

ЙМОВІРНІСТЬ УТВОРЕННЯ КЛАСТЕРІВ РІЗНИХ РОЗМІРІВ У $Hg_{1-x}Mn_xSe$ ТА $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$

На основі проведених оцінок встановлено, що при $x \geq 0,03$ необхідно враховувати вклад у магнітну сприйнятливність $Hg_{1-x}Mn_xSe$ та $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$ від кластерів, які об'єднують три і більше атомів Mn. Розходження між теоретичними і експериментальними залежностями $\chi=f(T)$ навіть для $x \leq 0,03$ пояснюється тим, що розподіл атомів Mn у реальних кристалах погано описується статистичними закономірностями.

On the base of quantitative assessment there had been estimated that for $x \geq 0,03$ the confrilution from clusters joined three and more Mn atoms should be taken into cousideration for magnetic susceptibiliti of $Hg_{1-x}Mn_xSe$ and $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$. Unconformity between theoretical and experimetal $\chi=f(T)$ dependencies even for $x \leq 0,03$ is explained by the assumption that distribution of Mn atoms in real crystals could not be described by statistical regularity.

Магнітну сприйнятливність χ при наявності кластерів у кристалі можна виразити у вигляді [1,2]:

$$\chi_{Mn} = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 + \chi_4 + \dots, \quad (1)$$

де
$$\chi_1 = \frac{xN_0\mu_B^2g^2S(S+1)}{3k_B M_0 T} P_1, \quad (2)$$

а
$$\chi_2 = \frac{xN_0\mu_B^2g^2}{3k_B M_0 T} \times \frac{\sum_{S=0}^5 S(S+1)(2S+1) \exp\left[\frac{-J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]}{\sum_{S=0}^5 (2S+1) \exp\left[\frac{-J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]} P_2, \quad (3)$$

де χ_3, χ_4 – вклад у магнітну сприйнятливність зразка кластерів, що об'єднують більше ніж два атоми Mn, P_1 і P_2 – ймовірність утворення кластерів, які складаються з одного або двох атомів Mn (відповідно), x – вміст Mn (склад), N_0 – число Авогадро, M_0 – молекулярна вага $Hg_{1-x}Mn_xSe$ або $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$, μ_B – магнетон Бора.

У роботі [3] допускають, що між атомами домішки (у випадку марганцевмісних твердих розчинів на основі $A^{II}B^{VI}$ це атоми Mn), які довільним чином (хаотично) розподілені по всій кристалічній ґратці, існують взаємодії з ближньою сусідньою такою ж частинкою (б.с.) і з частинкою, яка слідує за сусідньою (с.з.с.). Тоді згідно з [4] ймовірності того, що атоми Mn знаходяться в цих кластерах різних розмірів, що утворюються

в ґранецентрованій кубічній ґратці, матимуть вигляд:

$$P_1 = S' = (1-x)^{18}; \quad P_2 = D' + D'', \quad (4)$$

де $D'(\text{б.с.}) = 12x(1-x)^{26}$,

а $D''(\text{с.з.с.}) = 6x(1-x)^{30}$.

Оскільки, згідно з [4], інтеграл обмінної взаємодії $J_{NN} \sim 0,2J_N$, то $J_{\text{с.з.с.}} \sim 0,2J_{\text{б.с.}}$ (або відповідно до наших позначень $J_{\text{с.з.с.}} \sim 0,2J_1$), і тоді більш правильним буде такий запис:

$$\chi_2 = \frac{xN_0\mu_B^2g^2}{3k_B M_0 T} \times \left[\frac{\sum_{S=0}^5 S(S+1)(2S+1) \exp\left[\frac{-J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]}{\sum_{S=0}^5 (2S+1) \exp\left[\frac{-J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]} D' + \frac{\sum_{S=0}^5 S(S+1)(2S+1) \exp\left[\frac{-0,2J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]}{\sum_{S=0}^5 (2S+1) \exp\left[\frac{-0,2J_1 S(S+1)}{2k_B T}\right]} D'' \right]. \quad (4)$$

Одразу ж зауважимо, що такий запис і розрахунки χ_2 , зроблені за формулою (4), мало відрізняються від значень χ_2 , одержаних із обчислень за формулою (3).

Отримані теоретичні залежності $1/\chi_{Mn}=f(T)$ показані на рис.1,2.

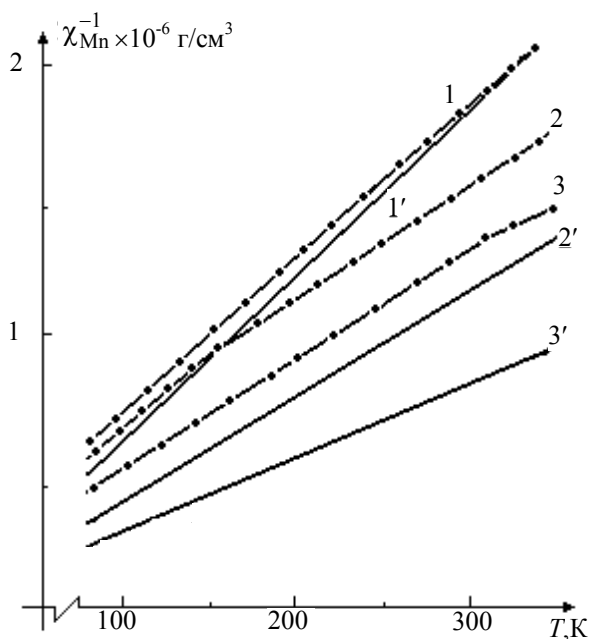


Рис. 1. Температурна залежність $1/\chi_{Mn}$ для $Hg_{1-x}Mn_xSe$: $x=0,01$ (1,1'), $x=0,03$ (2,2'), $x=0,05$ (3,3'); 1, 2, 3 – експериментальні, 1', 2', 3' – теоретичні залежності.

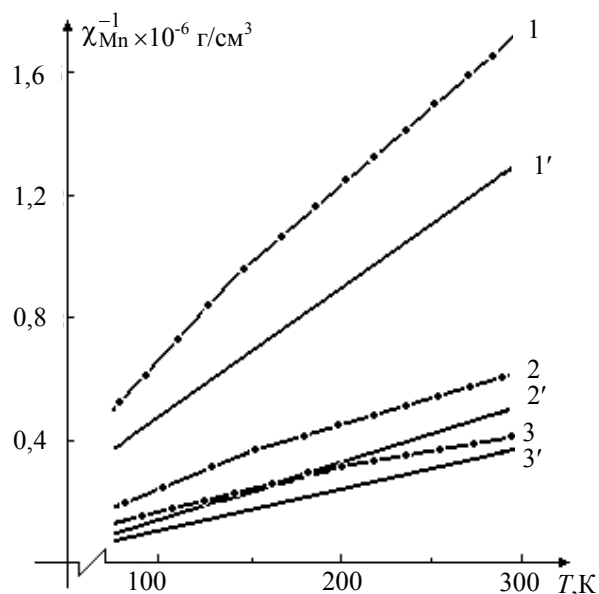


Рис. 2. Температурна залежність $1/\chi_{Mn}$ для $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$: ($y=0,01$, $x=0,011$ (1,1'), $x=0,017$ (2,2'), $x=0,025$ (3,3')), 1, 2, 3 – експериментальні, 1', 2', 3' – теоретичні залежності.

З рис.1,2 видно, що для $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$ ($x=0,011$, $y=0,01$) спостерігається найкраще узгодження між експериментальними [5, 6] і теоретичними залежностями, тобто коли кількість атомів Mn, які є одиничними або утворюють кластери-

двійки, складає $S'+D'+D''\approx 0,97$ (тобто 97 % від загальної кількості атомів Mn у зразку).

У зразках із вмістом марганцю, що перевищує $x=0,03$, кількість атомів Mn, які об'єднуються у кластери, що містять більше двох атомів Mn, різко зростає і становить для $x=0,03$ ($1-S'+D'+D''\approx 0,187$) 18,7% від загальної кількості атомів Mn в зразку [3], для $x=0,04$ – 28,4%, для $x=0,05$ – 38,0%, а для $x=0,1$ – 74,7%. Тому для $x\geq 0,03$ необхідно враховувати вклад у магнітну сприйнятливості від кластерів, які об'єднують три і більше атомів Mn. Але кількісні розрахунки в цьому випадку практично неможливо реалізувати через великі математичні труднощі [2]. Через це ми обмежились в наших розрахунках тільки вкладом у магнітну сприйнятливості зразка одиничних атомів Mn і тих, що утворюють кластери-двійки. Але якщо б ми навіть і змогли врахувати вклад в магнітну сприйнятливості від кластерів-трійок кластерів-четвірок і т.д., то це б лише погіршило узгодження між теоретичними та експериментальними залежностями для зразків з $x\leq 0,03$. Адже врахування вкладу χ_3 , χ_4 і т. д. збільшило б магнітну сприйнятливості χ_{Mn} , а отже теоретична залежність $1/\chi_{Mn}=f(T)$ ще гірше б погоджувалась з експериментальними (для зразків досліджуваних марганцевмісних твердих розчинів при $x\leq 0,03$). Поліпшення узгодження між теоретичними й експериментальними залежностями $1/\chi_{Mn}=f(T)$ для $x\sim 0,05$ пояснюється тим, що для цих зразків ми не враховуємо вклад у магнітну сприйнятливості близько 38% атомів Mn, які є у зразку, але входять в кластери-трійки, четвірки і т.д. Якби ми могли врахувати вклад у χ_{Mn} складових χ_3 , χ_4 і т.д., то теоретичні залежності $1/\chi_{Mn}=f(T)$ проходили б значно нижче від експериментальних і узгодження було б набагато гіршим.

Тепер ще раз повернемося до зразків із $x\leq 0,03$ і особливо звернемо увагу на зразки з $x\sim 0,01$ - $0,02$. Якщо б у реальних кристалах $Hg_{1-x}Mn_xSe$ та $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$ розподіл атомів Mn у кристалічній ґратці підкорявся статистичним закономірностям, то узгодження між теоретичними й експериментальними залежностями $1/\chi_{Mn}=f(T)$ було б набагато кращим, адже при теоретичних розрахунках для $x\sim 0,01$ - $0,02$ не враховується вклад у магнітну сприйнятливості менше ніж 10% кількості атомів Mn у зразку, які об'єднуються у

кластери-трійки, четвірки і т. д. Але справа в тому, що в реальних кристалах навіть при вмісті Mn у зразках $x \sim 0,01-0,02$ кількість атомів Mn, що об'єднуються в кластери-трійки і т.д., мабуть, значно більша ніж 10 %.

Крім того, в реальних кристалах (порівняно із статистичним розподілом) змінюється співвідношення між кількістю атомів Mn, що є одиничними й утворюють кластери-двійки (на користь останніх) [2]. Саме ці фактори й приводять до погіршення узгодження між теоретичними й експериментальними залежностями $1/\chi_{\text{Mn}}=f(T)$.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Давыдов А.Б., Носкова Л.М., Поникаров Б.Б., Угодникова Л.А. Магнитная восприимчивость соединения $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ // ФТП. - 1980. - **14**, №8. - С. 1461-1467.
2. Ляпилин И.И., Цидильковский И.М. Узкощелевые полумагнитные полупроводники // УФН. - 1983. - **146**, в.1. - С. 35-72.
3. Marshall M., Kreitman, Donald L. Barnett. Probability Tables for clusters of Foreign Atoms in Simple Lattices Assuming Next-Nearest-Neighbor Interactions // J. of Chemical Physics - 1965.- **43**, No.2. - P.365-371.
4. Furdyna J.K Diluted magnetic semiconductors // J. Appl. Phys. - 1988. - **64**, №4. - P.R29-R64.
5. Марьянчук П.Д. О природе кластеров в кристаллах $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Se}_y$ // Изв. вузов. СССР. Физика.- 1984. - **27**, №1. - С.122-124.
6. Гавалешко Н.П., Марьянчук П.Д., Падалко А.М. Особенности магнитной восприимчивости монокристаллов $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}_{1-y}\text{Se}_y$ // Изв. вузов. Физика. - 1991.-**34**, №4.- С.60-62.