

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 538.9

DOI: 10.17223/00213411/68/6/10

Разбавленные магнитные полупроводники на основе кристаллической матрицы GaSe с внедренными атомами хрома: полуметаллические электронные свойства и локализованные магнитные моменты*В.Н. Брудный¹, С.Ю. Саркисов¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Выполнен расчет спин-поляризованных электронных свойств разбавленных магнитных полупроводников на основе кристаллов GaSe, содержащих атомы Cr в части катионных узлов. Согласно полученным результатам, $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Se}$ при $x = 0.042$ обладает выраженной полуметаллической электронной структурой при ферромагнитном упорядочении магнитных моментов, локализованных на атомах Cr.

Ключевые слова: GaSe, разбавленный магнитный полупроводник, плотность электронных состояний, теория функционала плотности, полуметаллическая электронная структура.

Введение

Разбавленные магнитные полупроводники (РМП) являются одним из классов материалов, которые активно исследовались в рамках поиска структур для применений в спинтронике. В таких структурах может быть получена, в частности, электронная структура полуметалла [1], приводящая к проводимости за счет носителей заряда только со спинами одного направления. Следует отметить, что экспериментальные реализации ферромагнитных (и, в частности, антиферромагнитных) полуметаллов долгое время отсутствовали. Первые экспериментальные демонстрации были достигнуты для 2D-структур. В настоящее время большие ожидания в этой области связаны со структурами перовскитов.

В настоящей работе были выполнены расчеты электронных свойств РМП на основе кристалла GaSe с внедренными атомами переходного металла (ПМ) четвертого периода таблицы Менделеева (Cr). Как известно, селенид галлия является типичным слоистым соединением, пригодным для образования буферных эпитаксиальных слоев и квазидвумерных структур [2–4]. Кроме того, слоистая структура приводит к возможности внедрения атомов примесей в межслоевое пространство (интеркаляции). Основное применение кристаллы GaSe находят в нелинейной оптике, в качестве среды для преобразования частоты лазерного излучения в ИК- и терагерцовый диапазоны частот [5]. Ввиду нелинейно-оптических свойств селенида галлия при создании объемных и нанослойных РМП на его основе возможно прогнозировать получение в них интересных фото-магнито-электрических эффектов.

В основном ранее выполненные исследования РМП были направлены на алмазоподобные полупроводники: элементарные полупроводники четвертой группы (Si, Ge) [6], их двойные (A^2B^6 и A^3B^5 полупроводники со структурой цинковой обманки) [7] и тройные (халькопириты $\text{A}^1\text{B}^3\text{C}_2^6$ и $\text{A}^2\text{B}^4\text{C}_2^5$) [8] аналоги, легированные ПМ четвертого периода. Для многих из них была предсказана электронная структура полуметалла и достигнуто достаточно глубокое понимание электронных и магнитных свойств (закономерности изменения величины локализованных магнитных моментов при переходе от одной структуры к другой, магнитное упорядочение, обменные механизмы, значения температур Кюри). В связи с перспективными оптическими свойствами существенным отличием кристаллической структуры от структуры ранее изученных алмазоподобных полупроводников и отсутствием расчетов электронной структуры с разрешением по спинам для объемных РМП на основе кристалла GaSe настоящее исследование представляется актуальным.

* Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-0014.