

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И МАГНИТООПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ СИЛИЦИДОВ Fe_5Si_3 И Fe_3Si МЕТОДОМ СПЕКТРАЛЬНОЙ МАГНИТОЭЛЛИПСОМЕТРИИ

С. А. Лященко^{a,b}, З. И. Попов^{a,b}, С. Н. Варнаков^{a,b}, Е. А. Попов^a,
М. С. Моложеев^{b,f}, И. А. Яковлев^{a,b}, А. А. Кузубов^{b,c}, С. Г. Овчинников^{a,b,c},
Т. С. Шамирзаев^d, А. В. Латышев^d, А. А. Саранин^e*

^a Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М. Ф. Решетнева
660014, Красноярск, Россия

^b Институт физики им. Л. В. Куренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

^c Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

^d Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

^e Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук
690041, Владивосток, Россия

^f Дальневосточный государственный университет путей сообщения
680021, Хабаровск, Россия

Поступила в редакцию 27 октября 2014 г.

Исследованы оптические, магнитооптические и магнитные свойства поликристаллической $Fe_5Si_3/SiO_2/Si(100)$ и эпитаксиальной $Fe_3Si/Si(111)$ пленок методом спектральной магнитоэллипсометрии. Методом многоугловой спектральной эллипсометрии измерена дисперсия комплексного коэффициента преломления пленки Fe_5Si_3 в диапазоне 250–1000 нм. Определены дисперсии комплексных магнитооптических параметров Фохта Q для Fe_5Si_3 и Fe_3Si в диапазоне 1.6–4.9 эВ. Спектральная зависимость магнитного кругового дихроизма для обоих силицидов выявила наличие серий резонансных пиков. Энергии обнаруженных пиков соответствуют межзонным переходам электронов для рассчитанных из первых принципов спин-поляризованных плотностей электронных состояний (DOS) объемных кристаллов Fe_5Si_3 и Fe_3Si .

DOI: 10.7868/S004445101505016X

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что многослойные структуры ферромагнетик/полупроводник могут использоваться для создания спинового транзистора, в котором, управляя состояниями намагниченности ферромагнитных слоев, можно изменять значение спинового тока и, тем самым, создать токовый вентиль. Обычно высокий коэффициент спиновой инжекции в таких устройствах проявляется при наличии резкой

границы между ферромагнетиком и полупроводником [1], которую достаточно сложно реализовать технологически. Традиционным решением проблемы создания резкого интерфейса является эпитаксиальный рост тонких пленок ферромагнетика на полупроводнике. В роли полупроводникового слоя в устройствах спинтроники хорошо зарекомендовал себя кремний в связи с малой величиной его спин-орбитального взаимодействия, большим периодом спиновой релаксации и преобладанием кремниевых технологий в современной микроэлектронике [2]. В роли ферромагнитного слоя традиционно

*E-mail: lsa@iph.krasn.ru

используются $3d$ -металлы [3], в частности, железо. Большое количество работ посвящено исследованию транспортных, структурных и магнитных свойств систем Fe/Si, в том числе богатых железом ферромагнитных силицидов Fe_5Si_3 и Fe_3Si .

Силицид Fe_3Si обладает высоким коэффициентом спиновой поляризации электронов [4, 5] и может быть выращен эпитаксиально на монокристалле Si(111) [6, 7]. В свою очередь, силицид Fe_5Si_3 , имплантированный в кремний, демонстрирует эффект гигантского магнитосопротивления — 2400% [1], но в объемном состоянии при комнатной температуре термодинамически неустойчив [8].

В настоящее время остается малоизученной электронная структура пленочных силицидов Fe_5Si_3 и Fe_3Si , которая формирует их оптические и магнитооптические свойства. Изучение электронной структуры и спектральных оптических свойств Fe_3Si подробно проводилось только в двух работах [6, 9]. Анализ же спектральных магнитооптических свойств Fe_5Si_3 и Fe_3Si в литературе не приводится, за исключением измерений вращения Фарадея в поликристаллической пленке Fe_5Si_3 [10].

Обычно для анализа электронных и магнитных свойств применяется оптическая спектроскопия, СКВИД-магнитометрия, ядерный магнитный резонанс. При этом такой комплекс измерений может занимать много времени и неудобен для тонкопленочных образцов с развитой поверхностью или малым количеством ферромагнитного материала. Данная работа показывает, что измерения спектральной дисперсии тензора диэлектрической проницаемости с помощью совмещенной техники спектральной эллипсометрии и магнитооптического эффекта Керра позволяют в едином цикле измерений получать информацию об электронных свойствах структуры ферромагнетик/полупроводник.

2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эпитаксиальная пленка Fe_3Si получена методом соосаждения Fe и Si в сверхвысоком вакууме на поверхность Si(111) 7×7 на модернизированной установке молекулярно-лучевой эпитаксии «Ангара» [11]. Метод подготовки поверхности подложки и получения данной структуры подробно описан в работе [7]. Интегральная толщина слоя Fe_3Si по данным спектральной эллипсометрии составила около 27 нм. В работе [6] также приведены результаты определения спектральной зависимости комплексного коэффициента преломления N для Fe_3Si по данным многоугловой спектральной эллипсометрии.

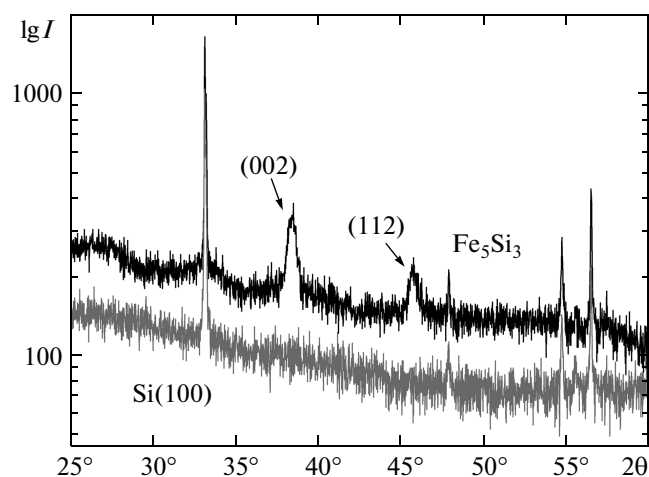


Рис. 1. Рентгенограмма образца $\text{Fe}_5\text{Si}_3/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$

Поликристаллическая пленка Fe_5Si_3 также была получена на модернизированной установке молекулярно-лучевой эпитаксии «Ангара» [11] методом поочередного осаждения субнанометровых слоев Fe и Si на поверхность $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ при температуре подложки 50°C в сверхвысоком вакууме. Слой SiO_2 толщиной около 13.6 нм был сформирован методом термического окисления подложки Si(100) в среде $\text{O}_2 + \text{HCl}$ при температуре 1000°C . После окисления подложка обезжиривалась по методу, предложенному в работе [7], помещалась в сверхвысокий вакуум и отжигалась при температуре 250°C .

Поочередное осаждение 36 слоев Fe и Si проводилось термическим испарением из эффузионных ячеек Кнудсена. Толщина для каждого слоя железа и кремния составляла 0.5–0.8 нм. Суммарная толщина структуры Fe–Si составила около 27 нм в пересчете на плотность массивных чистых материалов или 10.7 ± 0.6 мкг/см² для Fe и 3.1 ± 0.1 мкг/см² для Si. После осаждения образец отжигался в сверхвысоком вакууме при температуре 450°C в течение 30 мин. Для идентификации кристаллической структуры полученного слоя проводился рентгеноструктурный анализ образца на порошковом дифрактометре D8 ADVANCE ($K_{\alpha 1,2}$ -излучение Cu, Ni-фильтр) с линейным детектором VANTEC, который показал наличие фазы Fe_5Si_3 (рис. 1). Присутствие других кристаллических фаз не установлено по причине либо их незначительной объемной доли относительно Fe_5Si_3 , либо нахождения в высокодисперсном состоянии с размерами кристаллитов менее 2–3 нм. Поликристаллическая пленка Fe_5Si_3 имеет преимущественную ориентацию кристаллитов в плоскостях (002) и (112).

Для анализа электронной структуры ферромагнетика по данным спектральных магнитооптических измерений необходима информация обо всех элементах тензора диэлектрической проницаемости материала ε . В случае оптически изотропного ферромагнетика (со слабым гиромангнитным вкладом) диагональные компоненты ε определяются через комплексный коэффициент преломления материала $N = n + ik$ в намагниченном состоянии как $N^2 = \varepsilon_m$, а недиагональные компоненты ε характеризуются комплексным магнитооптическим параметром Фохта $Q = Q_1 + iQ_2$:

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_m & -i\varepsilon_m Q & 0 \\ i\varepsilon_m Q & \varepsilon_m & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_m \end{bmatrix}. \quad (1)$$

При воздействии внешнего магнитного поля на ферромагнитный материал у него изменяются поляризационные свойства ионов по отношению к правили лево-циркулярно поляризованной внешней электромагнитной волне, что, в свою очередь, приводит к различным коэффициентам преломления для двух состояний линейной поляризации света при его прохождении через образец.

Мнимая компонента комплексной величины эффекта Фарадея, или магнитный круговой дихроизм (МКД), который удобен для анализа спин-поляризованных межзонных переходов электронов, равен

$$\psi_F = \frac{\pi}{\lambda} \text{Im}(NQ), \quad (2)$$

где λ — длина волны падающего излучения [12, 13].

Измерение спектральной зависимости комплексного магнитооптического параметра Q в данной работе проводилось на быстродействующем спектральном эллипсометре Эллипс-1891 с приложением к образцу внешнего магнитного поля. В экспериментальной установке была реализована схема измерения экваториального магнитооптического эффекта Керра [14], где измеряемой величиной является относительное изменение интенсивности отраженного от образца линейно-поляризованного света после прохождения анализатора эллипсометра [15]:

$$\frac{\delta I}{I}(t_1, t_2) = 2 \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}}, \quad (3)$$

где I_{\uparrow} и I_{\downarrow} — интенсивности падающего на фотоприемник излучения при перемагничивании образца, а t_1 и t_2 — углы поворота поляризатора и анализатора эллипсометра относительно плоскости падения света. Величина $\delta I/I$ характеризует изменение отражающих свойств поверхности ферромагнетика при его перемагничивании.

В работе [16] был предложен алгоритм расчета Q по результатам спектральных измерений величины $\delta I/I$ при различных положениях поляризатора и анализатора. Данный алгоритм был разработан для модели полубесконечной ферромагнитной среды или для поглощающей пленки в случае, когда свет, отраженный от лежащих ниже слоев, не достигает фотоприемника. При наличии отражения от нижних немагнитных слоев в структуре, помимо эффекта Керра, в магнитооптическом сигнале $\delta I/I$ появляется вклад и эффекта Фарадея, который вносит изменения в итоговый рассчитанный параметр Фохта Q преимущественно в низкоэнергетической области спектра. Такой вклад оказывает влияние на амплитуду Q . При этом основные пики в МКД по энергии не смещаются, а только изменяют свою форму тем сильнее, чем в более низких энергиях были обнаружены.

Согласно работе [16] расчет Q проводится по формуле

$$Q = i \left(B_1 - i \frac{B_2 - B_1 B_6}{\sqrt{B_5 - B_6^2}} \right) \times \\ \times [\sin(2\varphi_0) - \sin(2\varphi_1)] \sin(\varphi_0 + \varphi_1) \cos(\varphi_1) \times \\ \times \{ \cos(\beta) \sin(2\varphi_0) \sin^2(\varphi_1) \}^{-1}, \quad (4)$$

где φ_0 и φ_1 — углы падения и преломления света, β — угол намагниченности образца относительно плоскости падения света, а B_{1-6} — вещественные коэффициенты, которые находятся из измерений $\delta I/I$. Угол намагниченности β определяется как

$$\beta = \Re \left\{ \arctg \left(- \frac{(B_4 - B_3 B_6 + i B_3 \sqrt{B_5 - B_6^2}) \cos(\varphi_0 - \varphi_1)}{2 \cos(\varphi_1) (B_2 - B_1 B_6 + i B_1 \sqrt{B_5 - B_6^2})} \right) \right\}. \quad (5)$$

Для расчета n и k ферромагнетика через закон преломления Снелла авторы работы [16] предлагают использовать только коэффициенты B_5 и B_6 :

$$\varphi_1 = -i \ln \left\{ \left(\frac{-e^{2i\varphi_0} (1 + B_5 + 2B_6 \cos(2\varphi_0) + 2\sqrt{B_5 - B_6^2} \sin(2\varphi_0))}{1 + 2B_6 e^{2i\varphi_0} + B_5 e^{4i\varphi_0}} \right)^{1/2} \right\}. \quad (6)$$

Однако в представленном алгоритме из работы [16] имеются трудности с одновременным точным вычислением всех шести промежуточных коэффициентов B_{1-6} методом наименьших квадратов, содержащихся в системе уравнений с $\delta I/I$. При этом измеренные по формуле (3) значения $\delta I/I$ входят в выражение

$$\frac{\delta I}{I} = 4 \frac{B_1 g_1 + B_2 g_2 + B_3 g_3 + B_4 g_4}{B_5 g_5 + 2B_6 g_4 + g_3}, \quad (7)$$

где $g_i = g_i(t_1, t_2)$ — функции, зависящие от углов поворота поляризатора t_1 и анализатора t_2 . Трудности одновременного вычисления всех B_{1-6} вызваны большой погрешностью измерений $\delta I/I$ при длительном накоплении полезного сигнала.

Для точного вычисления коэффициентов B_{1-6} и значительного уменьшения времени магнитооптических измерений в данной работе мы с помощью выражения (6) провели независимый расчет коэффициентов B_5 и B_6 , где n и k были определены методом многоугольной эллипсометрии. Затем, используя найденные коэффициенты B_5 и B_6 и систему уравнений на основе (7), рассчитали коэффициенты B_{1-4} . Далее вычислялся комплексный параметр Q по найденным B_{1-6} на каждой длине волны. При поиске коэффициентов B_{1-6} был использован метод симплекс-оптимизации Нелдера – Мида [17]. Проход по спектру осуществлялся в обе стороны от точки с $\lambda = 555$ нм, где достигается максимум отношения сигнал/шум.

3. АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ПОГРЕШНОСТЕЙ

Для уменьшения погрешности экспериментальных измерений $\delta I/I$ по формуле (3) измерение каждой интенсивности I_\uparrow и I_\downarrow проводилось не менее десяти раз с последующим вычислением средних значений $\langle I_\uparrow \rangle$, $\langle I_\downarrow \rangle$, а также среднеквадратических отклонений ΔI_\uparrow и ΔI_\downarrow по выборке. При этом среднее значение итогового магнитооптического сигнала вычислялось на основе формулы (3):

$$\left\langle \frac{\delta I}{I} \right\rangle = 2 \frac{\langle I_\uparrow \rangle - \langle I_\downarrow \rangle}{\langle I_\uparrow \rangle + \langle I_\downarrow \rangle}, \quad (8)$$

а его абсолютная ошибка находилась как погрешность косвенных воспроизводимых измерений (закон распространения ошибок) [18]:

$$\Delta \left\langle \frac{\delta I}{I} \right\rangle = \frac{4 \sqrt{(\Delta I_\uparrow \langle I_\downarrow \rangle)^2 + (\Delta I_\downarrow \langle I_\uparrow \rangle)^2}}{(\langle I_\uparrow \rangle + \langle I_\downarrow \rangle)^2}. \quad (9)$$

Поиск отклонений ΔB_5 и ΔB_6 проводился численным расчетом частных производных по погрешностям Δn , Δk , $\Delta \varphi_0$ от разности выражения (6) и формулы для φ_1 из закона преломления Снелла. Для численного дифференцирования коэффициентов B_5 и B_6 , как и для нахождения их средних значений, использовался метод симплекс-оптимизации Нелдера – Мида [17].

Наибольшие методические трудности были связаны с вычислением погрешностей ΔB_{1-4} , так как расчет самих коэффициентов B_{1-4} основан на решении системы уравнений методом наименьших квадратов. Для решения этой задачи удобно выразить последовательно каждый из коэффициентов B_{1-4} из выражения (7) как функцию от остальных B , измеренной величины $\langle \delta I/I \rangle$ и углов поворота оптических элементов эллипсометра t_1 и t_2 . Полученные таким образом функции для B_{1-4} были продифференцированы по каждому аргументу. С помощью метода расчета ошибки косвенных измерений было получено среднеквадратическое значение ΔB_{1-4} для каждого измеренного $\langle \delta I/I \rangle$. В результате последовательного расчета ΔB_i для всех четырех величин $\langle \delta I/I \rangle$ и проведения геометрического суммирования была найдена итоговая абсолютная погрешность для всех коэффициентов B_{1-4} .

Расчет погрешности для магнитооптического параметра Q проводился по методу поиска ошибки косвенных измерений через численный расчет производных от функции (4) по каждому из ее аргументов. Итоговый поиск погрешности величины МКД проводился также по закону распространения ошибок:

$$\Delta \psi_F = \frac{\pi}{\lambda} \text{Im} \left(\sqrt{(\Delta N Q)^2 + (\Delta Q N)^2} \right), \quad (10)$$

где $\Delta N = \Delta n + i\Delta k$ и $\Delta Q = \Delta Q_1 + i\Delta Q_2$ — соответствующие ошибки для коэффициента преломления ферромагнетика и его магнитооптического параметра Фохта.

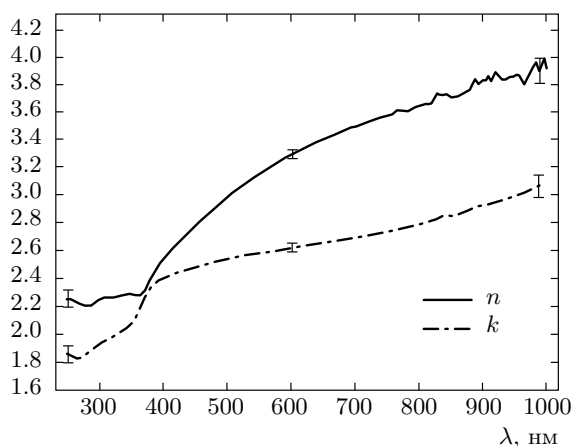


Рис. 2. Измеренная дисперсия комплексного коэффициента преломления для Fe₅Si₃

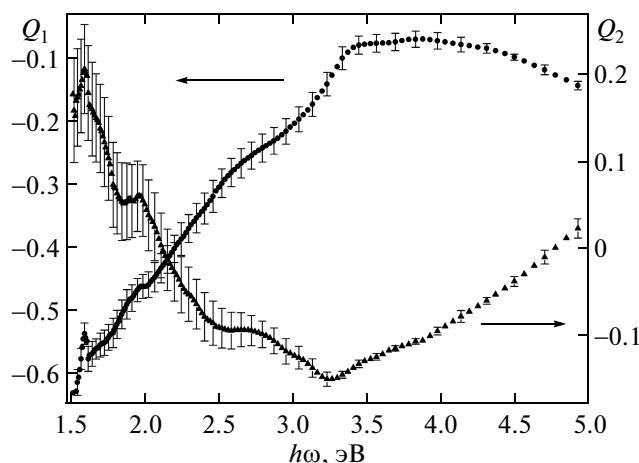


Рис. 3. Рассчитанная дисперсия параметра Q для Fe₅Si₃

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

1. Спектральная зависимость комплексного коэффициента преломления N для Fe₅Si₃ вычислялась по данным многоугловой спектральной эллипсометрии [19]. На рис. 2 представлены найденные по методу [19] из многоугловых эллипсометрических измерений n и k пленки Fe₅Si₃ в диапазоне длин волн 250–1000 нм.

При вычислении N из эллипсометрических измерений для поликристаллического Fe₅Si₃ использована оптическая модель однородного изотропного слоя неизвестной толщины на поверхности слоя SiO₂ (13.6 нм) с изотропной подложкой Si. Спектральные зависимости N для SiO₂ и Si взяты из работ [20, 21].

На образце Fe₅Si₃/SiO₂/Si(100) были проведены *ex situ* спектральные магнитоэллипсометрические измерения параметров $\delta I/I$ при комнатной температуре в двух положениях анализатора эллипсометра под углами 0° и 45° к плоскости падения света. Поляризатор эллипсометра был установлен в положении 45°. Применение призмы Волластона с двумя фотоприемниками в качестве анализатора позволило при двух циклах спектральных измерений получить четыре независимые величины $\delta I/I$ при следующих комбинациях (t_1, t_2) : (45°; 0°), (45°; 90°), (45°; 45°) и (45°; 135°). Угол падения света к нормали поверхности образца составлял 70°. Магнитное поле на образце переключалось в диапазоне ± 2 кЭ. На рис. 3 показаны рассчитанные из измеренных $\delta I/I$ и N спектральные зависимости вещественной и мнимой частей магнитооптического параметра Фохта Q для Fe₅Si₃.

Таблица 1. Среднеквадратическое отклонение S для Fe₅Si₃

Кол-во пиков	2	3	4	5	6	7
S	0.0490	0.0416	0.0308	0.0250	0.0239	0.0235

Для обоснования выбора числа подгоночных пиков m в спектре МКД были проведены расчеты с разным числом гауссианов. В табл. 1 показаны значения среднеквадратического отклонения

$$S = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\frac{\langle y_j \rangle - f(x_j)}{\langle y_j \rangle} \right)^2}$$

в зависимости от количества гауссовых кривых m при аппроксимации спектра МКД для Fe₅Si₃, где n — количество экспериментальных точек, $\langle y_j \rangle$ и f_j — соответственно экспериментальное значение МКД и сумма всех гауссовых кривых в точке j . Расчет величины S осуществлялся только для спектрального диапазона экспериментальных данных, который соответствует области подгонки суммой гауссовых кривых. Для количества пиков менее пяти добавление каждого следующего гауссиана резко снижало отклонение S . Из табл. 1 видно, что с ростом количества гауссовых пиков m уменьшается величина S . Но при аппроксимации экспериментальной зависимости пятью и более пиками дальнейшие изменения S незначительны. Рисунок 4а демонстрирует вычисленную по формуле (2) энергетическую зависимость МКД с разложением кривой на

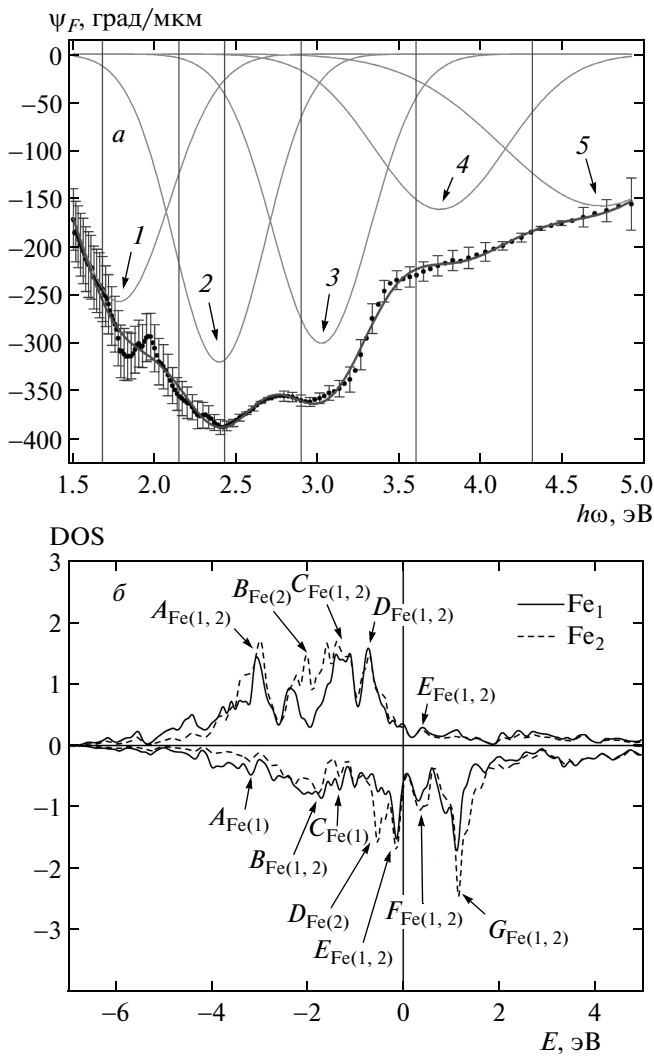


Рис. 4. а) Спектр МКД для Fe_5Si_3 с разложением на серию гауссовых кривых со следующими значениями полуширины: 1 — 1.78 ± 0.36 эВ, 2 — 2.40 ± 0.33 эВ, 3 — 3.02 ± 0.35 эВ, 4 — 3.75 ± 0.47 эВ, 5 — 4.74 ± 0.71 эВ. Вертикальными линиями показаны вероятные межзонные переходы электронов по DOS; б) теоретический расчет плотности электронных состояний для Fe_5Si_3

серию из пяти гауссианов. Отдельные гауссовы пики показаны сплошными тонкими линиями, их сумма — сплошной толстой линией, усредненные экспериментальные данные показаны точками. Можно отметить совпадение кривой суммы гауссианов с данными МКД в пределах экспериментальной погрешности.

Энергии вероятных межзонных переходов показаны вертикальными линиями.

Для выяснения природы найденных магнито-

оптических максимумов с помощью квантово-химического моделирования в программном пакете VASP 5.3 [22–24] в рамках метода функционала плотности (DFT) с использованием базиса плоских волн и формализма PAW [25, 26] был выполнен спин-поляризованный расчет парциальных плотностей электронных состояний (DOS) для Fe_5Si_3 (рис. 4б). Вычисления проводились в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) — обменно-корреляционного функционала PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof). При оптимизации геометрии элементарной ячейки Fe_5Si_3 $P6_3/mc$ первая зона Бриллюэна обратного пространства автоматически разбивалась на сетку $6 \times 6 \times 6$, выбранную по схеме Монхорста–Пака [27]. Энергия обрезания плоских волн E_{cutoff} в расчетах была равна 293 эВ. При моделировании исследуемой структуры оптимизация геометрии проводилась до значения максимальных сил, действующих на атомы, равного 0.01 эВ/Å.

Структура силицида Fe_5Si_3 характеризуется наличием двух неэквивалентных состояний атомов Fe в кристаллической решетке. Анализ вероятных межзонных переходов по DOS в энергетических состояниях атомов железа для Fe_5Si_3 показывает, что найденные максимумы на кривой эллиптичности Фарадея вызваны следующими переходами: 1) $D_{\text{Fe}(2)} \downarrow \rightarrow G_{\text{Fe}(2)} \downarrow$ (1.68 эВ); 2) $B_{\text{Fe}(1,2)} \downarrow \rightarrow F_{\text{Fe}(1,2)} \downarrow$ (2.15 эВ) и $B_{\text{Fe}(2)} \uparrow \rightarrow E_{\text{Fe}(2)} \uparrow$ (2.42 эВ); 3) $B_{\text{Fe}(1,2)} \downarrow \rightarrow G_{\text{Fe}(1,2)} \downarrow$ (2.9 эВ); 4) $A_{\text{Fe}(1)} \downarrow \rightarrow F_{\text{Fe}(1)} \downarrow$ (3.6 эВ). Пик 5 скорее всего вызван суммой переходов $A_{\text{Fe}(1)} \downarrow \rightarrow G_{\text{Fe}(1)} \downarrow$ (4.3 эВ) и переходов с более высокой энергией из DOS, расположенных левее $A_{\text{Fe}(1)} \downarrow$, в $G_{\text{Fe}(1)} \downarrow$.

Наилучшее соответствие максимумов найденных пиков по МКД с межзонными переходами электронов наблюдается в видимой области спектра от 2 до 4.5 эВ с наибольшим соотношением сигнал/шум. Полученные данные позволяют качественно определить природу пиков на спектре МКД.

2. Для эпитаксиальной структуры $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{Si}(111)$ были проведены *ex situ* спектральные магнитоэллипсометрические измерения параметров $\delta I/I$ при комнатной температуре в двух положениях анализатора эллипсометра под углами 0° и 45° к плоскости падения света. Поляризатор эллипсометра был установлен в положении 45° . Угол падения света к нормали поверхности образца составлял 70° . Магнитное поле на образце переключалось в диапазоне ± 2 кЭ.

На рис. 5 представлены рассчитанные из измеренных $\delta I/I$ и N спектральные зависимости вещественной и мнимой частей магнитооптического параметра Фохта Q для Fe_3Si . В табл. 2 приведены значения среднеквадратичного отклонения S в зави-

Таблица 2. Среднеквадратическое отклонение S для Fe_3Si

Кол-во пиков	2	3	4	5	6	7
S	0.2118	0.0982	0.0958	0.0471	0.0457	0.0416

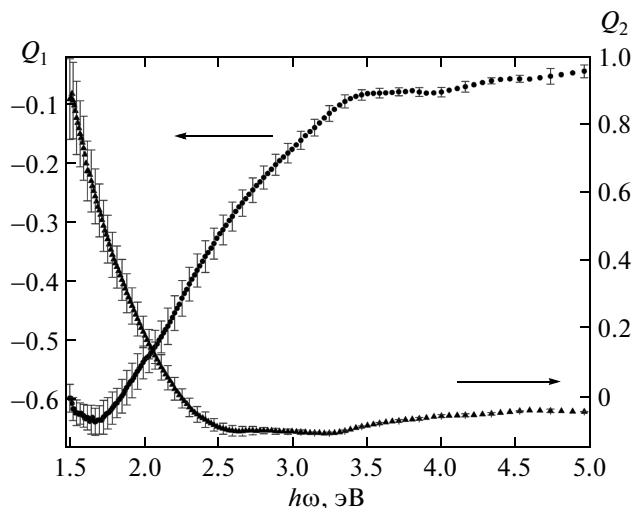


Рис. 5. Рассчитанная дисперсия параметра Q для Fe_3Si

симости от количества гауссовых пиков при аппроксимации МКД для Fe_3Si . Видно, что с ростом количества гауссовых пиков величина S уменьшается, но, как и для образца Fe_5Si_3 , использование более пяти пиков приводит к малым изменениям S .

На рис. 6 представлена вычисленная по формуле (2) энергетическая зависимость эллиптичности Фарадея с разложением кривой на серию гауссианов. Как и для МКД от Fe_5Si_3 , отдельные гауссовы пики показаны сплошными тонкими линиями, их сумма — сплошной жирной линией, усредненные экспериментальные данные показаны точками.

Согласно рассчитанной спин-поляризованной DOS для Fe_3Si в работе [6] выявленные пики образованы следующими вероятными межзонными энергетическими переходами электронов: 1) $E_{Fe(2)} \downarrow \rightarrow I_{Fe(2)} \downarrow$ (1.96 эВ); 3) $D_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow H_{Fe(1,2)} \downarrow$ (2.68 эВ) и $D_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow I_{Fe(1,2)} \downarrow$ (2.93 эВ); 4) $B_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow H_{Fe(1,2)} \downarrow$ (3.74 эВ) и $B_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow I_{Fe(1,2)} \downarrow$ (3.99 эВ); 5) $A_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow H_{Fe(1,2)} \downarrow$ (4.60 эВ) и $A_{Fe(1,2)} \downarrow \rightarrow I_{Fe(1,2)} \downarrow$ (4.96 эВ). Пик 2 вероятно является результатом переходов электронов с не обозначенных в работе [6] уровней, лежащих

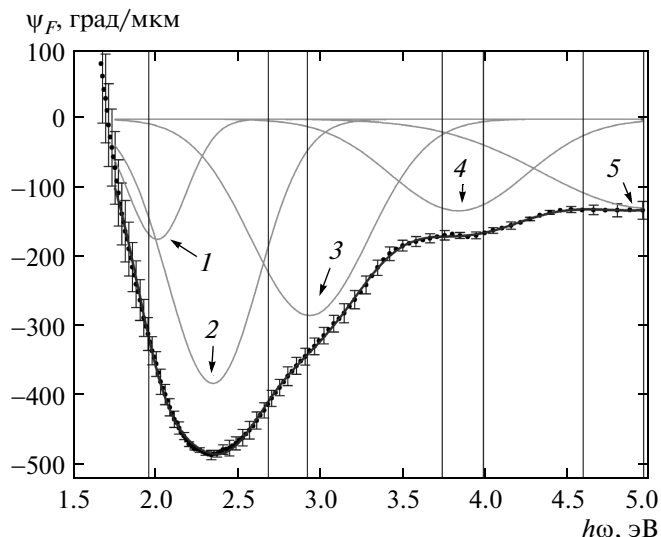


Рис. 6. Спектр МКД для Fe_3Si с разложением на серию гауссианов со следующими значениями полуширины: 1 — 2.01 ± 0.21 эВ, 2 — 2.35 ± 0.33 эВ, 3 — 2.94 ± 0.42 эВ, 4 — 3.84 ± 0.48 эВ, 5 — 4.99 ± 0.74 эВ. Вертикальными линиями показаны вероятные межзонные переходы электронов для Fe_3Si по данным DOS из работы [6]

левее пика плотности состояний $B_{Fe(2)} \uparrow$, в $D_{Fe(2)} \uparrow$.

Полученные данные для Fe_3Si позволяют качественно понять природу пиков на спектре МКД, как и для пленки Fe_5Si_3 . Однако эпитаксиальная пленка Fe_3Si демонстрирует более точное соответствие пиков МКД с энергиями межзонных переходов, чем поликристаллическая пленка Fe_5Si_3 , что может являться следствием влияния меньшей доли поверхностных атомов в эпитаксиальном силициде Fe_3Si на спиновую поляризацию по сравнению с поликристаллическим Fe_5Si_3 .

3. С помощью возможностей метода магнитоэллипсометрии для исследования магнитных параметров непрозрачных ферромагнитных структур [14] для исследуемых образцов $Fe_3Si/Si(111)$ и $Fe_5Si_3/SiO_2/Si(100)$ были измерены зависимости эллипсометрического параметра Ψ от приложенного к образцу внешнего магнитного поля в диапазоне ± 200 Э (рис. 7) на длине волны 466 нм (2.66 эВ).

Коэрцитивная сила H_c пленки Fe_3Si составила 49 ± 12 Э, а поле насыщения порядка 100 Э. Измеренная величина коэрцитивной силы для Fe_3Si несколько превышает значения, полученные другими авторами [7, 28], в том числе на подложках GaAs(001) и Ge(111) [29, 30]. Коэрцитивная сила пленки Fe_5Si_3 близка к измеренным значениям для Fe_3Si , но в два

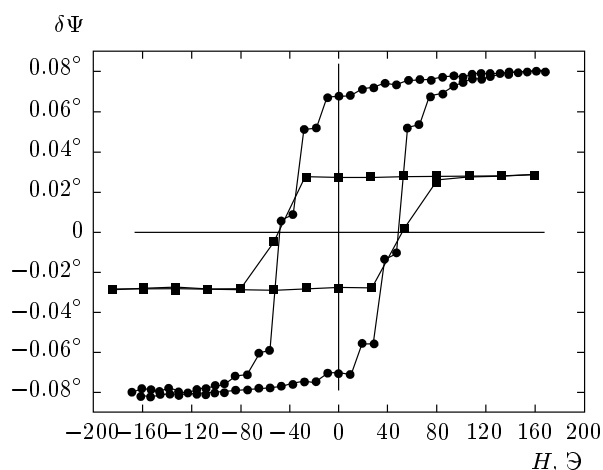


Рис. 7. Петли перемагничивания от $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{Si}(111)$ (■) и $\text{Fe}_5\text{Si}_3/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ (●)

раза меньше значения, полученного для поликристаллической пленки Fe_5Si_3 толщиной 65 нм из работы [10] и несколько превышает H_c для нанонитей Fe_5Si_3 при комнатной температуре [31].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены результаты одновременного анализа магнитных, а также спектральных оптических и магнитооптических свойств тонкопленочных силицидов Fe_5Si_3 и Fe_3Si методом спектральной магнитоэллипсометрии. Применение алгоритма [19] для расчета оптических постоянных исследуемых структур позволило сократить время проведения и увеличить точность магнитооптических измерений. Мы показали, что измеренные при различных положениях анализатора эллипсометра магнитооптические сигналы могут быть пересчитаны в спектральные зависимости магнитооптического параметра Фохта и магнитного кругового дихроизма. На спектральных зависимостях магнитного кругового дихроизма в диапазоне 1.6–4.9 эВ для силицидов Fe_5Si_3 и Fe_3Si наблюдаются серии пиков, которые соответствуют различным межзонным переходам электронов. Сравнение энергий обнаруженных резонансных пиков на МКД с результатами расчетов *ab initio* плотности электронных состояний выявило более высокое соответствие энергий пиков и межзонных переходов электронов для эпитаксиальной пленки Fe_3Si , что является следствием влияния большой доли поверхностных атомов в поликристаллической пленке силицида Fe_5Si_3 на спиновую поляризацию электронов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Государственное задание № 16.663.2014К, Соглашение № 14.604.21.0002 (RFMEFI60414X0002) и Договор 02.G25.31.0043), в рамках программы поддержки ведущих научных школ (проект НШ-2886.2014.2) и РФФИ (гранты №№ 13-02-01265, 14-02-31309).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. C. Srivastava and J. K. Tripathi, J. Phys. D: Appl. Phys. **39**, 1465 (2006).
2. I. Appelbaum, B. Huang, and D. J. Monsma, Nature **447**, 295 (2007).
3. А. Б. Грановский, И. В. Быкова, Е. А. Ганьшина, В. С. Гущин, М. Инус, Ю. Е. Калинин, А. А. Козлов, А. Н. Юрасов, ЖЭТФ **123**, 1256 (2003).
4. H. Haiji, K. Okada, T. Hiratani et al., J. Magn. Magn. Mat. **160**, 109 (1996).
5. Y. Maeda, T. Ikeda, T. Ichikawa et al., Phys. Proc. **11**, 200 (2011).
6. И. А. Тарасов, З. И. Попов, С. Н. Варнаков, М. С. Молокеев, А. С. Федоров, И. А. Яковлев, Д. А. Федоров, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **99**, 651 (2014).
7. И. А. Яковлев, С. Н. Варнаков, Б. А. Беляев, С. М. Жарков, М. С. Молокеев, И. А. Тарасов, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **99**, 611 (2014).
8. K. S. K. Varadwaj, K. Seo, J. In et al., J. Amer. Chem. Soc. **129**, 8594 (2007).
9. S. Naderizadeh, S. M. Elahi, M. R. Abolhassani et al., Europ. Phys. J. B **85**, 144 (2012).
10. E. Sawatzky, Magnetism, IEEE Trans. **7**, 374 (1971).
11. S. N. Varnakov, A. A. Lipeshev, S. G. Ovchinnikov et al., Instr. Exp. Tech. **47**, 839 (2004).
12. Г. С. Кринчик, *Физика магнитных явлений*, Изд-во МГУ, Москва (1976).
13. Е. А. Ганьшина, А. А. Богородицкий, Р. Ю. Кумаритова и др., ФТТ **43**, 1061 (2001).
14. S. A. Lyashchenko, I. A. Tarasov, S. N. Varnakov et al., Tech. Phys. **58**, 1529 (2013).
15. G. Neuber, R. Rauer, J. Kunze et al., Thin Solid Films **455–456**, 39 (2004).

16. R. Rauer, G. Neuber, J. Kunze et al., *Rev. Sci. Instr.* **76**, 023910 (2005).
17. J. A. Nelder and R. Mead, *Computer J.* **7**, 308 (1965).
18. H. H. Ku, *J. Research Nat. Bureau Standards, Sec. C: Eng. Instr.* **70C**, 263 (1966).
19. F. K. Urban III, D. Barton, and T. Tiwald, *Thin Solid Films* **518**, 1411 (2009).
20. G. Ghosh, *Opt. Comm.* **163**, 95 (1999).
21. D. E. Aspnes and A. A. Studna, *Phys. Rev. B* **27**, 985 (1983).
22. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
23. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **49**, 14251 (1994).
24. G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
25. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
26. G. Kresse and G. D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
27. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
28. K. Hamaya, K. Ueda, Y. Kishi et al., *Appl. Phys. Lett.* **93**, 132117 (2008).
29. A. Ionescu, C. A. F. Vaz, T. Trypiniotis et al., *Phys. Rev. B* **71**, 094401 (2005).
30. Y. Ando, K. Hamaya, K. Kasahara et al., *J. Appl. Phys.* **105**, 07B102 (2009).
31. K. Seo, S. Lee, Y. Jo et al., *J. Phys. Chem. C* **113**, 6902 (2009).