

Исследование „из первых принципов“ энергетических характеристик и магнитных свойств точечных дефектов в GaAs

© В.И. Байков^{*,**}, Э.И. Исаев^{*}, П.А. Коржавый^{**}, Ю.Х. Векилов^{*}, И.А. Абрикосов^{***}

^{*} Московский государственный институт стали и сплавов,
119049 Москва, Россия

^{**} Королевский технологический институт,
SE-100 44 Стокгольм, Швеция

^{***} Университет Линчёпинга,
SE-581 83 Линчёпинг, Швеция

E-mail: eyvaz_isaev@yahoo.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 28 февраля 2005 г.)

Энергии образования собственных точечных дефектов и энергии растворения примесей переходных металлов в арсениде галлия определены на основе *ab initio* расчетов с использованием метода локально самосогласованной функции Грина, являющегося обобщением приближения когерентного потенциала. На основе рассчитанных энергий сделан вывод о том, что антиструктурный дефект As_{Ga} является наиболее распространенным собственным дефектом в GaAs. Расчеты показали, что примеси переходных металлов, за исключением Ni предпочтительно замещают галлиевые узлы. Рассчитаны магнитные моменты примесных атомов в зависимости от химического окружения. Показано, что атомы Mn имеют тенденцию к образованию кластеров в скомпенсированном GaAs.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-02-16823), Королевской Шведской академии наук и шведских исследовательских фондов (VR, SSF).

1. Введение

Распределение примесных атомов по подрешеткам в полупроводниковых соединениях сильно влияет на их оптические и транспортные свойства. Примесные атомы могут находиться в позициях замещения, внедрения, а также образовывать комплексы дефектов. В зависимости от того, в какой подрешетке будет размещена примесь, она может проявлять себя либо как донор, либо как акцептор (этим определяется тип примесной проводимости). Концентрация и место расположения дефектов определяются энергиями образования дефектов и растворения примесных атомов. До сих пор об этих энергиях в зависимости от типа примесей и их позиций в решетке матрицы известно мало.

Большинство работ по исследованию примесей *3d*-металлов в GaAs посвящено главным образом решению двух задач: выяснению позиции и зарядового состояния, в котором находятся атомы примеси в кристаллической решетке GaAs и определению положения образующихся при этом энергетических уровней в запрещенной зоне. Интерес к этим задачам обусловлен возникновением глубоких примесных энергетических уровней примесей (например, Cr) в соединениях $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, необходимых для разработки полупроводниковых кристаллов [1].

Изучение распределения примеси по подрешеткам в GaAs проводилось экспериментальными и теоретическими методами [2–9]. Исследование локального окружения атомов в $(\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{As}$ методом EXAFS (Extended X-ray absorption fine structure) показало, что атомы Mn замещают Ga-узлы [2] и при этом длина связи Mn–As меняется незначительно (до 3%). Из результатов по исследованию электронного парамагнитного резонанса

(ЭПР) и эффекта Мессбауэра [3] известно, что атомы Fe в GaAs занимают узлы галлиевой подрешетки и находясь в нейтральном состоянии имеют электронную конфигурацию $3d^5$ и $3d^6$ при наличии фона компенсирующих доноров, что подтверждается исследованиями акустического парамагнитного резонанса [4]. Недавно был выращен кристалл магнитного полупроводника $\text{Ga}_{1-x}\text{Fe}_x\text{As}$ и методом EXAFS было подтверждено, что атомы Fe замещают Ga-узел [5]. Измерения коэффициента Холла и электропроводности [3] показали, что примесь Fe в арсениде галлия является акцептором. Экспериментально [6,7] было показано, что примесь Cr в GaAs замещает атомы галлиевой подрешетки. Однако в литературе нет надежных результатов по энергетике данных примесей в GaAs, необходимых для анализа возможности распределения примесей по другим подрешеткам.

Поскольку атомы элементов группы Fe с незаполненными электронными оболочками обладают отличным от нуля собственным магнитным моментом, это должно привести к изменению величины магнитной восприимчивости кристалла. С другой стороны, известно [10], что ионы *3d*-металлов в твердых телах испытывают сильное влияние кристаллического поля, что приводит к „замораживанию“ орбитального момента. Поэтому экспериментально наблюдаемые значения магнитных моментов ионов *3d*-металлов в кристаллах обычно отличаются от значений моментов для свободных ионов. В связи с этим представляет интерес исследование величины магнитного момента атома примеси в зависимости от его химического окружения в GaAs. Эта проблема напрямую связана с возможностью получения магнитного полупроводникового материала с высокой (порядка комнатной) температурой Кюри. Этой теме посвящено

огромное количество работ (см. обзорные работы [11,12] и ссылки в них), однако проблема до сих пор остается открытой.

В настоящей работе проведены расчеты из „первых принципов“ электронной структуры, энергии растворения атомов примеси переходных металлов TM ($TM = V, Cr, Mn, Fe, Co$ и Ni) на различных подрешетках в арсениде галлия и энергии перехода примесей с одной подрешетки на другую. Кроме того, рассчитаны энергии образования восьми типов собственных точечных дефектов (двух типов вакансий V_{Ga}, V_{As} , двух антиструктурных дефектов As_{Ga}, Ga_{As} и четырех межузельных дефектов $As_{I1}, As_{I2}, Ga_{I1}, Ga_{I2}$, где тетраэдрическая позиция $I1$ имеет атомы Ga на вершинах тетраэдра, а $I2$ — атомы As соответственно) и магнитные моменты атомов примеси на различных подрешетках в GaAs. На основе полученных величин определены предпочтительные позиции распределения структурных дефектов и примесных атомов в арсениде галлия как для стабильного состояния, так и для метастабильных.

2. Методика и детали расчетов

Для расчета энергетических свойств одиночных точечных дефектов в настоящей работе использовались кубические суперъячейки на основе структуры (ZnS) цинковой обманки с $N = 128$ узлами ($2 \times 2 \times 2$), содержащие один дефект на суперъячейку. (Межузельные позиции моделировались при помощи пустых сфер и рассматривались как дополнительные узлы решетки). Для вычисления энергий для парных дефектов использовались суперъячейки с $N = 256$ ($2 \times 2 \times 4$). С увеличением числа узлов в суперъячейке возрастает количество вычислительных затрат. Поэтому становится предпочтительным использование метода локально самосогласованной функции Грина (ЛСФГ) [13,14], имеющего линейный скейлинг времени расчета с числом узлов в отличие от стандартных зонных методов, где время пропорционально N^3 .

Расчеты проводились следующим образом. Каждый узел в суперъячейке вместе с первыми четырьмя координационными сферами атомов и пустых сфер вокруг него рассматривался самосогласованно как зона локального взаимодействия (ЗЛВ) метода ЛСФГ, погруженная в эффективную среду, имеющую ту же симметрию, что и исходная решетка. Параметры эффективной среды выбирались таким образом, чтобы они в среднем описывали рассеивающие свойства системы. Центральный диагональный блок G_{LL}^{RR} матрицы функции Грина метода Корринги–Кона–Ростокера (KKR), рассчитанный в приближении атомных сфер (KKR–ПАС), использовался для построения зарядовой плотности внутри атомной сферы с радиус-вектором R в суперъячейке. Атомные радиусы для всех сортов атомов и пустых сфер принимались равными среднему радиусу сферы Вигнера–Зейтца для описываемой структуры.

При расчете полной энергии были учтены также несферические компоненты электронной плотности в

рамках теории линейного отклика по методике, близкой к предложенной в работе [15]. Интегрирование несферических компонент по атомной сфере дает величины мультипольных зарядов Q_L^R атомных сфер, которые использовались для определения мультипольных Маделунговских вкладов в одноэлектронный потенциал и полную энергию

$$V_0^R = \frac{1}{S} \sum_{R',L'} M_{0,L'}^{RR'} Q_{L'}^{R'} \quad (1)$$

и

$$E_M = \frac{1}{2S} \sum_{R,L} Q_L^R \sum_{R',L'} M_{L,L'}^{R,R'} Q_{L'}^{R'}, \quad (2)$$

где $L \equiv (l, m)$ — орбитальное и магнитное квантовое число; $M_{L,L'}^{R,R'}$ — мультипольная Маделунговская матрица, которая эквивалентна матрице неэкранированных структурных констант для полной суперъячейки, S — радиус Вигнера–Зейтца.

Расчет функции Грина производился с максимальной величиной орбитального квантового числа $l_{\max} = 2$ и соответственно мультипольные компоненты электронной плотности учитывались до $l = 4$. Вычисление полной энергии проводилось в рамках приближения локальной плотности для обменно-корреляционного потенциала [16]. Объемы суперъячеек были релаксированы к минимуму полной энергии, однако эффекты локальной релаксации вокруг точечных дефектов не учитывались.

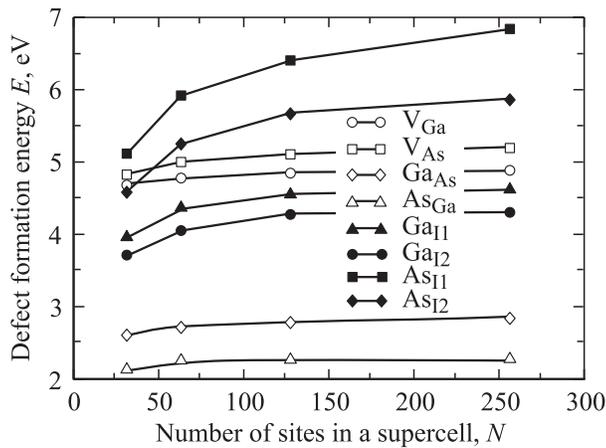
3. Результаты и обсуждение

Результаты расчетов энергии образования собственных точечных дефектов¹ в GaAs представлены на рисунке, из которого видно, что удовлетворительная сходимость для этих энергий достигается при 128 узлах (64 атомов и 64 пустых сфер) в суперъячейке. В настоящей работе энергии образования дефектов в GaAs были определены относительно стехиометрического соединения согласно формуле

$$E_{\text{def}} = \left. \frac{\partial(\Delta E)}{\partial x_{\text{def}}} \right|_{P=0},$$

где ΔE — энергия образования соединения содержащего дефекты определенного типа с концентрацией x_{def} . Рассчитанные энергии образования дефектов представлены в табл. 1. Здесь же для сравнения приведены данные, полученные другими авторами. (Энергии образования дефектов в работах [17,18] представлены для случая GaAs, содержащего избыток As. Поэтому для сравнения с рассчитанными результатами (табл. 1) энергии образования дефектов, полученные в работах [17,18], приведены к определению, используемому в данной работе, с учетом энергии образования стехиометрического соединения GaAs $\Delta E = -0.8 \text{ eV/atom}$). Можно заметить,

¹ Следует отметить, что мы рассматривали только нейтральные собственные точечные дефекты и соответственно сравнивали с энергиями для таких же дефектов.



Зависимость энергии образования собственных точечных дефектов в GaAs от числа атомов в суперъячейке. V_{As} и V_{Ga} — вакансии, Ga_{As} и As_{Ga} — антиструктурные дефекты, Ga_{I1} , As_{I1} , Ga_{I2} , As_{I2} — атомы в междоузлиях.

что в большинстве случаев наши результаты находятся в согласии с выводами предшествующих работ. Это в первую очередь вывод о том, что антиструктурный дефект As_{Ga} (так называемый стабильный $EL2$ -дефект) является наиболее выгодным с энергетической точки зрения и этот вывод подтверждается экспериментально и теоретически [19–21]. Во-вторых, большие энергетические затраты на создание дефектов As_{I1} и As_{I2} объясняют, почему эти дефекты не обнаружены экспериментально с использованием ЭПР, электрических и оптических методов [19]. Кроме того, значения энергий находятся в хорошем согласии с результатами первопринципных расчетов Нортрупа–Занга [22] и Янсена–Санки [23]. Для дефекта As в тетраэдрических междоузлиях также имеется хорошее согласие с результатами работы [17], в которой проблема образования собственных точечных дефектов в GaAs была исследована с использованием первопринципных псевдопотенциалов и большой суперъячейки, содержащей 216 атомов. Отметим, что в [17] позиции дефектов As_{I1} и As_{I2} не были отрелаксированы. Имеются и некоторые отличия. Например, энергия образования вакансии V_{Ga} значительно отличается от величин, полученных в работах [18,22]. Расхождения между значениями соответствующих энергий образования вакансий могут быть связаны с использованием разных методов.

Мы также рассчитали энергии образования парных дефектов в GaAs (табл. 2). Можно заметить, что по сравнению с дефектом $As_{Ga}-Ga_{As}$ энергетические затраты на создание других исследовавшихся пар дефектов очень велики (даже больше, чем для мышьяка в междоузлиях), и поэтому вряд ли стоит ожидать экспериментального обнаружения таких дефектов в GaAs. Недавно Джанотти и др. [24] с использованием молекулярной динамики в формулировке Кар–Парринелло и первопринципных сохраняющих норму псевдопотенциалов показали, что энергия образования нейтрального парного антиструктурного дефекта $As_{Ga}-Ga_{As}$ равна 2.62 eV (без релак-

сации — 2.87 eV), полагаем, что различие полученных энергий может быть обусловлено следующими причинами. Во-первых, интегрирование по зоне Бриллюэна в [24] произведено с использованием только одной k -точки — точки Г. Как показано в [25], это может привести к значительным ошибкам при расчете энергии образования дефекта. Во-вторых, число атомов в используемой нами суперъячейке было в 2 раза меньше, чем в [24]. Еще одна причина — сильная „несферичность“ зарядовой плотности в полупроводниках, которая в используемом нами методе учтена лишь приближенно. Используемый нами метод занимает промежуточное положение между приближением атомной сферы (ПАС) и приближением полной зарядовой плотности.

Обсудим результаты расчетов для примесей переходных металлов (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) в стехиометрическом GaAs. Энергия растворения этих примесей

Таблица 1. Энергия образования вакансий, антиструктурных и междоузельных дефектов в GaAs (eV)

| Литературная ссылка | Тип дефекта | | | | | | | |
|---------------------|-------------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------------|------------------|
| | V_{Ga} | V_{As} | Ga_{As} | As_{Ga} | Ga_{I1} | Ga_{I2} | As_{I1} | As_{I2} |
| Наст. раб. | 4.89 | 5.21 | 2.85 | 2.27 | 4.63 | 4.32 | 6.85 | 5.89 |
| [24] | 4.55 | | 2.74 | 2.50 | | | 6.14 | |
| [25] | 4.25 | 4.25 | 3.6 | 2.4 | 5.0 | 4.7 | 8.5 | 6.8 |
| [19] | 3.70 | | | 3.40 | | | 7.7 ^a | 7.0 ^a |
| [20] | 3.6 | | | 2.4 | | | | |

^a — без релаксации.

Первая строка — результаты наших расчетов.

Таблица 2. Энергия образования собственных парных дефектов в стехиометрическом GaAs (eV)

| Парные дефекты | $As_{Ga}-Ga_{As}$ | $V_{Ga}-V_{As}$ | $As_{I1}-V_{As}$ | $Ga_{I2}-V_{Ga}$ | $Ga_{I1}-V_{Ga}$ |
|----------------|-------------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|
| Энергия, eV | 4.05 | 7.96 | 9.90 | 6.88 | 6.97 |

Таблица 3. Энергия растворения атомов примеси Co, V, Fe, Mn, Cr и Ni на различных подрешетках GaAs (eV)

| Примесь | Подрешетка | | | |
|---------|------------|------|------|------|
| | Ga | As | $I1$ | $I2$ |
| V | 2.11 | 5.69 | 4.91 | 4.43 |
| Cr | 2.01 | 5.25 | 4.11 | 4.11 |
| Mn | 1.92 | 4.71 | 3.82 | 3.64 |
| Fe | 1.71 | 4.12 | 2.96 | 2.50 |
| Co | 2.52 | 4.10 | 3.14 | 3.00 |
| Ni | 2.98 | 3.67 | 2.10 | 2.15 |

Таблица 4. Энергия перехода атома Mn из одной подрешетки на другую (eV)

| Переход | Энергия | Переход | Энергия | Переход | Энергия |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| Ga → As | 3.42 | As → I1 | 3.30 | I1 → I2 | -0.17 |
| Ga → I1 | 4.31 | As → I2 | 3.35 | I2 → Ga | 0.92 |
| Ga → I2 | 4.62 | I1 → Ga | 1.25 | I2 → As | 4.69 |
| As → Ga | -0.18 | I1 → As | 4.75 | I2 → I1 | 0.17 |
| I2 → As | 4.69 | I2 → As | 4.69 | | |

Примечание. Ga → As означает переход Mn из Ga подрешетки на As. Соответствующая реакция имеет следующий вид:

**Таблица 5.** Магнитные моменты примесей переходных металлов на различных подрешетках GaAs при рассчитанных равновесных параметрах решетки (в магнетонах Бора, μ_B)

| Примесь | Подрешетка | | | |
|---------|------------|------|-------|----|
| | Ga | As | I1 | I2 |
| V | 2 | 0 | 3.270 | 0 |
| Cr | 3 | 3 | 4 | 0 |
| Mn | 4 | 2 | 3 | 3 |
| Fe | 4.13 | 1.45 | 2 | 2 |
| Co | 2 | 0 | 1 | 1 |
| Ni | 0 | 0 | 0 | 0 |

приведена в табл. 3. Расчет проводился, исходя из рассчитанных полных энергий суперъячеек (1 атом примеси на суперъячейку) и реакции дефектообразования вида



Сравнивая эти энергии, в соответствии с результатами экспериментов [2,5,26], приходим к выводу, что энергетически наиболее выгодным является замещение атомами *TM* галлиевой подрешетки. Исключение составляет примесь Ni, которая отдает предпочтение тетраэдрическому междоузлию: энергия растворения Ni в междоузлиях практически такая же, как энергия растворения V, Cr, Mn на Ga-подрешетке. Обратим внимание также на плавное уменьшение энергии растворения примесей на Ga подрешетке от V к Fe и на резкий скачок для Co и Ni. Данное изменение в энергии можно объяснить порядком заполнения *d*-состояний примесных атомов. Валентные электроны заполняют *d*-состояние атомов примесей V, Cr, Mn, Fe со спином вверх. Это согласуется с рассчитанным магнитным моментом атомов примеси на галлиевой подрешетке (табл. 5). После того как *d*-состояния со спином вверх полностью заполнены

(для атомов Fe) начинается заполнение более высоко энергетических состояний со спином вниз. Это приводит к росту энергии растворения и уменьшению магнитного момента примеси.

Однако не исключается также возможность нахождения примеси и на другой подрешетке, но в метастабильном состоянии. Например, если атом примеси марганца при выращивании кристалла садится в междоузлие, для перехода в стабильное состояние на подрешетку Ga примесь должна затратить энергию порядка 1 eV на перемещение атома Ga в междоузлие. Иначе говоря, в отсутствие вакансий на Ga межузельная примесь не останется в метастабильном состоянии (табл. 4).

Расчет равновесного магнитного момента примесей на различных подрешетках в GaAs проводился методом „плавающего“ магнитного момента, где конечное значение магнитного момента получается в результате самосогласованных расчетов и не зависит от начального выбора. Рассчитанные равновесные магнитные моменты в зависимости от химического окружения приведены в табл. 5.

Магнитный момент для V, Cr, Mn в позиции Ga является целочисленным, а для Fe является нецелым числом (из-за заполнения *d*-подзоны со спином вниз) и зависит от длины тетраэдрических связей Fe–As (табл. 6). Это позволяет сделать вывод о том, что релаксация атомов Fe должна оказывать сильное влияние на термодинамические и физические свойства примесей Fe в GaAs. Эти выводы согласуются с результатами работы [27],

Таблица 6. Магнитный момент атома Fe (в μ_B) на различных подрешетках GaAs в зависимости от радиуса Вигнера–Зейтца R_{WS} (в атомных единицах)

| R_{WS} | $\mu(Fe_{As})$ | $\mu(Fe_{Ga})$ | $\mu(Fe_{I1})$ | $\mu(Fe_{I2})$ |
|----------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 2.55 | 1.32 | 1.02 | 1.99 | 2.01 |
| 2.60 | 1.45 | 4.13 | 2.01 | 2.01 |
| 2.65 | 1.78 | 4.38 | 2.20 | 2.02 |
| 2.70 | 2.00 | 4.49 | | 2.12 |
| 2.75 | 2.18 | 4.56 | | 2.36 |

Таблица 7. Магнитный момент атома Cr (в μ_B) на различных подрешетках GaAs в зависимости от радиуса Вигнера–Зейтца R_{WS} (в атомных единицах)

| R_{WS} | $\mu(Cr_{As})$ | $\mu(Cr_{Ga})$ | $\mu(Cr_{I1})$ | $\mu(Cr_{I2})$ |
|----------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 2.55 | 3.00 | 3.00 | 3.91 | 0 |
| 2.60 | 3.00 | 3.00 | 4.05 | 0 |
| 2.65 | 3.00 | 3.00 | 4.51 | 0 |
| 2.70 | 3.00 | 3.00 | 4.83 | 0 |
| 2.75 | 3.00 | 3.00 | 4.88 | 4.80 |

Таблица 8. Рассчитанные энергии парных взаимодействий дефектов в GaAs (eV/atom)

| Парный дефект | Для соседей в первой координационной сфере | Для соседей во второй координационной сфере |
|--|--|---|
| (As _{Ga} –Ga _{As}) | –1.24 | 0.07 |
| (Mn _{Ga} –As _{Ga}) | –0.16 | –0.03 |
| (Mn _{Ga} –Mn _{Ga}) | –0.09 | 0 |
| (Mn _{Ga} –Mn _{Ga}) + As _{Ga} | –0.22 | –0.21 |

Примечание. Отрицательная энергия соответствует притяжению дефектов друг к другу.

Таблица 9. Энергия магнитного упорядочения $\Delta E = E^{\text{AFM}} - E^{\text{FM}}$ (eV/atom Mn)

| Конфигурация дефектов | $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ | $\langle 100 \rangle$ | $\langle 200 \rangle$ |
|---|----------------------------------|-----------------------|-----------------------|
| $\left(\text{Ga}_{\frac{62}{64}}\text{Mn}_{\frac{2}{64}}\right)\text{As}$ | 0.09 | 0.04 | 0.04 |
| $\left(\text{Ga}_{\frac{62}{64}}\text{Mn}_{\frac{2}{64}}\text{As}_{\frac{1}{64}}\right)\text{As}$ | –0.06 | –0.03 | –0.02 |

где после релаксации магнитный момент Fe оказался равным $1\mu_B$. Для V, Cr, Mn в позиции замещения (Ga-узел) увеличение длины связи на 8% не приводит к изменениям в величине магнитного момента (табл. 7). Следовательно, примеси V, Cr, Mn (и возможно, Ni) сохраняют симметрию тетраэдра (релаксация мала) [28].

Представляет интерес также энергия взаимодействия парных дефектов, поскольку на ее основе можно сделать вывод о возможности образования кластеров дефектов в GaAs. Эта энергия рассчитана для избранных конфигураций пар дефектов, находящихся в первой и второй координационной сферах относительно друг друга (табл. 8). Энергия взаимодействия отсчитывалась относительно энергии суперъчейки с максимально удаленными друг от друга дефектами в пределах выбранной суперъчейки ($N = 256 (2 \times 2 \times 4)$). Расчеты показали, что дефекты As_{Ga} и Ga_{As} сильно притягиваются в пределах первой координационной сферы, но если они являются вторыми соседями, то они отталкиваются. Дефекты, образующие пару (Mn_{Ga}–As_{Ga}) и находящиеся на расстоянии радиуса второй координационной сферы друг от друга, притягиваются. Примеси Mn_{Ga} в паре „чувствуют“ друг друга, если являются ближайшими соседями. Однако самым интересным является то, что в случае более сложного комплекса дефектов (Mn_{Ga}–Mn_{Ga}) + As_{Ga} (компенсированный полупроводник) энергия взаимодействия дефектов, образующих пару (Mn_{Ga}–Mn_{Ga}), является отрицательной и практически одинаковой для первой и второй координационных сфер. Таким образом, примесь Mn имеет тенденцию к образованию кластеров, как в GaAs *p*-типа, так и в компенсированном полупроводни-

ке; в последнем случае эта тенденция выражена более сильно. Этот вывод находится в согласии с результатами недавних работ, где была показана возможность образования малых кластеров атомами Mn, как замещающими Ga-узлы [29], так и занимающими междоузлия [30].

Для двух последних комплексов дефектов мы определили также энергию магнитного упорядочения в зависимости от расстояния между атомами Mn (табл. 9). Энергия магнитного упорядочения определена здесь как разность полных энергий между конфигурациями с антиферромагнитно (АФМ) и ферромагнитно (ФМ) упорядоченными моментами двух примесных атомов в суперъчейке. В случае полупроводника *p*-типа ферромагнитное упорядочение является энергетически более выгодным. В компенсированном полупроводнике наиболее выгодной является АФМ конфигурация. Это находится в согласии с результатами недавних экспериментальных и теоретических работ [31]. Локальный магнитный момент атомов Mn для скомпенсированного GaAs равен $5\mu_B$, что соответствует $3d^5$ электронной конфигурации атома (Mn²⁺). Полученная величина магнитного момента согласуется с экспериментально измеренной (X-ray Magnetic Circular Dichroism method) величиной магнитного момента $4.6\mu_B$ [32], а также измерениями намагниченности насыщения [26], которые показали усредненное значение спинов ($S = 2.2$). Значения магнитного момента Mn, промежуточные между 4 и $5\mu_B$, могут быть интерпретированы как присутствие атомов марганца в двух заряженных состояниях Mn⁺³ и Mn⁺².

В заключение отметим, что в настоящей работе из первых принципов с использованием метода ЛСГФ определены энергии образования точечных дефектов в арсениде галлия. Определены равновесные позиции примесей в кристалле, а также определены магнитные моменты примесей переходных металлов для различных позиций в кристаллической решетке GaAs. В некоторых случаях рассчитанные значения энергии образования дефектов получились немного завышены, так как в расчетах не были учтены эффекты локальной релаксации вокруг точечных дефектов. Было найдено, что в отличие от всех остальных примесей *3d*-металлов атомы Ni предпочитают междоузлия в GaAs. Показана возможность образования кластеров атомами Mn.

Список литературы

- [1] A. Partovi, A.M. Glass, D.N. Olson, G.J. Zyzdik, H.M. O'Bryan, T.H. Chiu, W.H. Knox. Appl. Phys. Lett. **62**, 464 (1993).
- [2] R. Shioda, K. Ando, T. Hayashi, M. Tanaka. Phys. Rev. B **58**, 1100 (1998).
- [3] В.И. Фистуль, Л.Я. Первова, Э.М. Омеляновский, Е.П. Ращевская, Н.Н. Соловьев, О.В. Пелевин. ФТП **8**, 485 (1974).
- [4] Е.М. Гананольский. ФТТ **15**, 368 (1973).
- [5] Y.L. Soo, G. Kioseoglou, S. Huang, S. Kim, Y.H. Kao, Y. Takatani, S. Haneda, H. Munekata. Phys. Rev. B **63**, 195 209 (2001).
- [6] Е.М. Гананольский. ФТТ **16**, 2886 (1974).

- [7] Д.Г. Андрианов, А.С. Савельев, Н.Н. Сучкова, Е.П. Рашевская, М.А. Филиппов. ФТП **11**, 1460 (1977).
- [8] К.В. Пономарев, П.А. Коржавый, Ю.Х. Векилов. ФТТ **39**, 264 (1997).
- [9] E.I. Isaev, V.I. Baykov, P.A. Korzhavyy, Yu.Kh. Vekilov, I.A. Abrikosov, B. Johansson, O. Eriksson. *J. Magn. Magn. Mater.*, в печати.
- [10] Р. Уайт. Квантовая теория магнетизма. Мир, М. (1976).
- [11] H. Ohno. *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 110 (1999).
- [12] T. Dietl. *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 377 (2002).
- [13] I.A. Abrikosov, A.M.N. Niklasson, S.I. Simak, B. Johansson, A.V. Ruban, H.L. Skriver. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 22, 4203 (1996).
- [14] I.A. Abrikosov, S.I. Simak, B. Johansson, A.V. Ruban, H.L. Skriver. *Phys. Rev. B* **56**, 15, 9319 (1997).
- [15] H.L. Skriver, N.M. Rosengaard. *Phys. Rev. B* **43**, 12, 9538 (1991).
- [16] J.P. Perdew, Y. Wang. *Phys. Rev. B* **45**, 13 244 (1992).
- [17] J.T. Schick, C.G. Morgan, P. Papulias. *Phys. Rev. B* **66**, 195 302 (2002).
- [18] A.A. Bonapasta, P. Giannozzi. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3923 (2000).
- [19] J.C. Bourgoin, H.J. von Bardeleben, D. Stiévenard. *J. Appl. Phys.* **64**, R65 (1988).
- [20] J. Dabrowski, M. Scheffler. *Phys. Rev. B* **40**, 10 391 (1980).
- [21] R.M. Cohen. *Materials Science and Engineering R* **20**, 167 (1997).
- [22] J.E. Northrup, S.B. Zhang. *Phys. Rev. B* **47**, 6791 (1993).
- [23] R.W. Jansen, O.F. Sankey. *Phys. Rev. B* **39**, 15, 3192 (1989).
- [24] A. Janotti, A. Fazzio, P. Piquini, R. Mota. *Phys. Rev. B* **56**, 13 073 (1997).
- [25] M.J. Puska, S. Pöykkö, M. Pesola, R.M. Nieminen. *Phys. Rev. B* **58**, 1318 (1998).
- [26] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, Y. Iye. *Appl. Phys. Lett.* **69**, 363 (1996).
- [27] S. Mirbt, B. Sanyal. *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 3295 (2002).
- [28] Д.Г. Андрианов, Н.Н. Сучкова, А.С. Савельев, Е.П. Рашевская, М.А. Филиппов. ФТП **11**, 730 (1977).
- [29] M. van Schilfgaarde, O.N. Mryasov. *Phys. Rev. B* **63**, 233 205 (2001).
- [30] J. Blinowski, P. Kacman. *Phys. Rev. B* **67**, 121 204 (2003).
- [31] P.A. Korzhavyy, I.A. Abrikosov, E.A. Smirnova, L. Bergqvist, P. Mohn, R. Mathieu, P. Svendlindh, J. Sadowski, E.I. Isaev, Yu.Kh. Vekilov, O. Eriksson. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 187 202 (2002).
- [32] H. Ohldag, V. Solinus, F.U. Hillebrecht, J.B. Goedkoop, N. Finazzi, F. Matsukura, H. Ohno. *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2928 (2000).