

Terenteva Yu.V.¹, Fomina L.V.², Beznosyuk S.A.¹

¹ Altai State University, 61 Lenin street, 656049
Barnaul

Fax: +7(385) 266-66-82;

Phone: +7(385) 266-66-82;

E-mail: bsa1953@mail.ru

² Angarsk State Technical Academy,

60 Chaikovskogostreet, 665835 Angarsk

Fax: +7(3955) 67-17-32; Phone: +7(3955) 67-17-32;

E-mail: flvbaan@mail.ru

Physicochemical conditions for the stability of manganese-doped nanolayers of gallium arsenide and its isoelectronic analogues

In this paper research of stability of nanolayers of manganese doped materials of $A^{III}B^V$ and $A^{II}B^{IV}C_2^V$ types holding much promise as spintronic semiconductor compounds is described. The method of non-local density functional has been applied to calculate bonding energies $\{\epsilon_{ij}(r)\}$ in atomic pairs for structures of $A^{III}B^V$ and $A^{II}B^{IV}C_2^V$ types and for MnAs. According to the calculations of internal energy, entropy and free energy of Helmholtz ($T = 298$ K), in the context of used models, addition of manganese to the arsenide's $A^{III}B^V$ and $A^{II}B^{IV}C_2^V$ nanolayers affects its stability in different ways depending on its morphology and substitution mode. However, a critical instability in nanofilm leading to the tendency of growing of a new phase germ may be formed under any manganese concentrations. This leads to deterioration of electrophysical parameters of magnetic semiconductor compounds that is agreed with experimental data.

© Terenteva Yu. V., Fomina L. V., Beznosyuk S. A., 2015

Introduction

One of the rapidly developing areas of solid state physics in the last decade is investigation into the possibility of transferring the spin-oriented electrons from a ferromagnet into a nonmagnetic semiconductor¹. This line of research has been called spintronics, which aims at developing devices that can simultaneously control the charge and spin properties of carriers. To create new functional spintronic devices it is required to increase allowed ranges of magnetic impurities

in semiconductor. The main obstacle for producing saturated with magnetic ions nanolayers of semiconductors is their tendency to separate into the magnetic and semiconducting phase even with a small (about 3–5%) amount of dopants. In order to identify the range of existence of single-phase magnetic semiconductor various experimental techniques can be used, for example DTA, XRF, and computer simulation techniques that allow us to study objects that are for some

reasons not available for the study with instrumental methods. Computer simulation allows us to investigate the stability of nanolayers of semiconductor systems doped with, for example, manganese, by

molecular mechanics with the entropy factor that allows us to detect the onset of nucleation of a new phase at the level of a few unit cells.

Computer simulation of nanolayer heterostructures A^{III}B^V doped with manganese

Nowadays, the most studied diluted magnetic semiconductors (DMS) are materials Ga_{1-x}Mn_xAs with $x < 9.10$ wt.% and corresponding heterostructures².

Another promising class of spintronic materials are considered to be semiconductor type compounds A^{II}B^{IV}S₂ mainly possessing the structure of copper pyrites³. For building of exact geometric model of nanostructured layers A^{III}B^V, MnAs in «Crystals» module of software package HyperChem 6.0, the parameters of crystal cells GaAs, AlAs, InAs, MnAs were used.

In the external environment of the isothermal-isochoric thermostat thermodynamic resistance of nanofilms with a constant number of atoms of each type is described by the minimality of Helmholtz free energy⁴. Nanolayers internal energy was determined in the pair of atomic interaction⁵:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M S_{ij} \varepsilon_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

where M is the total number of atoms in a cluster, S_{ij} is the element of the adjacency matrix of the graph bonds of the atoms, ε_{ij} is interaction potentials of the i -th to the j -th atoms, r_{ij} is interatomic distances.

To calculate the parameters $\{\varepsilon_{ij}(r)\}$ of pair binding energy of atoms in structures A^{III}B^V MnAs, the method of non-local functional density was used⁶.

In the framework of quantum statistical mechanics, entropy of S nanolayer

was calculated in the standard way, namely, by the number of its indistinguishable transposition of the manganese atoms microstates by formula:

$$S = k \ln \Omega, \quad (2)$$

where k is Boltzmann constant, Ω is the number of microstates that are indistinguishable and present a given macroscopic state of a nanosystem (statistical weight of the state). For each concentration of the manganese atoms in nanofilms of greatness Ω defined as the number of options permutation unit cells or clusters containing manganese atoms on the assumption that the structure of a diamond-like lattice of manganese atoms is free to migrate. This allows calculating the number of microstates of the formula for the state of an ideal solution. On the contrary, if we consider the matrix lattice A^{III}B^V with MnAs inclusions in the lattice, the free movement of manganese atoms is difficult, making it necessary to use in the calculation of the number of microstates of different models of correlated microstates.

Investigation of thermodynamic stability of nanolayers with different concentration of the manganese atoms was performed at different temperatures ranging from cryogenic (the temperature of liquid nitrogen). However, the most interesting are the normal conditions under which the natural experiments took place. Therefore, this paper presents an analysis

of the results of numerical experiments at $T = 298$ K. Structure of GaAs, AlAs, InAs and MnAs were a film with a size $20 \times 20 \times 2$ unit cells, which stood at 6400 atoms. As shown by test calculations, this size is quite representative for these nanofilms representativeness, as with an increase in the size, binding energy per atom in the calculation was varied within the error of the computer experiment. For the simulation of small concentrations of dopant atoms instead of A^{III} , $A^{III}B^V$ was introduced into the matrix from 48 to 400 atoms of manganese in different ways.

1. Change in the structure of atoms $A^{III}A^{III}B^V$ performed while maintaining diamond-like structure in the layers (model 1).

Analysis of the results of computer experiments

Calculations of the internal energy, entropy, and Helmholtz free energy ($T = 298$ K) within the claimed models are that the administration of manganese nanofilms AlAs, GaAs and InAs is different, affecting their resilience is based on the morphology and substitution model. When over-displaced atoms in a diamond- A^{III} con-figuration of $A^{III}B^V$ atoms of manganese doped nanolayers energy weakly depends on the morphology of the substitution and is the same for the various cluster sizes. Energy of nanolayer changes only on the number of manganese atoms, introduced in the system. For manganese-doped nanolayers AlAs the decrease in stability of the layer with respect to clear AlAs is observed. Instability increases with increase in the number of manganese atoms in the nanolayer. For layers containing clusters with the structure of MnAs size of 2 elementary cells resistance decreases with increase in the number of manganese atoms. This phe-

2. Replacement of fragments of structures $A^{III}B^V$ fragmented structure of MnAs. And the change is implemented as a uniform distribution of fragments of the lattice-division MnAs on re-lattice of the semiconductor, as well as with the formation of larger embryos to complete the collection of all manganese incorporated into the structure in a single cluster with the structure of MnAs (model 2).

In a study of the mechanical stability of nanostructures compounds we used the method of steepest descent. Relaxation of nanostructures by molecular mechanics was carried out with the use of software "KompNanoTeh" 7.

nomenon is explained by the fact that the magnitude of the energy of the interatomic bond involving atoms, atoms of aluminum and arsenic exceeds the similar parameter in the case of the manganese atoms and arsenic. Stability of nanolayers AlAs, doped with manganese, increases only in the case of the maximum size of the clusters with the structure of MnAs. This can be explained by the formation of additional bonds within the cluster due to distortion of the structure MnAs.

For nanolayers GaAs a different dependence in stability of layers is observed, depending on the number of manganese atoms, the cluster size, containing manganese and structural features of the clusters. For example, for diamond structures, similarly to the case of AlAs, stability depends weakly on the cluster size and morphology distribution, but depends only on the number of manganese atoms imposed on nanolayer. However, doped systems exhibit relative stability com-

pared to the undoped layer of GaAs, with a tendency to stabilize with the increase in the number of manganese atoms. Unstable systems with a cluster size of two unit cells of the structure MnAs indicate that the structure with the cluster size is to be re-presenting a diamond nanolayer. For a cluster of 4 unit cells stability of clusters with a diamond-like structure or the structure of the MnAs depends on the number of atoms Mn, introduced in the system topic. For the manganese concentration to 1.9 at.% crystallization of the cluster will present a diamond-like structure, but at concentrations of Mn, greater than 1.9 at.%, the crystal structure of the cluster will follow the structure of MnAs, while nanolayer stability of GaAs, doped with manganese, with the dimension of clusters 4 unit cells will raise with increasing concentration of Mn. However, the most stable clusters will be nanolayers with maximum size at the expense of additional bonds in the cluster with the

structure of MnAs.

Nanolayers InAs are structures for which the most stable one is a cluster of MnAs with a diamond lattice. The stability of clusters with a diamond-like structure increases with the concentration of manganese in the system. Clusters with the structure of MnAs and size 2 unit cells tend to decrease with increasing stability of the manganese concentration in the system. Clusters with the structure of MnAs and the size of 4 unit cells stabilize the system with increasing concentration of manganese, but not enough to form them into the system, because are the most stable system with diamond-like clusters. However, as in the case of nanolayers AlAs and GaAs, doped with manganese, the most stable yet is nanolayers with clusters of maximum size at the expense of additional bonds in the cluster with the structure of MnAs. But the realization of this configuration in the epitaxial layers of the PRM is highly unlikely.

Computer simulation-monolayers $A^{\text{III}}B^{\text{V}}S^{\text{V}}_2$ doped with manganese based on the example $ZnSnAs_2$

Structure $ZnSnAs_2$ and $ZnSnAs_2$: Mn representing a film $20 \times 20 \times 1$ dimensions of the unit cells, which amounted to 6400 atoms. In the doped systems administered from 48 to 400 atoms of manganese in different ways.

1. Replacement of Zn and Sn atoms in structures $ZnSnAs_2$ was carried out while maintaining the diamond-like structure in layers (model 1).

2. Replacement of fragments of structures $ZnSnAs_2$ fragmented structure of MnAs. And the change is implemented as a uniform distribution of fragments MnAs lattice on semiconductor lattice and to form larger nuclei, until the complete col-

lection of all the manganese introduced into the structure in a single cluster with the structure of MnAs (model 2).

3. The system model is analogous to 1, but only atoms Zn are replaced (model 3).

4. The system, similar to the model 2, but only atoms Zn are replaced (model 4). Structures corresponding to models 1 and 3 do not show respect to the stability of non-alloy system. In this case, structures built on the model of 3 exhibit greater stability. Moreover, the stability decreases with increasing of cluster size and concentration of manganese.

Structures constructed in accordance with the 2 and 4 models, behave differ-

ently in dependence of the size of the cluster. Structures with time-clusters of MnAs measures in 1 and 2 elementary cells exhibit instability concerning non-alloy structures, and structures with a diamond crystal lattice. As the concentration of manganese increases, the stability of structures decreases. In this case, the lower stability have structures corresponding to the model structure with 4 clusters in the size of 1-element unit cell is less stable than the structure with a cluster size of 2 elementary cells. When there are 4 unit cells observed, there is stability to non-alloy system. Structures relevant to model 4 are more energy effi-

cient compared with structures constructed by models 1–3. When the concentration of manganese in the 1.2 at.% (0.79 wt.%), the system is able to move from the structure, co-responsible with the size of model 4 with 4 elementary cells in the system corresponding to the model 2 with integration of cluster MnAs to its maximum size. However, at all concentrations of manganese may form a critical non-stability in nanofilms and the emergence of thermodynamic trend towards growth of the embryo of a new phase of MnAs by model 4, which leads to a deterioration of electro-physical parameters of magnetic semi-conductor.

1. Ivanov V. A., Aminov T. G., Novotorzhev V. M., Kalinnikov V. T. *Izvestiya Akademii Nauk. Seriya Chim.* 2004; 11:2255–2303. [Google Scholar].
2. Ohno H. Electrical properties of the patterned Co/Cu/Co sub-micron dots using a probe contact. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 2004; 272–276 (Part 1):1443–1445. doi: 10.1016/j.jmrrn.2003.12.730. [Google Scholar].
3. Wolf S. A., Awschalom D. D., Buhrman R. A., Daughton J. M., von Molnar S., Roukes M. L., Chtchelkanova A. Y., Treger D. M. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future (Review). *Science*. 2001; 294(5546):1488–1495. doi: 10.1126/science.1065386. [Google Scholar].
4. Vasil'evsky A. S., Multanovsky V. V. *Statistical Physics and thermodynamic.* Moscow: Prosvetshenie; 1985. 256 p. [Google Scholar].
5. Beznosyuk S. A., Potekaev A. I., Zshukovsky M. S., Zshukovskaya T. M., Fomina L. V., Multilevel structure, physico-chemical and informatical properties of substance. Tomsk: NTL: 2005. 264 p. [Google Scholar].
6. Beznosyuk S. A., Dianov R. D., Kuljanov A. T. *International Journal of Quantum Chemistry*. 1990; 38(5):691–698. [Google Scholar].
7. Beznosuyk S. A., Zshukovsky M. S., Vazshenin S. V., Lerh Ya. V. Svidetel'stvo about state registration of program for EVM № 2009613043 from 10 June 2009. [Google Scholar].

Ю. В. Терентьева¹,
Л. В. Фомина², С. А. Безносюк¹

¹ Алтайский государственный университет,
пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул.
Факс: (3852) 66-66-82; тел. 8 (3852) 66-66-82;
E-mail: bsa1953@mail.ru

² Ангарская государственная технологическая
академия, ул. Чайковского, 60, 665835, Ангарск.
Факс: (3955) 67-17-32; тел. (3955) 67-17-32;
E-mail: flvbaan@mail.ru

Физико-химические условия устойчивости нанослоев арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов, легированных марганцем

В работе представлено исследование устойчивости нанослоев полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{IV}C_2^V$ легированных марганцем. Для расчета параметров $\{\epsilon_{ij}(r)\}$ - энергий связей пар атомов в структурах – $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{IV}C_2^V$ и $MnAs$ использовался метод нелокального функционала плотности. Расчеты внутренней энергии, энтропии и свободной энергии Гельмгольца ($T = 298$ K) в рамках заявленных моделей свидетельствуют о том, что введение марганца в нанопленки арсенидов $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{IV}C_2^V$ по-разному сказывается на их устойчивости в зависимости от морфологии и модели замещения. Однако при любых концентрациях марганца возможно образование критической неустойчивости в нанопленке и появление термодинамической тенденции в сторону роста зародыша новой фазы $MnAs$, что ведет к ухудшению электрофизических параметров магнитного полупроводника в согласии с экспериментальными данными.

© Терентьева Ю. В., Фомина Л. В., Безносюк С. А., 2015

Введение

Одним из активно развивающихся направлений физики твердого тела в последние десятилетия является исследование возможности переноса спин-ориентированного электрона из ферромагнетика в немагнитный по-

лупроводник [1]. Данное направление исследований получило название спинтроники, целью которой является разработка устройств, способных одновременно управлять зарядовыми и спиновыми свойствами носителей.

Для создания новых функциональных спинтронных устройств требуется расширение допустимого диапазона содержания магнитных примесей в матрице полупроводника. Основным препятствием для получения насыщенных магнитными ионами полупроводниковых нанослоев является их тенденция к расслоению на магнитную и полупроводниковую фазы уже при небольшом (порядка 3–5 %) количестве легирующих добавок. Для выявления диапазона существования однофазного магнитного полупроводника могут использоваться различные экспери-

ментальные методы, например ДТА, РФА, а также методы компьютерного моделирования, которые позволяют исследовать объекты, по каким-либо причинам недоступные для исследования инструментальными методами. Компьютерное моделирование позволяет исследовать устойчивость нанослоев полупроводниковых систем, легированных, например, марганцем, методом молекулярной механики с учетом энтропийного фактора, что позволяет обнаружить начало зародышеобразования новой фазы на уровне нескольких элементарных ячеек.

Компьютерное моделирование нанослоевых гетероструктур A^{III}B^V, допированных марганцем

На сегодняшний день наиболее изученными разбавленными магнитными полупроводниками (РМП) являются материалы Ga_{1-x}Mn_xAs с $x < 9\text{--}10$ мас.% и гетероструктуры соответствующего состава [2].

Еще одним перспективным классом спинтронных материалов считаются полупроводниковые соединения типа A^{III}B^{IV}C₂, в основном обладающие структурой халькопирита [3]. Для построения точной геометрической модели наноструктурных слоев A^{III}B^V, MnAs в модуле Crystals программного пакета HyperChem 6.0 использованы параметры ячеек кристаллов GaAs, AlAs, InAs, MnAs.

Во внешних условиях изотермического-изохорического термостата термодинамическая устойчивость нанопленок с постоянным числом атомов каждого сорта описывается минимальностью свободной энергии Гельмгольца [4]. Внутренняя энергия нанослоя

была определена в приближении парных атомных взаимодействий [5]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M S_{ij} \varepsilon_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

где M – общее число атомов кластера, S_{ij} – элемент матрицы смежности графа связей атомов, ε_{ij} – потенциалы взаимодействия i -го с j -м атомом, r_{ij} – межатомные расстояния.

Для расчета параметров $\{\varepsilon_{ij}(r)\}$ энергии связи пар атомов в структурах A^{III}B^V и MnAs использовался метод нелокального функционала плотности [6].

В рамках квантовой статистической механики энтропия S нанослоя определялась стандартно, а именно числом ее неразличимых по перестановке атомов марганца микросостояний по формуле:

$$S = k \ln \Omega, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана, Ω является числом микросостояний, которые неразличимы и представляют заданное макроскопическое состояние наноси-

стемы (статистический вес состояния). Для каждой концентрации атомов марганца в нанопленке величина Ω определялась как количество вариантов перестановки элементарных ячеек или кластеров, содержащих атомы марганца, исходя из предположения, что в структуре с алмазоподобной решеткой атомы марганца могут свободно мигрировать. Это позволяет использовать для расчета количества микросостояний формулы для состояния идеального раствора. Напротив, если рассматривать матрицу решетки $A^{III}V$ с включениями зародышей решетки $MnAs$, свободное движение атомов марганца затруднено, что приводит к необходимости использовать в расчете числа микросостояний различные модели коррелированных микросостояний.

Исследование термодинамической устойчивости нанослоев с различной концентрацией атомов марганца было выполнено для различных температур, начиная от криогенных (температур жидкого азота). Однако наибольший интерес представляют нормальные условия, при которых были выполнены натурные эксперименты. Поэтому в настоящей работе представлен анализ результатов численных экспериментов при $T = 298$ К.

Структуры $GaAs$, $AlAs$, $InAs$ и $MnAs$ представляли собой пленки с

размерами $20 \times 20 \times 2$ элементарных ячеек, что составило 6400 атомов. Как показали тестовые расчеты, такой размер нанопленки является вполне презентативным для рассматриваемых соединений, так как при увеличении ее размера энергия связи в расчете на атом изменялась в пределах ошибки компьютерного эксперимента. Для моделирования малых концентраций допанта вместо атомов A^{III} в матрицу $A^{III}V$ было введено от 48 до 400 атомов марганца разными способами.

1. Замена атомов A^{III} в структурах $A^{III}V$ осуществлялась при сохранении алмазоподобной структуры в слоях (модель 1).

2. Замена фрагментов структур $A^{III}V$ на фрагменты структуры $MnAs$. При этом замена осуществлялась как с равномерным распределением фрагментов решетки $MnAs$ по решетке полупроводника, так и с образованием более крупных зародышей, до полного собирания всего марганца, введенного в структуру, в единый кластер со структурой $MnAs$ (модель 2).

В исследовании механической устойчивости наноструктур соединений использован метод наискорейшего спуска. Релаксация наноструктур методом молекулярной механики проводилась с использованием средств программного комплекса «КомпНаноТех» [7].

Анализ результатов компьютерных экспериментов

Расчеты внутренней энергии, энтропии и свободной энергии Гельмгольца ($T = 298$ К) в рамках заявленных моделей свидетельствуют о том, что введение марганца в нанопленки $AlAs$, $GaAs$ и $InAs$ по-разному сказыва-

ется на их устойчивости в зависимости от морфологии и модели замещения. При замещении атомов A^{III} в алмазоподобной конфигурации $A^{III}V$ на атомы марганца энергия допированных нанослоев слабо зависит от морфологии

замещения и оказывается фактически одинаковой для кластеров различного размера. Энергия нанослоя изменяется лишь от количества атомов марганца, введенных в систему. Для нанослоев AlAs, допированных марганцем, наблюдается снижение устойчивости слоя относительно чистого AlAs. Неустойчивость возрастает с увеличением числа атомов марганца в нанослое. Для слоев, содержащих кластеры со структурой MnAs размером в 2 элементарные ячейки, устойчивость снижается с увеличением числа атомов марганца. Данное явление объясняется тем, что величина энергии межатомной связи с участием атомов алюминия и мышьяка превышает аналогичный параметр в случае атомов марганца и мышьяка. Устойчивость нанослоев AlAs, допированных марганцем, возрастает только в случае максимального размера кластеров со структурой MnAs. Это можно объяснить образованием дополнительных связей внутри кластера за счет искажения структуры MnAs.

Для нанослоев GaAs наблюдается иная зависимость устойчивости слоев в зависимости от числа атомов марганца, размера кластеров, содержащих марганец и структурных особенностей кластеров. Так, для алмазоподобных структур, аналогично случаю с AlAs, устойчивость слабо зависит от размера кластеров и морфологии их распределения, а зависит только от количества атомов марганца, введенных в нанослой. Однако допированные системы проявляют относительную устойчивость по сравнению с недопированным слоем GaAs, с тенденцией стабилизации с увеличением числа атомов марганца. Нестабильность систем с разме-

ром кластера в 2 элементарные ячейки со структурой MnAs свидетельствуют о том, что структуры с таким размером кластера будут представлять собой алмазоподобные нанослои. Для кластера в 4 элементарные ячейки устойчивость кластеров с алмазоподобной структурой или со структурой MnAs зависит от количества атомов Mn, введенных в систему. Для концентрации марганца до 1,9 атм.% кристаллизация кластера будет представлена алмазоподобной структурой, но при концентрациях Mn, превышающих 1,9 атм.%, кристаллическая структура кластера будет соответствовать структуре MnAs, причем устойчивость нанослоя GaAs, допированного марганцем, с размерностью кластера в 4 элементарные ячейки будет возрастать с ростом концентрации Mn. Однако наиболее устойчивыми окажутся нанослои с кластерами максимального размера за счет дополнительных связей внутри кластера со структурой MnAs.

Нанослои InAs представляют собой структуры, для которых наиболее устойчивой оказывается кластер MnAs с алмазоподобной решеткой. Устойчивость кластеров с алмазоподобной структурой возрастает с ростом концентрации марганца в системе. Кластеры со структурой MnAs и размером в 2 элементарные ячейки имеют тенденцию к снижению устойчивости с ростом концентрации марганца в системе. Кластеры со структурой MnAs и размером в 4 элементарные ячейки стабилизируют систему с ростом концентрации марганца, но недостаточно для образования их в системе, т. к. наиболее устойчивыми оказываются системы с алмазоподобными кластера-

ми. Однако, как и в случае нанослоев AlAs и GaAs, допированных марганцем, наиболее устойчивыми все же окажутся нанослои с кластерами максимального размера за счет дополни-

тельных связей внутри кластера со структурой MnAs. Но реализация такой конфигурации в эпитаксиальных слоях этих РПМ весьма маловероятна.

Компьютерное моделирование нанослоев $A^{\text{IV}}B^{\text{IV}}C^{\text{V}}$, легированных марганцем, на примере $ZnSnAs_2$

Структуры $ZnSnAs_2$ и $ZnSnAs_2:Mn$ представляли собой пленки размерами $20 \times 20 \times 1$ элементарных ячеек, что составило 6400 атомов. В легированные системы введено от 48 до 400 атомов марганца разными способами.

1. Замена атомов Zn и Sn в структурах $ZnSnAs_2$ осуществлялась при сохранении алмазоподобной структуры в слоях (модель 1).

2. Замена фрагментов структур $ZnSnAs_2$ на фрагменты структуры MnAs. Причем замена осуществлялась как с равномерным распределением фрагментов решетки MnAs по решетке полупроводника, так и с образованием более крупных зародышей, вплоть до полного собирания всего марганца, введенного в структуру в единый кластер со структурой MnAs (модель 2).

3. Система, аналогичная модели 1, но замещаются только атомы Zn (модель 3).

4. Система, аналогичная модели 2, но замещаются только атомы Zn (модель 4).

Структуры, соответствующие моделям 1 и 3, не проявляют стабильности относительно нелегированной системы. При этом наибольшую стабильность проявляют структуры, построенные по модели 3. Причем стабильность падает с увеличением размера кластера и концентрации марганца.

Структуры, построенные согласно моделям 2 и 4, ведут себя по-разному в зависимости от размера кластера. Структуры с размерами кластеров MnAs в 1 и 2 элементарных ячейки проявляют нестабильность относительно нелегированной структуры и структур с алмазоподобной кристаллической решеткой. С ростом концентрации марганца стабильность структур уменьшается. При этом наименьшей стабильностью обладают структуры, соответствующие модели 4. Структура с кластерами размером в 1 элементарную ячейку оказывается менее стабильной, чем структура с размером кластера в 2 элементарных ячейки. При размере кластера в 4 элементарных ячейки уже наблюдается стабильность относительно нелегированной системы. Структуры, соответствующие 4 модели, энергетически более выгодны по сравнению со структурами, построенными по моделям 1–3. При концентрации марганца в системе 1,2 ат. % (0,79 мас. %) система способна перейти от структуры, соответствующей модели 4 с размером кластера в 4 элементарных ячейки, в систему, отвечающую модели 2 с укрупнением кластера MnAs до максимального размера. Однако при любых концентрациях марганца возможно образование критической неустойчивости в нанопленке и появления термодина-

мической тенденции в сторону роста зародыша новой фазы MnAs по типу модели 4, что ведет к ухудшению электрофизических параметров магнитного полупроводника.

1. Иванов В. А., Аминов Т. Г., Новоторцев В. М., Калинин В. Т. // Известия Академии наук. Серия химическая. 2004. № 11. С. 2255–2303.
2. Ohno H. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2004. V. 272–276. Part 1. P. 1.
3. Wolf S. A., Awschalom D. D., Buhrman R. A., Daughton J. M., von Molnár S., Roukes M. L., Chtchelkanova A. Y., Treger D. M. // Science. 2001. V. 294, N 5546. P. 1488–1495.
4. Васильевский А. С., Мултановский В. В. Статистическая физика и термодинамика. М.: Просвещение, 1985. 256 с.
5. Безносюк С. А., Потеев А. И., Жуковский М. С., Жуковская Т. М., Фомина Л. В. Многоуровневое строение, физико-химические и информационные свойства вещества. Томск: Изд-во НТЛ, 2005. 264 с.
6. Beznosjuk S. A., Dajanov R. D., Kuljanov A. T. // International Journal of Quantum Chemistry. 1990. V. 38, N 5. P. 691–698.
7. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2009613043 от 10 июня 2009 г. // С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, С. В. Важенин, Я. В. Лерх.