

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.233

DOI: 10.17223/00213411/68/3/7

Исследование валентной зоны легированного железом германия методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теории функционала плотности*Т.Т. Магкоев¹¹Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова, г. Владикавказ, Россия

Электронная структура двойной пленочной системы Ge–Fe исследована сочетанием методов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и теории функционала плотности (ТФП). Двойная пленочная система Ge–Fe толщиной порядка 7.5 нм с одинаковым содержанием атомов Ge и Fe формировалась в условиях сверхвысокого вакуума при отжиге последовательно сформированных на поверхности кристалла Mo(110) пленок Ge и Fe. По данным фотоэлектронных измерений, проведенных в области величин энергии связи в интервале 0–200 эВ, происходит смещение спектральных линий как Ge, так и Fe относительно значений, характерных для Ge и Fe в отдельности, что согласуется с результатами ТФП-расчетов. Наблюдаемое соответствие характера энергетического сдвига электронных орбиталей и качественного согласия абсолютных величин этих сдвигов, полученных обоими методами, указывает на перспективность такого подхода для детальной настройки структурных и электронных свойств легированного железом, а также другими металлами германия.

Ключевые слова: поверхность, тонкие пленки, германий, железо, фотоэлектронная спектроскопия, теория функционала плотности.

Легирование германия переходными металлами является эффективным способом настройки его электронных свойств [1–11]. В результате этого может быть реализована электронная структура легированного материала, обусловленная $d \leftrightarrow p$ -гибридизацией атомных орбиталей. Формируемая при этом электронная структура зависит от конкретного переходного металла и его относительной концентрации. Например, несмотря на то, что Ni и Fe являются $3d$ -переходными металлами, при легировании ими германия имеет место противоположное направление переноса электронного заряда: в случае Ni происходит перенос заряда от Ge к Ni, в то время как в случае Fe происходит перенос заряда от Fe к Ge [3, 7, 12]. Такое различие обусловлено деталями электронного строения атомов Ni и Fe, в частности, степенью заполненности d -орбиталей и различием в величине их электронного сродства и поляризуемости [7]. С учетом недавно продемонстрированной особенности Ge, модифицированного атомами Fe, заключающейся в переносе заряда от Fe к Ge, и зависимости величины этого заряда от относительной концентрации Fe [12] представлялось целесообразным продолжить эти исследования и установить характер изменения валентной зоны при переходе от Ge к Fe–Ge. Именно структура валентной зоны и ее контролируемые модификации определяют характер электронных свойств материала и возможность их настройки для широкого спектра практических применений.

Электронную структуру двойной системы Fe–Ge можно рассматривать как обусловленную перекрытием атомных орбиталей Fe и Ge. Следует ожидать, что электронные свойства, такие, например, как ширина зоны и плотность состояний, будут определяться относительным содержанием Fe и Ge и атомной структурой формируемой решетки. Именно эти характеристики определяют многие особенности легированного германия как материала, имеющего важное значение как для фундаментальной, так и прикладной науки и технологии. В связи с этим цель настоящей работы – установление электронной структуры двойной системы Fe–Ge на основе фотоэмиссионных измерений и теоретических расчетов. Для расчета электронной структуры системы Fe–Ge использован квантово-механический метод функционала плотности с улучшенными для этой цели пакетами [13]. Основное внимание направлено на определение плотности и частичной плотности электронных состояний (DOS, pDOS) различных атомов и характера распределения углового момента. Для по-

* Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки РФ (код научной темы FEFN-2024-0002) и в рамках коллаборации ARIADNA FEFN-2024-0006 (ОИЯИ, Дубна).