

50-я научная конференция МФТИ
Факультет проблем физики и энергетики
Секция физики микроволн и наноматериалов

УДК 624.315.592

Ермолов А.В., Головнев Ю.Ф.

Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого

**Влияние обменного взаимодействия
на распределение электронной плотности в области
гетероперехода SmS–EuS**

Гетеросистемы на основе ферромагнитных полупроводников являются уникальными моделями для исследования магнитных взаимодействий и процессов перераспределения зарядовой и спиновой плотности вблизи внутренних границ раздела составляющих слоев. Особый интерес вызывают гетероструктуры на основе материалов, изменяющих вблизи гетерограницы магнитное и валентное состояние. В настоящей работе предлагается гетероструктура на основе ферромагнитного полупроводника EuS и парамагнитного SmS, обладающими одинаковым типом сингонии при практически совпадающем параметре постоянной решётки (5,96 Å), что позволяет создавать на их основе бездефектные системы.

В случае выращивания гетероструктуры SmS–EuS в направлении (111) гетерограница, образованная ионами S^{2-} , разделяет слои ионов Sm^{2+} и Eu^{2+} (рис. 1). Ионы самария в присутствии двухвалентного иона европия переходят в магнитоактивное состояние $4f^6 \rightarrow 4f^5 + e^-$. Появившийся электрон принимает участие в обменном взаимодействии с другими ионами металла и в результате виртуальных процессов на гетеропереходе появляется дополнительная эффективная обменная связь между спинами f -металлов, отсутствующая в объёме рассматриваемых полупроводников (рис. 2).

В работе определено влияние возбужденных состояний на основное в области гетероперехода SmS–EuS в рамках модели Крамерса–Андерсона. Рассмотрено три состояния — основное и два возбужденных. Базисные функции строились из атомных в виде детерминантов Слэтера. Распределяя разными способами спиновые функции по основным и возбужденным состояниям, получены 72 базисные функции. Далее записывались обменные интегралы между орбитами металлов и анионов и составлялось секулярное уравнение. Матричные элементы вычислялись с использованием явного вида функций триплета.

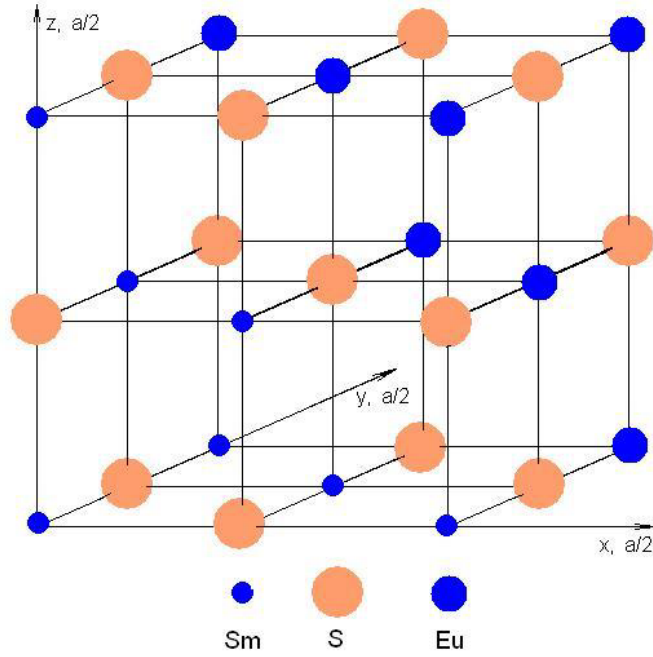


Рис. 1. Структура гетероперехода SmS–EuS

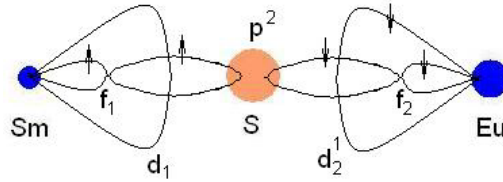


Рис. 2. Схема перекрытия орбит на гетеропереходе SmS–EuS

Детальный анализ перераспределения электронной плотности вблизи гетерограницы требует вычисления многоцентровых кулоновских и обменных интегралов соответствующих конфигурациям $\text{Sm}^{3+}-\text{S}^{2-}-\text{Eu}^{+}$:

$$\int_V \psi_{f_1}(r_{i_1})\psi_d(r_{i_2})\psi_{f_2}(r_{i_3})\psi_p(r_{i_4})\psi_p(r_{i_5})H^{\wedge}\psi_{f_1}^*(r_{j_1})\psi_d^*(r_{j_2})\psi_{f_2}^*(r_{j_3})\psi_p^*(r_{j_4})\psi_p^*(r_{j_5}) dV,$$

где i_1, \dots, i_5 и j_1, \dots, j_5 независимо друг от друга и не повторяясь пробегают значения от 1 до 5. Область интегрирования данных интегралов путём перехода к эллиптическим координатам и замены переменных сводится к единичному кубу и дальнейший расчёт выполнен в рамках метода параллелепедальных сеток Коробова:

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^1 f(x_1, x_2, \dots, x_S) dx_1 dx_2 \dots dx_S = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f\left(\left\{\frac{a_1 k}{P}\right\}, \left\{\frac{a_2 k}{P}\right\}, \dots, \left\{\frac{a_S k}{P}\right\}\right) + R,$$

где P — целое ($P > N \gg 1$), a_ν — специальным образом выбранные целые взаимно простые с P числа (оптимальные коэффициенты), а $\{a_1 k/P\}$ — дробная доля $a_1 k/P$. Для оптимальных коэффициентов a_ν достигаются лучшие из возможных оценок остаточного члена R , чем и обеспечиваются оптимальные свойства квадратурных формул с параллелепипедальными сетками.

Установлено, что при заполнении f -оболочки менее чем наполовину меньшей энергии соответствует параллельная ориентация спинов и эффективный обменный интеграл оказывается положительным. Высокая концентрация электронов на гетерогранице приводит к интенсивному косвенному обмену их с магнитными ионами и установлению более высокого ферромагнитного порядка в приповерхностном слое и, как следствие этого, понижению дна зоны проводимости магнитоактивного материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 07-01-96415-Р-центр-а.

Представленная выше версия доклада является *ознакомительной*.

Версию доклада, предназначенную *для печати*, можно найти в факультетском сборнике трудов конференции. Электронные материалы конференции публикуются по адресу http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/