

Cr ƏVƏZETMƏSİ İLƏ ZnSe BİRLƏŞMƏSİNİN ELEKTRON VƏ MAQNİT XASSƏLƏRİNİN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN TƏDQIQI

V.N. CƏFƏROVA^{1,2}, N.T. MƏMMƏDOV¹, M.A. MUSAYEV¹

¹Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Az 1010, Bakı, Azadlıq pr. 34

²Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu, Az 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131

e-mail: vcafarova@beu.edu.az

Funksional sıxlıq nəzəriyyəsi və lokal spin sıxlıq yaxınlaşması istifadə olunmaqla Atomistic ToolKit hesablama proqramı vasitəsilə Cr 3d keçid elementi ilə aşqarlanmış ZnSe birləşməsinin elektron və maqnit xassələri tədqiq edilmişdir. Zn(Cr)Se üçün zona quruluşu və hal sıxlığı təməl prinsiplərdən hesablanmış, birləşmənin maqnit xassələri araşdırılmışdır. Tam enerji hesablamalarından ferro-maqnit spin düzülüşünün antiferromaqnit spin düzülüşünə nisbətən daha dayanıqlı olduğu müəyyən olunmuşdur. Birləşmə üçün Küri temperaturu qiymətləndirilmiş və müəyyən olunmuşdur ki, ZnSe:Cr yarım-metal ferromaqnit birləşmədir və spintronikada tətbiq olunmaq üçün perspektiv materialdır.

Açar sözlər: ZnSe:Cr, maqnit momenti, ferromaqnit, yarım-metal.

PACS: 75.50.Pp;68.55.Ln

UOT: 561.18

GİRİŞ

Son illər 3d keçid elementləri ilə aşqarlanmış əksər II-VI qrup binar birləşmələrinin (GaS, GaAs, CdTe, CdS, GaMn, ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe və s.) elektron və maqnit xassələrinin tədqiqi zamanı əldə olunan maraqlı fiziki xassələr (yarım-metal ferromaqnit, yüksək maqnitlənmə, Küri temperaturunun otaq temperaturundan yuxarı olması və s.) tədqiqatçıların böyük marağına səbəb olmuşdur [1-6]. Sato və başqalarının işində [7] müəlliflər göstərmişdir ki, V və Cr atomları ilə aşqarlanmış ZnO, ZnS, ZnSe və ZnTe yarımkeçiriciləri yüksək Küri temperaturu yarım-metal ferromaqnit materiallar sırasına daxildir. Mn atomu ilə aşqarlanmış ZnSe *p*-tip yarımkeçirici birləşmədir və onun valent zonasının yuxarı kənarında *d*-halları fotoluminessensiya və magneto-optik cihazlar üçün çox perspektiv materialdır [8-9].

Təqdim olunan tədqiqat işinin məqsədi Cr atomunun müxtəlif konsentrasiyalarının (12.5 %, 6.25 %, 3.125 %, 1.5625 %) heksaqonal quruluşlu ZnSe-in elektron və maqnit xassələrinə təsirinin və beləliklə də, onun spintronika və opto-elektronikada texniki tətbiq imkanlarının araşdırılmasına həsr olunmuşdur.

HESABLAMA METODU

İşdə yerinə yetirilmiş nəzəri hesablamalar funksional sıxlıq nəzəriyyəsinin (DFT) [10] lokal spin sıxlıq yaxınlaşması (LSDA) və Hubbard *U* düzəlişi (Zn-in *d*-halları üçün: 4.5 eV və Se-in *p*-halları üçün 3.8 eV) çərçivəsində aparılmışdır. Bu məqsədlə Kohn-Sham tənliklərinin həlli üçün psevdopotensial və atom orbitallarının xətti kombinasiyalarından (LCAO) istifadə olunmuşdur. Mübadilə-korrelyasiya effektləri Perdew-Zunger sxemi [11] istifadə olunmaqla nəzərə alınmışdır. Heksaqonal quruluşlu ZnSe birləşməsindən ($a=b=3.98 \text{ \AA}$ and $c=6.53 \text{ \AA}$) 32-, 64-, 128- və 256-atomdan ibarət geniş superözəklər qurulmuş, ferromaqnit (FM) və antiferromaqnit (AFM) spin düzülüşlərinin tədqiqi məqsədilə strukturda iki Zn atomu Cr

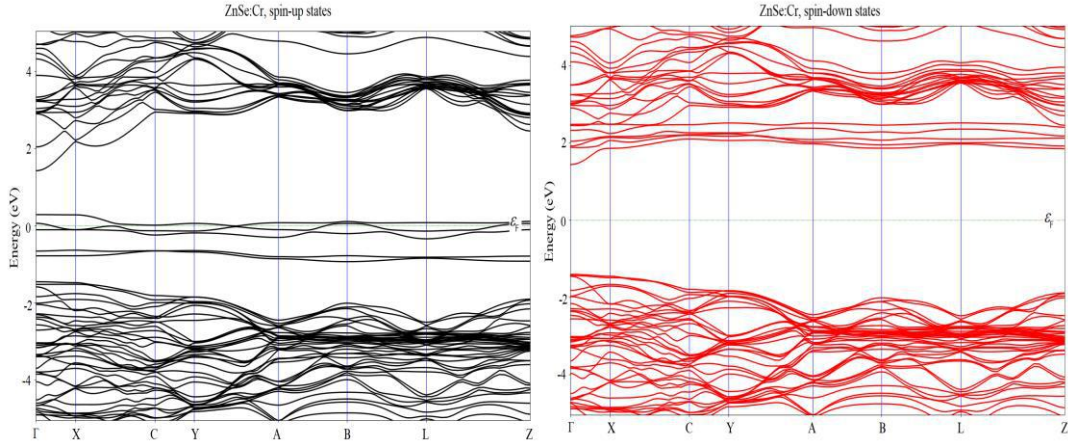
atomu ilə əvəz olunmuş və bütün strukturlar enerjinin minimuma gətirilməsi yolu ilə həndəsi optimallaşdırılmışdır. Brillüen zonası üzrə inteqrallama Monkhorst-Pack sxemi üzrə $3 \times 3 \times 3$ və $5 \times 5 \times 5$ *k*-nöqtə istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Baxılan halda kristalın strukturunun optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti 0.01 eV/\AA , mexaniki gərginlik tenzorunun maksimal qiyməti isə 0.01 eV/\AA^3 -dan kiçik olana qədər, yəni tarazlıq quruluş parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Dalğa funksiyalarının ayrılışında kinetik enerjinin maksimal qiyməti 75 Ha olmuşdur. Zn üçün $12 (5s^2 4d^{10})$, Se üçün $6 (3s^2 3p^4)$ və Cr üçün isə $6 (3d^5 4s^1)$ elektron valent elektronu hesab edilmişdir.

NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏ Zn(Cr)Se-in ELEKTRON XASSƏLƏRİ

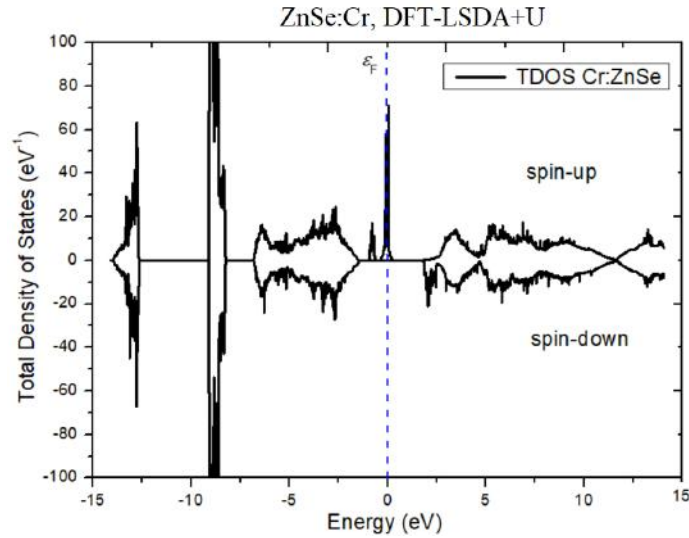
3d keçid elementi ilə aşqarlanmış 32-, 64-, 128- və 256-atomdan ibarət $\text{Cr}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ geniş özəklər üçün LSDA yaxınlaşması, Hubbard *U* yarım-empirik düzəlişləri və spin nəzərə alınmaqla birləşmənin elektron xassələri təməl prinsiplərdən tədqiq edilmiş, zona quruluşu və elektron hal sıxlığı hesablanmışdır. Şəkil 1-də Cr-atomu ilə aşqarlanmış 32-atomdan ibarət ZnSe birləşməsinin quruluşu göstərilmişdir. Hesablamalardan alınmış spin-yuxarı (qara rəngdə) və spin-aşağı (qırmızı rəngdə) hallara uyğun olaraq spin-polyarlaşmış zona quruluşları və tam hal sıxlığı (TDOS) diaqramı uyğun olaraq şəkil 2 və 3-də verilmişdir. Hesablanmış tam və parsial hal sıxlıqları mənzərələrinə görə valent zonası əsasən Se-in *p*- və Cr-un *d*-hallarından törəyir. Aşqar Cr atomunun *d*-halları Fermi enerji səviyyəsini kəsir və hesablanmış spin-yuxarı zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərəsinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, Cr ilə aşqarlanmış heksaqonal quruluşlu ZnSe birləşməsi yarım-metal materialdır. Aşqarın müxtəlif konsentrasiyalarında ZnSe:Cr üçün təməl prinsiplərdən hesablamalardan alınmış nəticələr aşağıda cədvəl 1-də gətirilmişdir.



Şəkil 1. 3d keçid elementi ilə aşqarlanmış ZnSe 32-atomdan ibarət struktur.



Şəkil 2. $Zn_{15}Cr_1Se_{16}$ üçün spin-yuxarı (solda) and spin-aşağı (sağda) hallara uyğun spin-polyarlanmış zona quruluşları.



Şəkil 3. $Zn_{15}Cr_1Se_{16}$ üçün tam hal sıxlığı mənzərəsi.

Cədvəl 1.

Təməl prinsiplərdən hesablanmış qadağan zolağın eni.

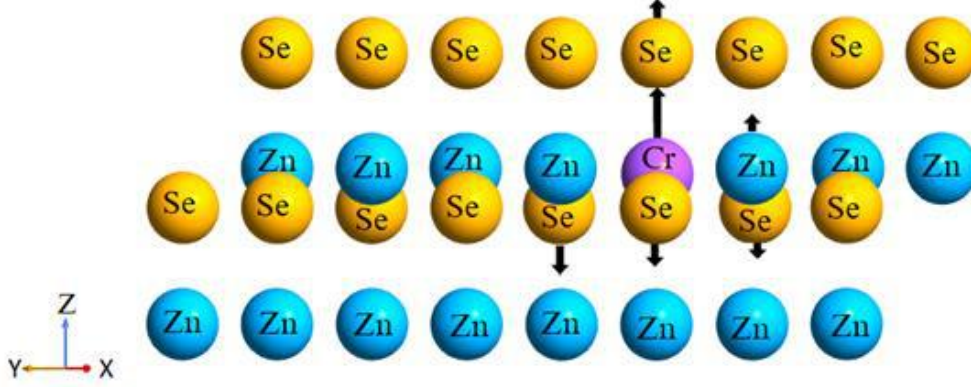
Birləşmə	MP grid	Konsentrasiya (%)	Qadağan zolağın eni (eV)	
			Spin-yuxarı	Spin-aşağı
$Zn_{15}Cr_1Se_{16}$	$5 \times 5 \times 5$	6.25	1.14	2.88
$Zn_{14}Cr_2Se_{16}$	$5 \times 5 \times 5$	12.5	1.01	3.01
$Zn_{30}Cr_2Se_{32}$	$5 \times 5 \times 5$	6.25	1.2	2.85
$Zn_{62}Cr_2Se_{64}$	$3 \times 3 \times 3$	3.125	1.19	2.79
$Zn_{126}Cr_2Se_{128}$	$3 \times 3 \times 3$	1.5625	1.16	2.74

Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi aşqar atomunun konsentrasiyası azaldıqca qadağan zolağın eni də azalır.

ZnSe:Cr-İN MAQNİT XASSƏLƏRİ

İşdə Cr 3d keçid elementinin müxtəlif konsentrasiyaları ilə aşqarlanmış heksaqonal quruluşlu

ZnSe birləşməsi üçün maqnit xassələri tədqiq edilmiş, maqnit momentinin qiyməti hesablanmışdır. $Zn_{15}Cr_1Se_{16}$ 32-atomdan ibarət geniş özəyin spin-polyarlaşmadan alınmış quruluşu şəkil 4-də göstərilmişdir. Qeyd edək ki, şəkil 4-də nəzərəçarpaq qiymətə malik maqnit momentləri qara rəngli oxlarla təsvir edilmişdir.



Şəkil 4. $Zn_{15}Cr_1Se_{16}$ üçün spin-polyarlaşmış struktur.

Hesablamalardan tədqiq edilən sistem üçün tam maqnit momentinin qiyməti $4.0 \mu_B$ alınmışdır ki, bu da [1] işində alınmış nəticəylə uyğunluq təşkil edir. Belə ki, [1]-də FP-LMTO metodundan istifadə etməklə maqnit momentinin qiyməti 16- ($x=0.0625$) və 32-atomdan ($x=0.125$) ibarət $Zn_xCr_{1-x}Se$ geniş özəklər üçün uyğun olaraq 3.9827 və $3.9937 \mu_B$ tapılmışdır. Sistemin maqnitlənməsinə əsas payı aşqar atomunun d -halları verirməklə ($3.193 \mu_B$) Cr üçün maqnit momenti $4.028 \mu_B$ təşkil edir. $Zn_{1-x}Cr_xSe$ sisteminin maqnitlənməsində strukturun 15 Zn atomu cüzi müsbət ($0.195 \mu_B$) və 16 Se atomu isə cüzi mənfi pay ($-0.221 \mu_B$) verir.

Bundan əlavə, ferromaqnit ($Zn_{1-x}TM_x^ISe$) və antiferromaqnit ($Zn_{1-x}TM_{x/2}^I TM_{x/2}^I Se$) spin düzülüşləri üçün tam enerji hesablamaları yerinə yetirilmişdir. Tam enerji hesablamalarından isə ferromaqnit spin düzülüşünün antiferromaqnit spin düzülüşünə nisbətən daha dayanıqlı olduğu müəyyən olunmuşdur. Bunlardan əlavə, işdə ZnSe:Cr üçün Küri temperaturu hesablanmış və

müəyyən olunmuşdur ki, aşqar atomunun 12.5 % ($T_K=3150$ K) və 6.25 % ($T_K=711$ K) konsentrasiyaları üçün birləşmə yüksək temperaturu yarım-metal ferromaqnit materialdır və spintronikada texniki tətbiq üçün əlverişli namizədlərdəndir.

NƏTİCƏ

$Zn_{1-x}Cr_xSe$ üçün DFT-LSDA+U metodu ilə təməl prinsiplərdən aparılmış hesablamalardan müəyyən olunmuşdur ki, Cr atomunun struktura daxil olunması bu birləşmənin zona quruluşunu və tam hal sıxlığı mənzərəsinin dəyişməsinə, beləliklə də, maddənin yarım-metal ferromaqnit materiala çevrilməsinə səbəb olur. Birləşmənin tam maqnit momenti $4.0 \mu_B$ olub, maqnitlənməyə əsas payı aşqar atomunun d -halları verir. Ferromaqnit və antiferromaqnit hallarının tədqiqi göstərir ki, $Zn_{1-x}Cr_xSe$ üçün ferromaqnit halı daha stabildir və bu maddə spintronikada texniki tətbiq üçün perspektiv material hesab olunur.

- [1] O. Cheref, et al., J. Supercond. and Novel Magn., 2018, v.32, p.1.
- [2] M. Behloul, et al., J. Magn. and Magn. Mater., 2016, v.419, p.233.
- [3] K. Sato K, H. Katayama-Yoshida, Jpn. Appl. Phys., 2001, v.40, p.L485.
- [4] M.A. Mehrabova, et al., Conference proceedings "Modern Trends In Physics", 2019, p.39.
- [5] M.A. Mehrabova, et al., Materials Physics and Mechanics 48 (2022) 419.
- [6] M.A. Mehrabova, et al., Modern Trends In Physics, 2021, v.1, p.121.

- [7] K. Sato K, H. Katayama-Yoshida, Phys. Stat. Sol. (b), 2002, v.229, p.673.
- [8] J. Dai, et al., Results in Physics, 2019, v.15, p.102649.
- [9] S.B. Mirov, et al., IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron., 2015, v.21, p.292.
- [10] P. Hohenberg, W. Khon, Phys. Rev. B, 1964, v.136, p.B864.
- [11] J. Perdew, A. Zunger, Phys. Rev. B, 1981, v.23, p.5048.

V.N. Jafarova, N.T. Mamedov, M.A. Musayev

AB INITIO STUDY OF ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF Cr-DOPED ZnSe COMPOUND

The electronic and magnetic properties of the Cr *3d* transition element doped ZnSe compound were studied using the Atomistic ToolKit calculation program using the density functional theory and the local spin density approximation. The band structure and density of states for Zn(Cr)Se were calculated from first principles, and the magnetic properties of the compound were investigated. From total energy calculations, it was determined that the arrangement of ferromagnetic spins is more stable than the arrangement of antiferromagnetic spins. The temperature of the Curie compound was estimated and it was established that ZnSe:Cr is a semi-metallic ferromagnetic compound and a promising material for using in a spintronic.

В.Н. Джафарова, Н.Т. Мамедов, М.А. Мусаев

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЯ ZnSe С ЗАМЕЩЕНИЕМ Cr ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Электронные и магнитные свойства соединения ZnSe, легированного переходным элементом Cr *3d*, были изучены с помощью расчетной программы Atomistic ToolKit с использованием теории функционала плотности и приближения локальной спиновой плотности. Из первых принципов рассчитаны зонная структура и плотность состояний для Zn(Cr)Se, исследованы магнитные свойства соединения. Из расчетов полной энергии было определено, что расположение ферромагнитных спинов более стабильно, чем расположение антиферромагнитных спинов. Оценена температура Кюри соединения и установлено, что ZnSe:Cr является полуметаллическим ферромагнитным соединением и перспективным материалом для применения в спинтронике.

Qəbul olunma tarixi: 14.09.2022