействия  $J_{ij}$  между локальными моментами ионов переходных металлов в сплавах проводился на сетках  $\mathbf{k}$ -точек  $32 \times 32 \times 16$  с использованием магнитной теоремы сил (magnetic force theorem) [64] и гамильтониана Гейзенберга,

$$H = - \sum J_{ij} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j,$$

где единичные векторы  $\mathbf{e}_{i(j)}$  указывают направления локальных магнитных моментов, а  $J_{ij}$  описывают взаимодействия между ними. Идея магнитной теоремы сил состоит в рассмотрении бесконечно малых вращений классических спинов, расположенных на двух различных узлах. Возникающие вследствие этого изменения энергии,  $\delta E = J_0(1 - \cos \delta\theta)$ , где  $\delta\theta$  — угол поворота, отображаются на классический гамильтониан Гейзенберга при помощи теории многократного рассеяния. Коэффициент  $J_0 = \sum_{i \neq 0} J_{0i}$ , соответствующий энергии, которую необходимо затратить, чтобы изменить направление локального момента на противоположное, отражает «одноузельную спиновую жесткость» и ФМ-состояние стабильно, когда  $J_0 > 0$ .

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

### 4.1. Структурная релаксация

В рамках используемой модели введенный в матрицу элементарного полупроводника монослой переходного металла вызывает такие релаксации, при которых атомные плоскости полупроводника движутся как единое целое, в то время как внутриплоскостные смещения атомов вдоль [001] пренебрежимо малы. Очевидно, такое положение вещей не может сохраняться в случае, если каждая атомная плоскость полупроводниковой прослойки содержит атомы двух сортов, как это имеет место в случае  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ . Строго говоря, в неупорядоченном сплаве

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  отсутствует ближний порядок, поскольку длины межатомных связей (т. е. кратчайшие расстояния) Si–Si, Si–Ge и Ge–Ge не являются одинаковыми. При этом реальные положения атомов кремния и германия уже не соответствуют позициям узлов идеальной структуры алмаза, что вкуче с наличием в системе двух сортов атомов приводит к более сложному характеру релаксаций при введении в полупроводник  $\delta$ -слоя переходного металла. К сожалению, описанная ситуация не может быть смоделирована в рамках ПКП. Поэтому в случае ДМС  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{M}$  мы ограничиваемся рассмотрением некой «усредненной решетки», в которой длины связей Si–Si, Si–Ge и Ge–Ge равны между собой. В рамках данной модели внутриплоскостные смещения атомов прослойки, возникающие вследствие введения монослоя переходного металла в полупроводник, отсутствуют.

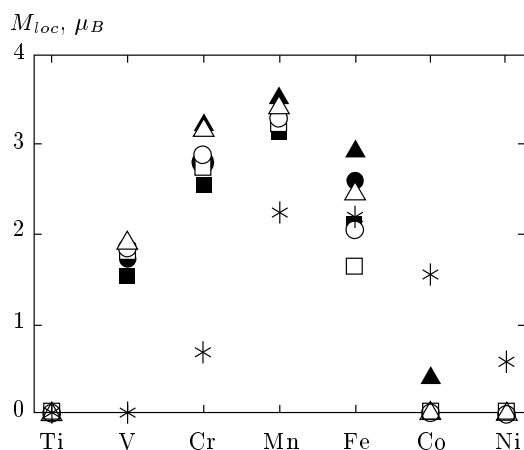
В таблице показаны изменения межатомных длин связи  $\text{A}^{\text{IV}}\text{--M}$  при структурных релаксациях. Нетрудно видеть, что  $\delta$ -слой конкретного переходного металла, будучи помещенным в различные матрицы, вызывает релаксации различных знаков (за исключением  $\delta$ -слоя Ni). Известно, что длины связи в ионных соединениях с хорошей точностью равны сумме радиусов ионов [65]. Для дискретных сплавов  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$ , которые вследствие неравенства электроотрицательностей компонентов в области  $\delta$ -легирования, по-видимому, являются ионными соединениями, данное равенство также должно выполняться:  $d_{\text{A}^{\text{IV}}\text{--M}} = d_{\text{A}^{\text{IV}}}^{\text{ion}} + d_{\text{M}}^{\text{ion}}$ . Следовательно, длины связи атомов одного и того же переходного металла с атомами  $\text{A}^{\text{IV}}$  различных сортов действительно должны быть различными, поскольку радиусы ионов зависят от их зарядовых состояний, которые определяются соотношением электроотрицательностей элементов.

### 4.2. Локальные моменты ионов переходных металлов

Локальные магнитные моменты ионов переходных металлов, входящих в состав различных дискретных сплавов, показаны на рис. 1. Рассматривая сплавы с ненулевыми намагниченностями, отметим, что рассчитанные значения локальных моментов ионов переходных металлов в  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{V}$ ,  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{Cr}$ ,  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{Mn}$  и Ge/Fe оказались больше, а в Si/Fe и  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{Fe}$  меньше, чем в объемных переходных металлах. Однако было обнаружено, что значения локальных моментов в нерелаксированных ДМС  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{Fe}$  на 16–22% выше, чем в релаксированных, и не ниже, чем в объемном железе. Последнее об-

**Таблица.** Изменение кратчайшей длины связи между ионами полупроводника  $A^{IV}$  и переходного металла,  $d_{A^{IV}-M}$ , при структурной релаксации в ДМС

	Нерелаксированные ДМС			Релаксированные ДМС		
	Si	Si <sub>0.5</sub> Ge <sub>0.5</sub>	Ge	Si	Si <sub>0.5</sub> Ge <sub>0.5</sub>	Ge
$d_{M-M}, \text{Å}$	3.865	3.966	4.084	3.865	3.966	4.084
$d_{A^{IV}-Ti}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.483	2.509	2.534
$d_{A^{IV}-V}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.441	2.465	2.498
$d_{A^{IV}-Cr}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.410	2.444	2.496
$d_{A^{IV}-Mn}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.390	2.423	2.460
$d_{A^{IV}-Fe}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.303	2.341	2.388
$d_{A^{IV}-Co}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.272	2.299	2.334
$d_{A^{IV}-Ni}, \text{Å}$	2.366	2.429	2.50	2.272	2.296	2.329



**Рис. 1.** Рассчитанные значения локальных магнитных моментов  $M_{loc}$  ионов переходных металлов в ДМС Si/M (□, ■), Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub>/M (○, ●), Ge/M (△, ▲) с учетом (светлые символы) и без учета (темные символы) релаксаций; звездочками изображены локальные магнитные моменты в объемных переходных металлах. Для  $A^{IV}/V$  и Ge/Cr приведены значения  $M_{loc}$  в АФМ-решениях

стоятельство указывает на хорошо известную взаимосвязь величин локальных моментов и расстояний до ближайших соседей (как правило, атомов первых двух координационных сфер). А именно, магнитные моменты на ионах железа в релаксированных сплавах уменьшаются вследствие уширения  $d$ -зон железа, вызванного более сильным взаимодействием электронов железа с электронами атомов прослойки и гибридизацией электронных состояний, возникаю-

щими из-за значительного уменьшения длины связи  $d_{A^{IV}-Fe}$  при релаксации (см. таблицу). По той же причине в большинстве ДМС  $A^{IV}/M$  локальные моменты ионов переходных металлов больше, чем в объемных: кратчайшие расстояния  $d_{M-M}$  в  $A^{IV}/M$  существенно превышают аналогичные расстояния в объемных переходных металлах, сопоставимые с кратчайшими длинами связи  $d_{A^{IV}-M}$  в рассматриваемых ДМС.

Интересный случай представляют собой сплавы  $A^{IV}/Co$ , намагниченность которых, за исключением нерелаксированного Ge/Co, неожиданно оказалась равной нулю. Согласно первому правилу Хунда, кобальт, как и ванадий, в форме свободного атома имеет магнитный момент  $3\mu_B$ . Кроме того, в отличие от кобальта, объемный ванадий является немагнитным. Тем не менее в ДМС с элементами IV группы ванадий имеет локальный момент, в то время как кобальт нет. Титан и никель, имеющие в форме свободных атомов магнитные моменты  $2\mu_B$ , в дискретных сплавах  $A^{IV}/M$  так же, как и кобальт, не имеют локального момента.

### 4.3. Магнитное упорядочение

При расчетах обменных параметров мы учитывали взаимодействия между локальными моментами, находящимися на расстоянии не более  $3a_0^{A^{IV}}$  друг от друга. Данный радиус обрезания охватывает 11 координационных сфер. Расстояние между соседними монослоями переходных металлов в рассматриваемых ДМС составляет  $2a_0^{A^{IV}}$ , и, следовательно, в наших расчетах были также оценены величины обмен-

ных взаимодействий между спинами соседних ферромагнитных  $\delta$ -слоев. Интенсивность такого суперобмена ожидаемо оказалась на порядок слабее, чем у внутрислоевого обмена.

Как видно на рис. 2б, исследуемое ФМ-решение в  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{V}$  и  $\text{Ge}/\text{V}$  неустойчиво, так как доминирующие константы обменного взаимодействия  $J_{01}$  отрицательны. Это, в свою очередь, приводит к тому, что коэффициент одноузельной спиновой жесткости  $J_0 < 0$  и для переворота спина не требуется энергии (рис. 3а,б), поскольку система стремится принять энергетически более выгодную АФМ-конфигурацию, в которой спины ближайших соседей антипараллельны (назовем данную конфигурацию АФМ1). В отличие от  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{V}$  и  $\text{Ge}/\text{V}$ , для ФМ-конфигурации  $\delta$ -слоя ванадия в кремнии ни одно из  $J_{0i}$  явно не доминирует, а сами  $J_{0i}$  чрезвычайно малы. Коэффициент одноузельной спиновой жесткости также весьма незначителен:  $J_0 = 0.62$  мэВ (рис. 3а). Расчеты полных энергий свидетельствуют о невыгодности ФМ-решения по сравнению с АФМ1. Несоответствие знаков  $J_0$  и  $\Delta E$  в данном случае, по-видимому, обусловлено значительно различающимися локальными моментами на ионах ванадия в ФМ- и АФМ1-решениях. Малый магнитный момент,  $1.12\mu_B$ , в ФМ-решении с положительной одноузельной спиновой жесткостью, по-видимому, соответствует метастабильному состоянию, в то время как более значительный момент в решении АФМ1,  $1.82\mu_B$ , приводит к доминированию антиферромагнитного обмена, что обеспечивает значительный выигрыш в энергии.

В ДМС  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{Cr}$  обмен между ближайшими соседями носит АФМ-характер. Однако ФМ-взаимодействия со вторыми и третьими соседями дают существенный вклад в полную энергию, препятствующий реализации конфигурации АФМ1. Данное обстоятельство находит отражение в разнице полных энергий АФМ1- и ФМ-конфигураций локальных моментов  $\Delta E$ , см. рис. 3б. На рисунке видно, что энергетическая выгодность АФМ1 достигается лишь в  $\text{Ge}/\text{Cr}$ . Тем не менее значения коэффициентов  $J_0$  для  $\text{Si}/\text{Cr}$  и  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{Cr}$  отрицательны (рис. 3а), и поэтому в  $\delta$ -слое хрома более вероятно установление не ФМ-, а АФМ-конфигурации, имеющей более сложную структуру, чем АФМ1.

Как видно на рис. 2, во всех системах с монослоями марганца обменное взаимодействие между ближайшими соседями  $J_{01}$  является существенно ферромагнитным и превалирует над взаимодействиями с последующими координационными сферами. Поскольку системы  $\text{A}^{\text{IV}}/\text{Mn}$  имеют полуме-

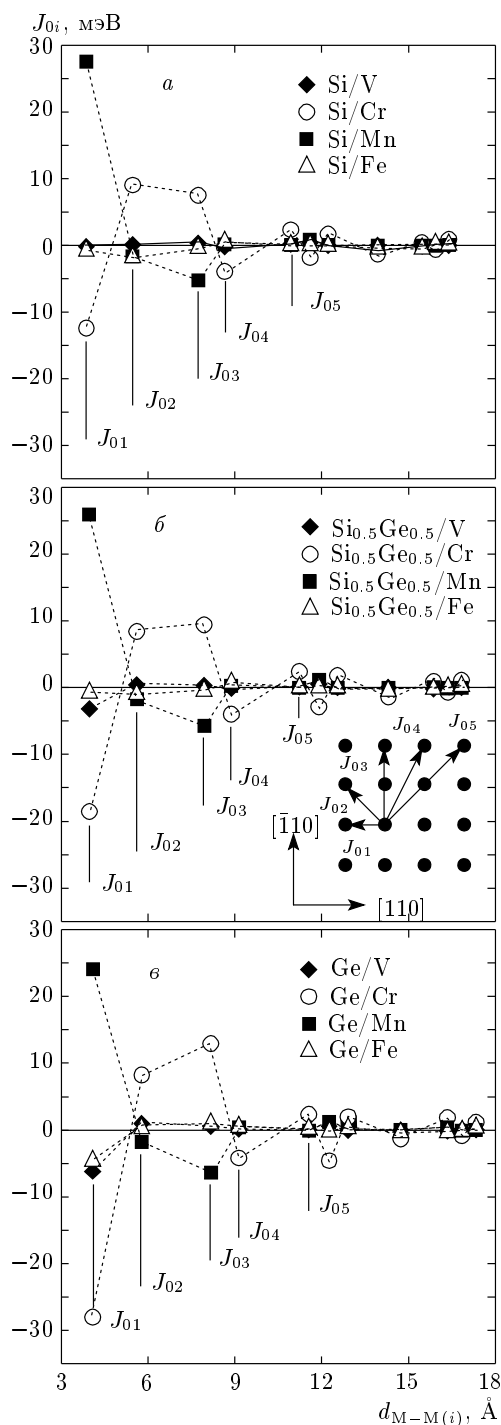
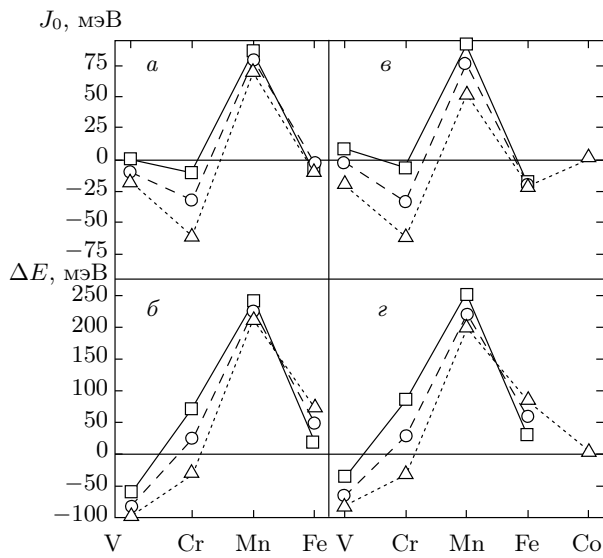


Рис. 2. Рассчитанные для ФМ-решений в ДМС  $\text{Si}/\text{M}$  (а),  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}/\text{M}$  (б) и  $\text{Ge}/\text{M}$  (в) обменные интегралы  $J_{0i}$  в зависимости от расстояния  $d_{\text{M}-\text{M}(i)}$  между ионом переходного металла и его  $i$ -м соседом в монослое. Показаны только внутрислоевые взаимодействия. На вставленной панели изображен  $\delta$ -слой замещения, стрелками показаны обменные взаимодействия

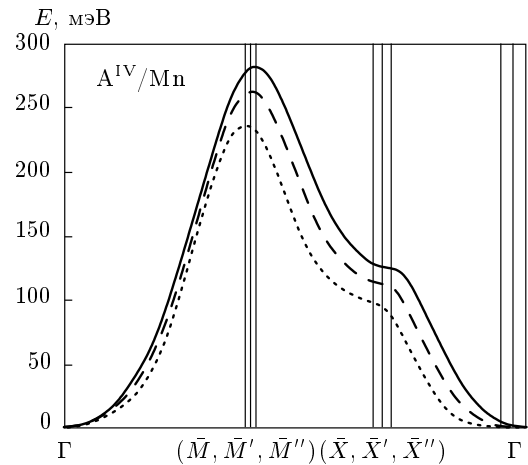




**Рис. 3.** *a, б*) Коэффициенты одноузельной спиновой жесткости  $J_0$ , рассчитанные для ФМ-решений; *б, г*) разница полных энергий АФМ1- и ФМ-конфигураций  $\Delta E = E_{AFM1} - E_{FM}$  как функция  $\delta$ -легирующего элемента для разных полупроводниковых матриц. Данные расчетов с проведением структурных релаксаций показаны на рис. *a, б*, без релаксаций — на рис. *в, г*;  $\square$  — Si,  $\circ$  —  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ ,  $\triangle$  — Ge

таллический или близкий к полуметаллическому характер [40–44], интенсивность обменных взаимодействий быстро убывает с увеличением расстояния между локальными моментами, что обусловлено наличием щели в канале со спином вниз. Положительные коэффициенты одноузельной спиновой жесткости  $J_0$ , см. рис. 3*a*, свидетельствуют об устойчивой тенденции к формированию ФМ-упорядочения в  $\delta$ -слоях марганца. Данная тенденция подтверждается также расчетами полных энергий ФМ- и АФМ1-структур (рис. 3*б*).

В системах с  $\delta$ -слоями железа наблюдаются слабые обменные взаимодействия и основное состояние, отличное от ФМ. Качественно, картины обменных взаимодействий в монослоях железа различны для различных полупроводниковых матриц  $A^{IV}$ . Так, в системе Si/Fe превалирует обменное взаимодействие со вторыми соседями  $J_{01} = -1.80$  мэВ (рис. 2*a*), в то время как в ДМС  $Si_{0.5}Ge_{0.5}/Fe$   $J_{0i}$  ( $i = 1 \dots 3$ ) имеют довольно близкие значения (рис. 2*б*). В обоих случаях высока вероятность реализации сложной магнитной структуры, поскольку полученные  $J_0$  отрицательны, а  $\Delta E$  положительны. В системе Ge/Fe явно выделяется  $J_{01} = -4.62$  мэВ и, поскольку  $J_0 = -17.9$  мэВ, естественно было бы



**Рис. 4.** Рассчитанные для ФМ-решений магنونные спектры сплавов Si/Mn (сплошная кривая),  $Si_{0.5}Ge_{0.5}/Mn$  (штриховая кривая) и Ge/Mn (пунктир). Симметричные точки зон Бриллюэна имеют следующие координаты:  $\bar{\Gamma} - (0, 0)$ ,  $\bar{M} - (\pi/a_0^{Ge}, \pi/a_0^{Ge})$ ,  $\bar{M}' - (\pi/a_0^{Si_{0.5}Ge_{0.5}}, \pi/a_0^{Si_{0.5}Ge_{0.5}})$ ,  $\bar{M}'' - (\pi/a_0^{Si}, \pi/a_0^{Si})$ ,  $\bar{X} - (\pi/a_0^{Ge}, 0)$ ,  $\bar{X}' - (\pi/a_0^{Si_{0.5}Ge_{0.5}}, 0)$  и  $\bar{X}'' - (\pi/a_0^{Si}, 0)$

предположить, что конфигурация АФМ1 будет энергетически более выгодна, чем ФМ, однако расчеты полных энергий показывают, что это не так. Таким образом, в ДМС Ge/Fe так же реализуется сложная АФМ-структура.

Для ДМС  $A^{IV}/Mn$  были также проведены расчеты полных энергий парамагнитных (ПМ) фаз, которые моделировались в приближении разупорядоченных локальных моментов (disordered local moment). Для всех остальных сплавов сравнение энергий ФМ- и ПМ-фаз не проводилось, поскольку ФМ-порядок в них либо энергетически не выгоден, либо нестабилен. Оказалось, что ФМ-решение выгоднее, чем ПМ, на 124, 118 и 111 мэВ соответственно для ДМС Si/Mn,  $Si_{0.5}Ge_{0.5}/Mn$  и Ge/Mn.

Для исследования стабильности ФМ-порядка в  $\delta$ -слоях марганца были рассчитаны магنونные спектры для соответствующих ДМС, см. рис. 4. Следует отметить, что магنونный спектр конкретной системы имеет смысл лишь в том случае, если он соответствует основному состоянию, которое известно, например, из эксперимента. Согласно расчетам полных энергий и, в особенности, обменных интегралов, в ДМС  $A^{IV}/Mn$  ФМ-решение устойчиво и поэтому есть основания полагать, что данное состояние является основным. Как видно на рис. 4, во всех трех системах ФМ-решение динамически стабильно, поскольку спектры расположены в области положительных энергий. Более того,

достижение спектрами своих максимумов в симметричных точках зон Бриллюэна свидетельствует в пользу коллинеарности магнитной структуры в монослоях марганца. Наиболее устойчивым является ФМ-решение в сплаве Si/Mn, поскольку для него значения энергии магнетонного спектра в симметричных точках  $M''$  и  $X''$  являются максимальными, а в направлениях  $\Gamma-M''$  и  $\Gamma-X''$  кривые дисперсии возрастают наиболее быстро. Эти факты находятся в соответствии с данными, изображенными на рис. 2 и 3, свидетельствующими о максимальных  $J_0$  и  $\Delta E$  для Si/Mn.

Как было отмечено во Введении, в работе [44] сообщалось, что ФМ-конфигурация локальных моментов в  $\delta$ -слое нерелаксированного ДМС Si<sub>23</sub>/Fe энергетически менее выгодна, чем конфигурация АФМ1. Согласно нашим расчетам полных энергий для случая нерелаксированных ДМС, в Si<sub>7</sub>/Fe ФМ-конфигурация имеет меньшую энергию, чем АФМ1 ( $\Delta E = E_{AFM1} - E_{FM} > 0$ ) (см. рис. 3г). Уместно заметить что, поскольку межслоевые обменные взаимодействия в расчетах полных энергий не учитываются (рассматриваемые сверхячейки содержат один  $\delta$ -слой переходного металла), сравнение величин  $\Delta E$  для (A<sup>IV</sup>)<sub>7</sub>/M и (A<sup>IV</sup>)<sub>23</sub>/M вполне допустимо. Вообще говоря, по той же причине для нерелаксированных ДМС не ожидается существенных различий в значениях  $\Delta E$  для случаев (A<sup>IV</sup>)<sub>7</sub>/M и (A<sup>IV</sup>)<sub>23</sub>/M (A<sup>IV</sup> и M подразумеваются одинаковыми для обоих случаев). Однако, в настоящей работе, для улучшения описания электронной структуры A<sup>IV</sup>, для их  $p$ -состояний, наряду с потенциалом ОГП, был также введен эффективный кулоновский потенциал  $U$ , в то время как в работе [44]  $p$ -состояния описывались потенциалом ОГП. Поэтому правильнее было бы сравнивать расчеты, выполненные в рамках «чистого» ОГП. Однако рассчитанная при  $U = 0$  мэВ величина  $\Delta E$  также оказалась положительной и составила 33 мэВ/ат. Fe. Таким образом, расхождение с результатом работы [44] обусловлено, скорее, не использованием  $U$ -параметра, а иными факторами. В этой связи нельзя не отметить, что вполне корректно сравнивать эти противоречащие друг другу результаты, равно как и обсуждать вероятные причины различий, невозможно, поскольку в работе [44] не сообщались данные об использованном в расчетах параметре решетки кремния, величине его запрещенной зоны, а также не была указана выбранная для интегрирования по зоне Бриллюэна сетка  $k$ -точек.

На рис. 3в,г показаны параметры  $J_0$  и разницы энергий АФМ1- и ФМ-решений  $\Delta E$  для нерелаксированных ДМС A<sup>IV</sup>/M. Сравнив величины  $J_0$  с их значениями после релаксации, например для Si/Mn, можно видеть, что  $J_0$  уменьшается на величину порядка 5 мэВ при увеличении расстояния Si–Mn на 0.03 Å (см. рис. 3а,в и таблицу). Рассматривая  $\delta$ -слой марганца в матрице германия, можно видеть, что после релаксации расстояние Ge–Mn меньше, а стабильность ФМ-состояния больше, чем до нее. Релаксации в системе Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub>/Mn практически отсутствуют и сила ФМ-взаимодействия в монослое марганца остается неизменной. Таким образом, интенсивность обменных взаимодействий между локальными моментами ионов марганца в  $\delta$ -слое зависит от расстояния  $d_{Mn-A^{IV}}$ . Анализ различий в значениях  $J_0$  до и после релаксаций для всех остальных ДМС свидетельствует о том, что уменьшение расстояния между атомами прослойки и  $\delta$ -слоем способствует усилению (ослаблению) ФМ (АФМ)-взаимодействия.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведение расчетов *ab initio* является на сегодняшний день одним из наиболее эффективных методов теоретического исследования магнитного порядка в ДМС типа A<sup>IV</sup>/M. Ясно, что одновременный учет внутри- и межслоевого обменных взаимодействий даже при не слишком большой толщине прослойки A<sup>IV</sup> между  $\delta$ -слоями переходных металлов делает такой расчет крайне сложным. Однако межслоевое обменное взаимодействие в подавляющем числе ДМС на порядок слабее внутрислоевого уже при толщине полупроводниковой прослойки более 3–4 атомных слоев. Как было аналитически показано в работах [35, 36], при некоторой характерной толщине прослойки эффективный интеграл межслоевого обмена в ДМС меняет знак: при малых расстояниях между  $\delta$ -слоями имеет место их параллельная (т. е. ферромагнитная), а при больших расстояниях — антипараллельная (антиферромагнитная) ориентации. При исследовании магнитных и транспортных свойств ДМС интерес представляют обе ситуации и реализация нужной магнитной конфигурации может быть осуществлена подбором соответствующей толщины прослойки A<sup>IV</sup>. Мы фокусировали внимание исключительно на формировании магнитного порядка внутри  $\delta$ -слоя и для простоты пренебрегали влиянием межслоевого обмена на внутрислоевой. При такой постановке задачи мы, естественно, смогли корректно рассмотреть лишь такие ДМС, в которых расстояние между соседними  $\delta$ -слоями превышает расстояние между ионами переходных металлов внутри од-

ного  $\delta$ -слоя. В противоположном пределе, когда эти расстояния близки по величине, наш подход, разумеется, неприменим.

С целью улучшения описания зонной структуры полупроводников  $A^{IV}$  в расчетах был использован эффективный кулоновский потенциал  $U$ , введенный как параметр. Для выяснения вопроса о влиянии данного параметра на расчет свойств ДМС, мы провели оптимизацию объема чистого кремния и релаксацию ДМС Si/Fe в рамках ОГП для  $U = 0$  и ряда значений  $U \leq 1.38$  эВ. Система Si/Fe была выбрана тестовой из-за значительных структурных релаксаций. Кроме того, именно для Si/Fe уже имеются литературные данные [44].

Результаты расчетов свидетельствуют о незначительных различиях в значениях структурных параметров, полученных при использовании  $U = 0$  и  $U \neq 0$  эВ. В частности, длина связи Si-Si в объемном кремнии при «включении»  $U \leq 1.38$  эВ уменьшается менее чем на 1%. Рассчитанный с использованием  $U = 1.38$  эВ параметр решетки объемного кремния равен  $5.46 \text{ \AA}$ , что всего на 0.5% больше экспериментального. При структурной релаксации в Si/Fe крайняя длина связи Si-Fe при  $U = 1.38$  эВ увеличивается менее чем на 0.7%. Таким образом, использованный эффективный кулоновский потенциал  $U$  весьма слабо меняет структурные свойства изучаемых ДМС. Это неудивительно, так как величина  $U = 1.38$  эВ намного меньше ширины валентной зоны  $A^{IV}$  ( $\sim 12$  эВ).

Однако введение  $U$  существенно улучшает энергетический спектр полупроводника вблизи уровня Ферми, что ведет к более корректному описанию магнанных спектров ДМС и критических температур. Мы провели систематические расчеты обменных параметров  $J_{ij}$  для Si/Fe и Si/Mn и обнаружили, что их значения весьма чувствительны к  $U$ , т. е. к величине щели полупроводника, что важно при определении наиболее стабильной магнитной конфигурации в  $\delta$ -слоях ДМС.

Магнитная теорема сил [64] неоднократно обсуждалась в литературе [66]. Поскольку данная теорема требует знания только одночастичных энергий, правомерность ее использования совместно с кулоновской параметризацией не подлежит сомнению. В нашем подходе используется формула Ллойда [64], которая позволяет рассчитывать изменение энергии электронов при малых отклонениях магнитных моментов от направлений в исходном состоянии. Такой подход позволяет анализировать все возможные конфигурации и поэтому является мощным инструментом исследования магнитного порядка.

Таким образом, в рамках расчетов *ab initio* в нашей работе было исследовано внутрислойное магнитное упорядочение в дискретных сплавах Si, Ge и  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  с переходными  $3d$ -металлами Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co и Ni. Согласно расчетам интегралов обменного взаимодействия, полных энергий и магнанных спектров, стабильный внутрислойной ферромагнетизм имеет место лишь в системах с  $\delta$ -слоями Mn, в то время как в ДМС на основе V, Cr и Fe данный ферромагнетизм нестабилен. В монослоях систем Si/V, Ge/V,  $Si_{0.5}Ge_{0.5}/V$  и Ge/Cr, по-видимому, реализуется АФМ-конфигурация с антипараллельными спинами на ближайших соседях в легирующем  $\delta$ -слое, в то время как в монослоях всех остальных сплавов обнаружена тенденция к формированию более сложных АФМ-конфигураций. Исключение составляют лишь системы с  $\delta$ -слоями Ti, Co и Ni, в которых магнитные взаимодействия отсутствуют для всех рассмотренных вариантов полупроводниковых матриц.

В свете полученных результатов хотелось бы обратить внимание на следующий факт. В последние годы достигнут значительный прогресс в получении модулированно-легированных гетероструктур  $Si_xGe_{1-x}$  с напряженным Ge в роли проводящего канала, обладающих крайне высокими дрейфовыми подвижностями дырок (около  $3000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{c}$ ) [67]. Наши расчеты дают основания полагать, что гипотетические гетероструктуры типа  $(Si_xGe_{1-x}/\delta\text{-Mn})/Si_xGe_{1-x}/\text{Ge}$ , содержащие ФМ-слой (ДМС  $Si_xGe_{1-x}/\text{Mn}$ ) и проводящий канал (напряженный слой Ge), пространственно разделенные слоем  $Si_xGe_{1-x}$ , могут стать перспективными с точки зрения реализации эффективного транспорта спин-поляризованных носителей (дырок). В такой гетероструктуре могут одновременно иметь место устойчивый ФМ-порядок в ДМС  $Si_xGe_{1-x}/\text{Mn}$ , высокая подвижность дырок и их значительная спиновая поляризация в проводящем канале Ge за счет магнитной близости канала к ферромагнитному  $\delta$ -слою. Ранее наличие подобных эффектов было обнаружено в гетероструктурах типа  $(\text{GaAs}/\delta\text{-Mn})/\text{GaAs}/\text{InGaAs}$  [68, 69].

Расчеты проводились на вычислительном кластере СКИФ Cyberia (г. Томск). Авторы благодарят В. Н. Меньшова за полезные дискуссии и Э. Т. Кулатова за критические замечания. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» и РФФИ (грант № 10-02-00118).

## ЛИТЕРАТУРА

1. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
2. A. Stroppa, S. Picozzi, A. Continenza, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **68**, 155203 (2003); S. Picozzi, F. Antoniella, A. Continenza et al., *Phys. Rev. B* **70**, 165205 (2004).
3. Y. D. Park, A. T. Hanbicki, S. C. Erwin et al., *Science* **295**, 651 (2002).
4. S. Ahlers, D. Bougeard, N. Sircar et al., *Phys. Rev. B* **74**, 214411 (2006).
5. А. И. Дмитриев, Р. Б. Моргунов, О. Л. Казакова, Ё. Танимото, *ЖЭТФ* **135**, 1134 (2009).
6. C. Jaeger, C. Bihler, T. Vallaitis et al., *Phys. Rev. B* **74**, 045330 (2006).
7. E. Biegger, L. Stäheli, M. Fonin, U. Rüdiger, and Yu. S. Dedkov, *J. Appl. Phys.* **101**, 103912 (2007).
8. A. P. Li, J. F. Wendelken, J. Shen et al., *Phys. Rev. B* **72**, 195205 (2005).
9. S. Cho, S. Choi, S. C. Hong et al., *Phys. Rev. B* **66**, 033303 (2002).
10. W. Gao, D. Hou, Y. Hu, and S. Wei, *Sol. St. Comm.* **149**, 1924 (2009).
11. R. R. Gareev, Yu. V. Bugoslavsky, R. Schreiber et al., *Appl. Phys. Lett.* **88**, 222508 (2006).
12. F. M. Zhang, X. C. Liu, J. Gao et al., *Appl. Phys. Lett.* **85**, 786 (2004).
13. M. Bolduc, C. Awo-Affouda, A. Stollenwerk et al., *Phys. Rev. B* **71**, 033302 (2005).
14. X. C. Liu, Z. H. Lu, Z. L. Lu et al., *J. Appl. Phys.* **100**, 073903 (2006).
15. X. C. Liu, Y. B. Lin, J. F. Wang et al., *J. Appl. Phys.* **102**, 033902 (2007).
16. L. Zeng, E. Helgren, M. Rahimi et al., *Phys. Rev. B* **77**, 073306 (2008).
17. A. Wolska, K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, and M. S. Walczak, *Phys. Rev. B* **75**, 113201 (2007).
18. S. Zhou, K. Potzger, G. Zhang et al., *Phys. Rev. B* **75**, 085203 (2007).
19. C. Awo-Affouda, M. Bolduc, M. B. Huang et al., *J. Vac. Sci. Technol. A* **24**(4), 1644 (2006).
20. S. Zhou, A. Shalimov, K. Potzger et al., *Phys. Rev. B* **80**, 174423 (2009).
21. С. Н. Николаев, Б. А. Аронзон, В. В. Рыльков и др., *Письма в ЖЭТФ* **89**, 707 (2009).
22. W. F. Su, L. Gong, J. L. Wang et al., *J. Cryst. Growth* **311**, 7, 2139 (2009).
23. 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. Mater.* **272**, 519 (2004).
24. M. Lee, Y. Onose, Y. Tokura, and N. P. Ong, *Phys. Rev. B* **75**, 172403 (2007).
25. А. Ф. Орлов, А. Б. Грановский, Л. А. Балагуров и др., *ЖЭТФ* **136**, 703 (2009).
26. R. K. Kawakami, E. Johnston-Halperin, L. F. Chen et al., *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2379 (2000).
27. T. C. Kreutz, G. Zanelatto, E. G. Gwinn, and A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 4766 (2002).
28. H. Luo, B. D. McCombe, M. H. Na et al., *Physica E (Amsterdam)* **12**, 366 (2002).
29. X. Chen, M. Na, M. Cheon et al., *Appl. Phys. Lett.* **81**, 511 (2002).
30. B. D. McCombe, M. Na, X. Chen et al., *Physica E (Amsterdam)* **16**, 90 (2003).
31. A. M. Nazmul, S. Sugahara, and M. Tanaka, *Phys. Rev. B* **67**, 241308(R) (2003).
32. A. M. Nazmul, S. Kobayashi, S. Sugahara, and M. Tanaka, *Physica E* **21**, 937 (2004).
33. S. H. Chiu, H. S. Hsu, and J. C. A. Huang, *J. Appl. Phys.* **103**, 07D110 (2008).
34. Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).
35. В. Н. Меньшов, В. В. Тугушев, *ЖЭТФ* **133**, 1070 (2008).
36. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, P. M. Echenique et al., *Phys. Rev. B* **78**, 024438 (2008).
37. S. Caprara, V. V. Tugushev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, *Europhys. Lett.* **85**, 27006 (2009).
38. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, S. Caprara et al., *Phys. Rev. B* **80**, 035315 (2009).
39. A. Continenza, F. Antoniella, and S. Picozzi, *Phys. Rev. B* **70**, 035310 (2004).
40. H. Y. Wang and M. C. Qian, *J. Appl. Phys.* **99**, 08D705 (2006).

41. S. Picozzi, M. Ležaić, and S. Blügel, *Phys. Stat. Sol. A* **203**, 11, 2738 (2006).
42. M. C. Qian, C. Y. Fong, K. Liu et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027211 (2006).
43. C. Y. Fong, M. Shauhgnessy, R. Snow, and L. H. Yang, *Phys. Stat. Sol. C* **7**, 3-4, 747 (2010).
44. Yu. A. Uspenskii and E. T. Kulatov, *J. Magn. Magn. Mat.* **321**, 931 (2009).
45. М. М. Отроков, С. А. Останин, А. Эрнст, В. М. Кузнецов, Е. В. Чулков, *ФТТ* **52**, 8, 1563 (2010).
46. H. Wu, P. Kratzer, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 117202 (2007).
47. F. Birch, *J. Geophys. Res.* **57**, 227 (1952).
48. J. P. Perdew and W. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
49. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
50. G. Kresse and J. Fürthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
51. G. Kresse and J. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
52. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
53. J. Kortinga, *Physica (Amsterdam)* **13**, 392 (1947).
54. W. Kohn and N. Rostoker, *Phys. Rev.* **94**, 1111 (1954).
55. N. Papanikolaou, R. Zeller, and P. H. Dederichs, *J. Phys.: Condens. Matter.* **14**, 2799 (2002).
56. P. Soven, *Phys. Rev.* **156**, 809 (1967).
57. B. L. Gyorffy, *Phys. Rev. B* **5**, 2382 (1972).
58. J. P. Dismukes, L. Ekstrom, and R. J. Paff, *J. Phys. Chem.* **68**, 3021 (1964).
59. L. Vegard, *Z. Phys.* **5**, 17 (1921).
60. W. G. Aulbur, L. Jönsson, and J. W. Wilkins, *Sol. St. Phys.* **54**, 1 (2000).
61. D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini et al., *Phys. Rev. B* **74**, 195208 (2006).
62. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev.* **44**, 943 (1991).
63. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov et al., *Phys. Rev. B* **57**, 1505 (1998).
64. A. Liechtenstein, M. Katsnelson, V. Antropov, and V. Gubanov, *J. Magn. Magn. Mater.* **67**, 65 (1987).
65. Б. К. Вайнштейн, В. М. Фридкин, В. Л. Индебом, *Современная кристаллография*, т. 2, Наука, Москва (1979).
66. P. Bruno, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 087205 (2003).
67. М. Myronov, K. Sawano, Y. Shiraki et al., *Appl. Phys. Lett.* **91**, 082108 (2007).
68. Б. А. Аронзон, В. А. Кульбачинский, П. В. Гурин и др., *Письма в ЖЭТФ* **85**, 1, 32 (2007); Б. А. Аронзон, А. С. Лагутин, В. В. Рьльков и др., *Письма в ЖЭТФ* **87**, 3, 192 (2008); М. А. Панков, Б. А. Аронзон, В. В. Рьльков и др., *ЖЭТФ* **136**, 3, 346 (2009); В. А. Aronzon, M. A. Pankov, V. V. Rylkov et al., *J. Appl. Phys.* **107**, 023905 (2010).
69. S. V. Zaitsev, V. D. Kulakovskii, M. V. Dorokhin et al., *Physica E* **41**, 652 (2009).