

PACS: 71.20.-b, 71.15.-m

DEFEKTİN $Cd_{1-x}Mn_xSe$ YARIMMAQNİT YARIMKEÇİRİCİLƏRİNİN ELEKTRON ZONA QURULUŞUNA TƏSİRİ

M.Ə. Mehrabova¹, N.H. Həsənov², N.İ. Hüseyinov¹, A.İ. Kazımova³, F.Q. Əsədov¹

¹AMEARadiasiya Problemləri İnstitutu

²Bakı Dövlət Universiteti

³Gəncə Dövlət Universiteti

m.mehrabova@science.az

Xülasə: İdeal və defektli $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($0.01 \leq x \leq 0.06$) yarımmaqnit yarımkeçiricilərinin təməl prinsiplərdən, sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi çərçivəsində elektron zona quruluşu, hal sıxlığı, qadağan zonasının eni, tam enerjisi hesablanmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, tərkibində Mn atomlarının miqdarı artdıqca qadağan olunmuş zonanın eninin azalması baş verir. Vakansiya tipli defektlər qadağan olunmuş zonanın eninin böyüməsinə, tam enerjinin dəyişməsinə gətirib çıxarır və qadağan olunmuş zonada lokal səviyyələr əmələ gəlir. Göstərilmişdir ki, Mn atomları maqnit momentinin yaranmasına səbəb olur və ferromaqnit hal daha dayanıqlıdır.

Açar sözlər: Yarımmaqnit yarımkeçirici, təməl prinsiplər, sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi, elektron zona quruluşu, hal sıxlığı, qadağan olunmuş zonanın eni, tam enerji, ferromaqnit, antiferromaqnit, vakansiya

1. Giriş

Hal-hazırda spintronikada, mikro- və optoelektronika $A^{II}B^{VI}$ qrup halkogenidlər geniş tətbiq olunur. Bu yarımkeçiricilər əsasında hazırlanmış günəş elementləri, ionlaşdırıcı radiasiya şüa detektorları, spektrin İQ və UB oblastında işləyən fotoqəbuledicilər və detektorlar, optik izolyatorlar və s. öz uğurlu istifadəsini tapmışdır [1]. Elmin sürətlə inkişafı və dünya marketing sistemində güclü rəqabətin olması cihazların əsasını təşkil edən materialların parametrlərinin daim yaxşılaşmasını tələb edir.

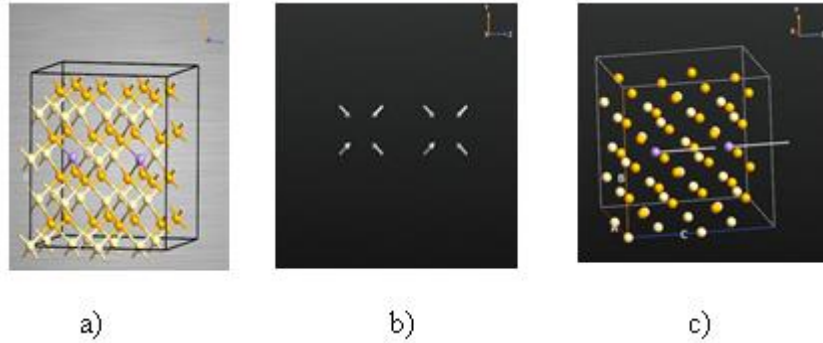
Qeyd edək ki, $A^{II}B^{VI}$ qrup halkogenidlərin həcmi kristalları əsasında kifayət qədər tədqiqatlar aparılmasına və onlar əsasında cihazlar hazırlanmasına baxmayaraq, onların yarımmaqnit yarımkeçiricilərinin və nazik təbəqələrinin tətbiq imkanları yetərinə öyrənilməmişdir [2-5]. Digər tərəfdən ionlaşdırıcı şüaların həmin yarımkeçiricilərin fiziki xassələrinə təsirinin öyrənilməsi radiasiyaya həssas və radiasiyaya davamlı cihazların yaradılması baxımından müasir cihazqayırmada aktual məsələlərdən biridir.

Təqdim edilən işdə vakansiya malik $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($0.01 \leq x \leq 0.06$) yarımmaqnit yarımkeçiricilərinin təməl prinsiplərdən, sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi çərçivəsində elektron zona quruluşu, hal sıxlığı, qadağan zonasının eni, tam enerjisi hesablanmışdır.

2. İdeal superözək

64 atomdan ibarət $Cd_{30}Mn_2Se_{32}$, $x=0.067$ superözəyi qurulmuş və onun elektron quruluşu (EQ) hesablanmışdır. Hesablamalar təməl prinsiplərdən DFT nəzəriyyəsi çərçivəsində psevdopotensiallar metodu ilə Double Zeta Double Polarized (DZDP) bazisində Lokal Spin Sıxlığı Yaxınlaşmasında (LSDA), Hubbard- U potensialı nəzərə alınmaqla Atomistix ToolKit (ATK) proqramında aparılmışdır.

İlk növbədə ideal $Cd_{30}Mn_2Se_{32}$ superözəyi qurulmuş, atomların relaksasiyası və kristal qəfəsin optimallaşdırılması aparılmışdır ki, nəticədə qəfəsdə yaranan qüvvələr tamamilə itmiş və gərginlik minimuma endirilmişdir. Elektronların zona quruluşu, hal sıxlığı (HS), tam enerjisi hesablanmış, Fermi səviyyəsinin vəziyyəti müəyyən edilmişdir (şək.1, şək. 2, cədvəl 1, cədvəl 2).



Şək.1. $Cd_{30}Mn_2Se_{32}$, $x=0.067$ superözəyinin a) kristal quruluşu, b) kristal qəfəsdə optimallaşmadan öncə qüvvələr, c) maqnit momentləri

Cədvəl 1. $Cd_{30}Mn_2Se_{32}$, $x=0.067$ superözəyində optimallaşmadan öncə gərginlik

```

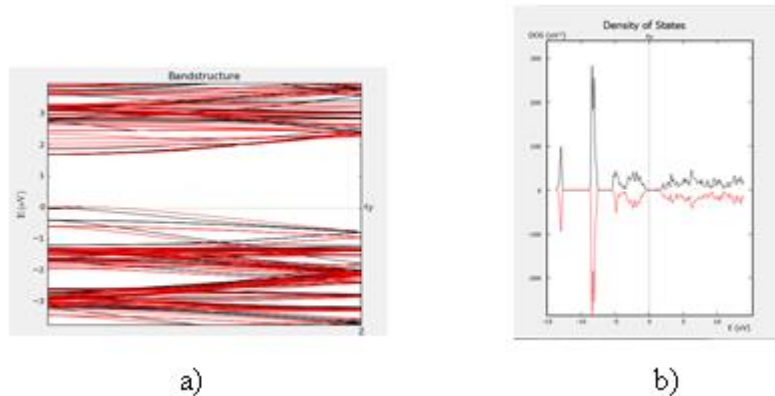
+-----+
| [[ -1.11078399e-02 0.00000000e+00 0.00000000e+00] |
| [ 0.00000000e+00 -1.11078399e-02 0.00000000e+00] |
| [ 1.23259516e-32 2.46519033e-32 -1.10964999e-02]] eV/Ang**3 |
+-----+
    
```

Cədvəl 2. $Cd_{30}Mn_2Se_{32}$, $x=0.067$ superözəyində optimallaşmadan sonra gərginlik

```

+-----+
| [[-0.01117681 0. 0. ] |
| [ 0. -0.01117681 0. ] |
| [ 0. 0. -0.01104786]] eV/Ang**3 |
+-----+
    
```

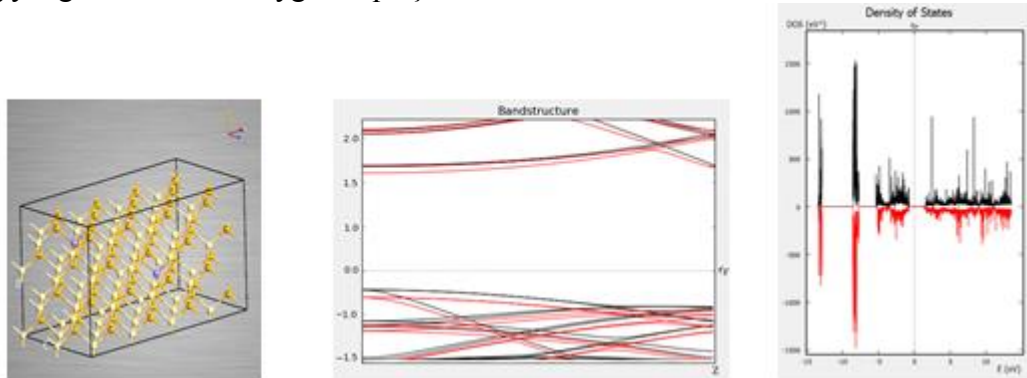
$Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($x=0.067$) yarımmaqnit yarımkeçiricisinin hal sıxlığının proyeksiyalarından elektron zona quruluşu müəyyən edilmişdir. Ferromaqnit hal üçün hesablanmış hal sıxlığından qadağan olunmuş zonanın eni $E_g=1.7eV$ təşkil etmişdir (şək.2).



Şək. 2. $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($x=0.067$): a) elektron zona quruluşu, b) hal sıxlığı

$Cd_{30}Mn_{2}Se_{32}$ super özəyi üçün ferromaqnit (FM) və antiferromaqnit (AFM) hallarında tam enerjilər hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, FM halın tam enerjisi $E_t(FM)=-60532.460\text{eV}$ AFM halın tam enerjisi isə $E_t(AFM)=-60532.461\text{eV}$ olmuşdur. Beləliklə, $E_t(FM) > E_t(AFM)$ olduğundan FM halı daha dayanıqlı saymaq olar.

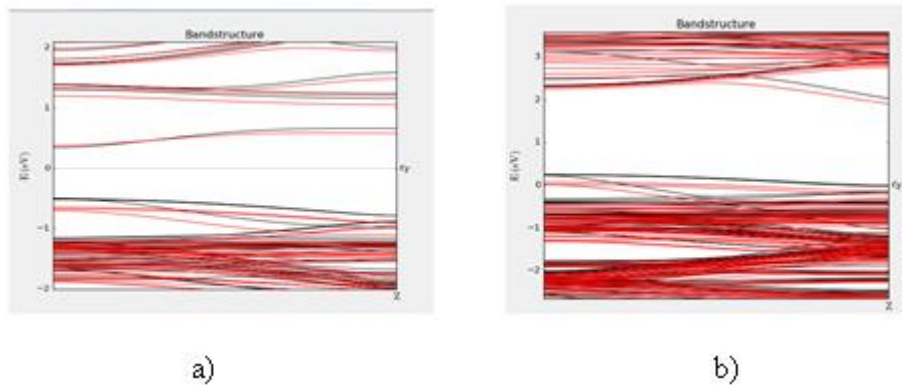
$Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($x=0.03$) yarımmaqnit yarımkeçiricisinin Mn atomlarının konsentrasiyasından asılılığını müəyyən etmək üçün 128 atomdan ibarət $Cd_{62}Mn_{2}Se_{64}$ super özək qurulmuşdur. Hal sıxlığından hesablanmış qadağan olunmuş zonanın eni $E_g=2.1\text{eV}$ olmuşdur (şək.3), tam enerji isə $E_t=-122948.75\text{eV}$ təşkil etmişdir. Göründüyü kimi, Mn atomlarının konsentrasiyası artdıqca qadağan olunmuş zonanın eninin azalması baş verir ki, bu da ədəbiyyat göstəriciləri ilə uyğunluq təşkil edir [6-9].



Şək.3. $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ($x=0.03$) a) kristal qəfəs, b) elektron zona quruluşu c) hal sıxlığı

3. Defektli superözək

Məqalədə vakansiya tipli defektin $Cd_{30}Mn_{2}Se_{32}$ super özəyinin elektron strukturuna təsiri öyrənilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, Se vakansiyası (V_{Se}) qadağan olunmuş zonanın eninin böyüməsinə səbəb olur $E_g=1.82\text{eV}$, tam enerji artır $E_t=-60132.5\text{eV}$, qadağan olunmuş zonada 1 lokal səviyyə yaranır $E=0.34\text{eV}$ (şək.4,a). Cd vakansiyası (V_{Cd}) da həmçinin qadağan olunmuş zonanın eninin böyüməsinə gətirib çıxarır $E_g=2.1\text{eV}$, tam enerji artır $E_t=-58978.1\text{eV}$, lakin qadağan olunmuş zonada heç bir lokal səviyyə yaranmır (şək.4,b).



Şək. 4. $Cd_{30}Mn_{2}Se_{32}$ superözəyinin elektron zona quruluşu a) V_{Se} , b) V_{Cd}

4. Nəticələr

Nəzəri tədqiqatlar nəticəsində belə qərara gəlmək olar ki, $Cd_{1-x}Mn_xSe$ yarımmaqnit yarımkeçiricilərində Mn atomlarının miqdarı artdıqca qadağan olunmuş zonanın eninin azalması baş verir. Digər tərəfdən nəzəri hesablamalar göstərmişdir ki, defektlər qadağan olunmuş

zonanın eninin böyüməsinə və tam enerjinin dəyişməsinə gətirib çıxarır və elektron strukturunda əlavə lokal səviyyələr əmələ gəlir.

Maqnit xassələrinin tədqiqindən müəyyən edilmişdir ki, Mn atomları maqnit momentinin yaranmasına səbəb olur. Göstərilmişdir ki, ferromaqnit hal daha dayanıqlıdır.

Tədqiqat işi UETM №6288 layihəsinin qrant dəstəyi ilə yerinə yetirilmişdir.

Ədəbiyyat

1. Любченко А.В., Сальков Е.А., Сизов Ф.Ф.. Физические основы полупроводниковой инфракрасной фотоэлектроники, Киев, Науково Думка. 1984, 224с.
2. Никитин П.И., Савчук А.И. Эффект Фарадея в полумагнитных полупроводниках. 1990, т.15, №11, с.167-196
3. Нуриев И.Р., Мехрабова М.А., Назаров А.М., Садыгов Р.М., Гасанов Н.Г. Рост, структура и морфология поверхности эпитаксиальных пленок CdTe // ФТП, 2017, v.51, №1, p.36-39
4. Nuriyev I.R., Mehrabova M.A., Hasanov N.H. Structure and surface morphology of Cd_{1-x}Mn_xSe epitaxial films // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2018, v.12, №3, p.504–506.
5. Нуриев И.Р., Мехрабова М.А., Гасанов Н.Г., Фараджев Н.В., Фарзалиев С.С. Структура и морфология поверхности эпитаксиальных пленок Cd_{1-x}Fe_xSe. АМЕА АМЕА, Xəbərlər, 2017, №2, с.101-105
6. Sharma R.P., Patil S.V., Bhavsar S.V., Patil A.R., Dori L. Compositional effect on optical characteristic of solution grown Cd_{1-x}Mn_xSe thin film. Indian journal of Pure and Applied Physics. 1999, v.17, p.876-880
7. Eid A.H., Seddek M.B., Salem A.M., Dahu T.M. Preparation and Characterization of thermally evaporated Cd_{1-x}Mn_xSe thin films. Journal of Applied Sciences Research, 2008, 4(3), p.319-330
8. W. B. Jian, Jiye Fang, Tianhao Ji. Quantum-size-effect-enhanced dynamic magnetic interactions among Mn Se nanocrystals. Applied physics letters. 2003, v.83, N16, p.3377-3379
9. Jianjun Tian, Lili Lv, Chengbin Fei, Yajie Wang, Xiaoguang Liu, Cao Guozhong. A highly efficient (>6%) CdMnSe quantum dot sensitized solar cell. Journal of Materials Chemistry A, 2, 2014, p. 19653-19659

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТА НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПОЛУМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ Cd_{1-x}Mn_xSe

М.А. Мехрабова, Н.Г. Гасанов, Н.И. Гусейнов, А.И. Кязимова, Ф.Г. Асадов

Резюме: Из первых принципов методом Теории Функционала Плотности были рассчитаны электронная зонная структура, плотность состояний, ширина запрещенной зоны, полная энергия идеальных и дефектных полумагнитных полупроводников Cd_{1-x}Mn_xSe (0.01≤x≤0.06). Установлено, с увеличением концентрации атомов Mn ширина запрещенной зоны уменьшается, дефекты типа вакансии приводят к росту запрещенной зоны, изменению полной энергии и образованию локальных уровней в запрещенной зоне. Установлено, что атомы Mn образуют магнитные моменты, и ферромагнитное состояние является более стабильным.

Ключевые слова: Полумагнитные полупроводники, из первых принципов, Теория Функционала Плотности, электронная зонная структура, плотность состояний, ширина запрещенной зоны, полная энергия, ферромагнит, антиферромагнит, вакансия.

**EFFECT OF DEFECT ON ELECTRONIC STRUCTURE OF
Cd_{1-x}Mn_xSe SEMIMAGNETIC SEMICONDUCTORS**

M.A. Mehrabova, N.H. Hasanov, N.I. Huseynov, A.I. Kazimova, F.G. Asadov

Abstract: It has been calculated the electronic band structure, density of states, band gap, total energy of the ideal and defective semimagnetic semiconductors Cd_{1-x}Mn_xSe ($0.01 \leq x \leq 0.06$) by ab-initio method using the Functional Density Theory. It has been established that, with an increase in the concentration of Mn atoms, the band gap decreases. Vacancy-type defects lead to an increase in the band gap, a change in the total energy, and the formation of local levels in the band gap. It has been defined, that Mn atoms form magnetic moments, and the ferromagnetic state is more stable.

Keywords: Semimagnetic semiconductors, ab-initio, Density Function Theory, electron band structure, density of states, band gap, total energy, ferromagnetic, antiferromagnetic, vacancy.