

ЭНЕРГИЯ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В РАЗБАВЛЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ $Zn_{1-x}Fe_xS$

Белько И.В., студент гр.942791

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники¹
г. Минск, Республика Беларусь*

Баранова М.С. – научный сотрудник НИЧ БГУИР

Аннотация. В данном тезисе описываются исследования магнитных свойств в разбавленном магнитном полупроводнике $Zn_{1-x}Fe_xS$. Описываются полученные значения постоянных решетки, межатомных расстояний, индекса искажения, дисперсии угла связи, энергии магнитокристаллической анизотропии, магнитного момента

Энергия магнитокристаллической анизотропии (англ. *Magnetocrystalline Anisotropy Energy*, E_{MAE}) — это внутренняя энергия намагничивания, которая отражает симметрию кристалла. Возникновение магнитокристаллической анизотропии в кристалле определяет наличие анизотропных взаимодействий, а именно спин-орбитального взаимодействия [1]. Данное взаимодействие напрямую влияет на магнитную анизотропию и зависит от симметрии кристалла.

Актуальность исследования магнитных свойств полупроводниковых материалов связана с развитием новых технологических направлений и востребованностью разработок новых функциональных устройств, работающих на спиновых эффектах.

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) — это класс материалов, в котором наблюдался высокотемпературный ферромагнетизм [2].

Целью настоящей работы является установление зависимости магнитных свойств РМП $Zn_{1-x}Fe_xS$ от структурных характеристик.

Расчеты структурных и магнитных свойств кристалла ZnS с примесью переходного металла, а именно Fe, проводились посредством *ab initio* моделирования. Визуализация полученной конфигурации суперячейки для моделирования проводилась в программе VESTA [3]. Выполнена релаксация суперячейки ZnS (72 атома) с внедренными атомами железа в программном пакете VASP [4]. Исследуя полученную структуру выявлено, постоянные решетки равны $a=b=5,557 \text{ \AA}$, и $c=6,077 \text{ \AA}$ соответственно.

Кристалл ZnS характеризуется тетраэдрическими комплексами, которые состоят из центрального атома Zn и атомов лигандов S (рисунок 1). Атом Fe замещает атом Zn в узлах кристаллической решетки и вносит искажения. Установлено, что в тетраэдрэдрическом комплексе с примесью переходного металла Fe в центре и лигандами S межатомное расстояние составляет $2,254 \text{ \AA}$. Вдоль кристаллографического направления c обнаружено увеличение длины связи на $0,084 \text{ \AA}$.

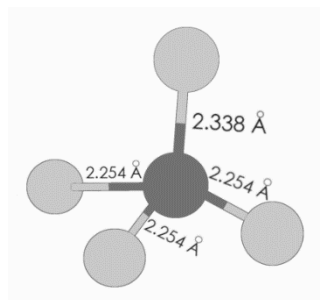


Рисунок 1 – Тетраэдрический комплекс с переходным металлом Fe

Индекс искажения (D) рассчитывается по следующей формуле [5]:

$$D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|l_i - l_{cp}|}{l_{cp}}, \quad (1)$$

где n – количество связей;

l_i – расстояние от центрального атома до каждого координационного атома, Å ;

– средняя длина связей, Å .

Индекс искажения для этой конфигурации равен $0,0138$, в то время как для не подверженных искажению частей суперячейки он равен $0,00122$.

Дисперсия угла связи (σ) рассчитывается по следующей формуле [6]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\phi_i - 108^{\circ}28')^2}, \quad (2)$$

где m – количество углов связей;

– i -тый угол связи, град.

Дисперсия угла связи для кластера с переходным металлом равна $4,688^{\circ}$, что намного превышает стандартный показатель по ячейке равный $0,28^{\circ}$.

Энергия магнитокристаллической анизотропии E_{MAE} рассчитывается как разница значений энергии, необходимых для намагничивания кристалла в трудном (E_{10011}) и легком (E_{11001}) направлениях [7]. Для учета спин-орбитального взаимодействия при расчете E_{MAE} в программном пакете VASP подключается функция LSORBIT. Установлено, что для суперячейки ZnS с примесью переходного металла (Fe) энергия магнитокристаллической анизотропии равна $E_{MAE} = 0,23 \text{ мэВ}$, а магнитный момент – $m = 3,91 \mu_B$.

Получена плотность электронных состояний (ПЭС) для суперячейки ZnS с примесью Fe (рисунок 2).

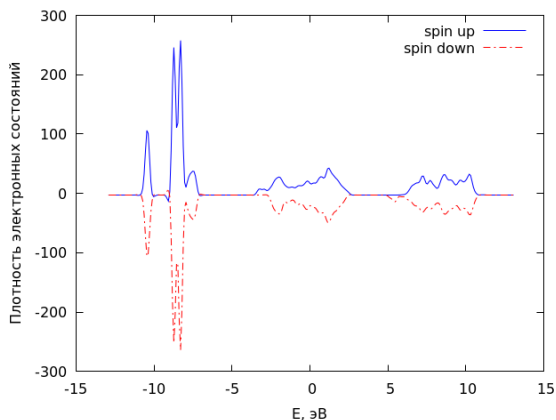


Рисунок 2 – Плотность электронных состояний для суперячейки ZnS с примесью Fe

Уровень Ферми смещен в ноль по шкале энергии. Глубокие уровни, с хорошо выраженными пиками, находящиеся в пределах от -13 эВ до -4 эВ принадлежат атомам Zn. Верхняя кривая, которая отображает ПЭС для электронов со спином вверх, симметрична ПЭС электронов со спином вниз. Следовательно, атомы Zn не вносят вклад в результирующий магнитный момент.

ПЭС расположенная между -5 эВ и 5 эВ соответствует электронным состояниям атомов Fe и S. В данной области симметричность кривых нарушена разрешенными состояниями, которые заселены электронами со спином вниз, а также разрешенными состояниями в области выше уровня Ферми, то есть свободными разрешенными состояниями для электронов со спином вниз, следовательно формирование магнитного момента происходит за счет внедренных атомов Fe и S.

Таким образом, выполнено моделирование из первых принципов кристалла ZnS с примесью Fe. Установлено, что внедрение примеси в кристаллическую решетку вносит существенные искажения, которые выражаются в удлинении одной связи между Fe и S, искажении углов в тетраэдрическом комплексе. Определено, что формирование магнитного момента происходит только за счет Fe.

Список использованных источников:

1. *Magnetic materials. Wide Bandgap Power Semiconductor Packaging* / D. Azuma // 2018. – P. 97-107.
2. *Magnetic Percolation in Diluted Magnetic Semiconductor*// L. Bergqvist [et. al.]// 2004. – P. 93.
3. Momma, K. VESTA: a Three-Dimensional Visualization System for Electronic and Structural Analysis//K. Momma, F. Izumi// National Museum of Nature and Science 2013. – P. 163.
4. Kresse, G. VASP the guide: tutorial / G. Kresse // Austria, University of Vienna. – 2003.
5. *The geometry of polyhedral distortions. Predictive relationships for the phosphate group* / W. H. Baur // 1974. – P. 1195-1215.
6. Robinson K. Quadratic Elongation: A Quantitative Measure of Distortion in Coordination Polyhedra / K. Robinson, G. V. Gibbs, P.H. Ribbe // 1971. – P. 567-570.
- 7 Kabir, A. First principles study of magnetization and magnetic anisotropy energy of small Co-Pt clusters//A. Kabir, E. Ahmed// Department of Physics, University of Dhaka 2020. – P. 8.