

# Моделирование магнитных свойств кристаллов $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, легированных железом

М. Е. Куншин

Санкт-Петербургский государственный  
электротехнический университет  
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

kunshin.mark@gmail.com

П. В. Харитонский

Санкт-Петербургский государственный  
электротехнический университет  
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

peterkh@yandex.ru

**Аннотация.** Проведено теоретическое моделирование гистерезисных характеристик в двойниковых кристаллах  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, легированных железом. Раствор-расплавным методом получены пластинчатые кристаллы с линейными размерами до 2,5 мм и толщиной менее 100 мкм и с массовой долей гидроксида железа в начальном растворе-расплаве 0,10 и 0,61 г. Каждый из кристаллов является двойником с границей двойникования по плоскостям (101) или (100). Данные рентгеноструктурного анализа показали, что железо частично замещает атомы галлия. Структура кристаллов остается моноклинной. Магнитометрические данные и ЭПР-спектроскопия подтверждают эти выводы. Теоретическое моделирование гистерезисных характеристик позволяет предположить, что в кристаллах присутствует ферромагнитное (в общем смысле) состояние, обусловленное областью с поперечным размером порядка 50–100 мкм и содержащую границу двойникования.

**Ключевые слова:** оксид галлия; железо; двойникование кристаллов; ферромагнитное состояние

## I. ВВЕДЕНИЕ

Кристаллы оксида галлия  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> привлекают значительное внимание исследователей благодаря своим уникальным свойствам. Легирование этого материала железом представляет особый интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Твердый раствор  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Fe является перспективным разбавленным магнитным полупроводником. Одна из особенностей этого материала – возникновение ферромагнитного состояния при комнатной температуре, что открывает путь к созданию спинтронных устройств.

Целью данной работы является моделирование гистерезисных характеристик в двойниковых кристаллах  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, легированных железом, и анализ магнитных состояний, возникающих в таких структурах.

## II. ПОЛУЧЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ

Кристаллы были выращены раствор-расплавным методом [1], который является экономически более выгодным по сравнению с методом Чохральского. Процесс роста включал несколько этапов: приготовление смеси порошков MoO<sub>3</sub>, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Fe(OH)<sub>3</sub>, ее загрузку в платиновый тигель, нагрев и выдержку при температуре 1150°C, последующее охлаждение и удаление растворителя. В результате были получены пластинчатые кристаллы с линейными размерами до 2,5 мм и толщиной менее 100 мкм: Ga-Fe-0 без добавления гидроксида железа, Ga-Fe-0.1 с добавлением 0,10 г Fe(OH)<sub>3</sub> и Ga-Fe-0.61 с добавлением 0,61 г Fe(OH)<sub>3</sub> [2]. Исследование методами оптической и сканирующей электронной

микроскопии показало, что каждый из полученных кристаллов является кристаллом-двойником с границами двойникования по плоскостям (101) или (100). На рис. 1 и 2 приведены примеры оптических микрофотографий кристаллов.



Рис. 1. Кристалл Ga-Fe-0



Рис. 2. Кристалл Ga-Fe-0.61

Согласно данным монокристалльного рентгеноструктурного анализа в кристалле Ga-Fe-0.61, железо замещает атомы галлия в кристаллической решетке, а сама структура остается моноклинной (табл. I).

ТАБЛИЦА I.

Параметр	Значение
a, Å	5,81
b, Å	3,04
c, Å	12,22
$\beta$ , °	103,64
Расчетная химическая формула кристалла	Ga <sub>1,66</sub> Fe <sub>0,34</sub> O <sub>3</sub>

Данные рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) подтвердили наличие железа в поверхностном слое кристаллов Ga-Fe-0 и Ga-Fe-0.61 (табл. II).

ТАБЛИЦА II.

Химический элемент	Атомная доля, %	
	Ga-Fe-0	Ga-Fe-0.61
Ga	34,0	34,3
O	64,8	64,5
Fe	0,0	0,9
Mo	1,2	0,3

### III. МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Гистерезисные характеристики образцов представлены в табл. III.

ТАБЛИЦА III.

Fe	$M_s, 10^{-3}$ А·м <sup>2</sup> /кг	$M_{rs}, 10^{-3}$ А·м <sup>2</sup> /кг	$M_{rs}/M_s$	$\mu_0 H_c$ , мТл	$\mu_0 H_{cr}$ , мТл	$H_{cr}/H_c$
0,10	24	1,3	0,05	5,5	42,5	7,8
0,61	10	1,2	0,12	5,8	30,2	5,2

Магнитометрические данные и ЭПР-спектроскопия подтверждают выводы рентгеноструктурного анализа и позволяет сделать заключение о присутствии трех типов магнитного упорядочения: диамагнитное (матрица –  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), парамагнитное (вхождение Fe в структуру в тетраэдрические и октаэдрические позиции) и ферромагнитное. Причём ферромагнитное состояние вероятнее всего реализуется в области границы двойникования, так как там концентрация ячеек с замещением атомов галлия атомами железа наиболее высока. В этой области возникает ферромагнитное упорядочение, в то время как вдали от границы двойникования концентрация таких ячеек мала и обменного взаимодействия не возникает, то есть железо находится в парамагнитном состоянии. Следовательно, можно выделить область, внутри которой концентрация таких ячеек выше, и провести теоретический анализ гистерезисных характеристик с использованием модели ОДЭН (например, [3, 4]), учитывающей магнито-статическое взаимодействие между группами ячеек, связанных обменным взаимодействием (структура типа «разбавленный магнетик»).

Результаты численного моделирования эффективной намагниченности насыщения  $I_{s\ eff}$  ферромагнитного материала и эффективной намагниченности по остаточной намагниченности насыщения  $I_{rs\ eff}$ , а также полученные с использованием значений коэрцитивностей  $H_c$  и  $H_{cr}$  оценки констант кристаллографической анизотропии приведены в табл. IV.

ТАБЛИЦА IV.

Fe	$I_{s\ eff}$ , кА/м	$I_{rs\ eff}$ , кА/м	$c_f$ , %	$K_{hys}$ , Дж/м <sup>3</sup>	$K_u$ , Дж/м <sup>3</sup>
0,10	13	0,8	1,0	66	317
	27	1,6	0,5		659
	44	2,7	0,3		1074
	130	7,9	0,1		3172
0,61	5	0,7	1,0	29	87
	11	1,5	0,5		191
	18	2,5	0,3		312
	54	7,4	0,1		937

Согласно работе [5], посвящённой магнитным характеристикам гематита ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), можно оценить константу одноосной анизотропии по гистерезисным характеристикам:

$$K_{hys} = \frac{\mu_0 H_c M_s}{2}.$$

Так как при замещении атомов галлия атомами железа структурные параметры ячеек изучаемых кристаллов близки к соответствующим параметрам гематита, то можно считать, что их коэрцитивности также близки. Для магнитоупорядоченных областей в кристалле Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, вероятно, более строгой оценкой является константа одноосной анизотропии, связанная с коэрцитивностью и эффективной намагниченностью по остаточной намагниченности  $M_{rs}$ :

$$K_u = \frac{\mu_0 H_{cr} I_{s\ eff}}{2}.$$

В работе [6] исследовались образцы  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, предположительно содержащие антиферромагнитную фазу ( $\mu$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии, в которых ферромагнетизм проявляется при температуре выше комнатной. Ферромагнитная фаза предположительно возникла на границе раздела подложки и антиферромагнитной фазы. Обнаружено, что намагниченность насыщения ферромагнитной фазы сильно возрастает с увеличением шероховатости поверхности раздела. И наоборот, более гладкие границы раздела демонстрируют более слабый ферромагнитный отклик и более высокую плотность парамагнитных моментов, а также наличие суперпарамагнитных кластеров.

В нашем случае граница двойникования может служить интерфейсом (границей раздела) между в основном диамагнитной областью кристалла  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и ферромагнитной фазой подобной в рассматриваемой статье [5]. Тогда наиболее соответствующим значениям спонтанной намагниченности и константам анизотропии при данных концентрациях железа в растворе – расплаве являются:  $I_{s\ eff} \approx 20 - 50$  кА/м и  $K_u \approx 1000$  Дж/м<sup>3</sup>.

### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Раствор-расплавным методом впервые получены кристаллы  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, легированные железом. Массовая доля железа в начальном растворе-расплаве составляла 0,10 и 0,61 г.

Получены пластинчатые кристаллы с линейными размерами до 2,5 мм и толщиной менее 100 мкм. Каждый из кристаллов является кристаллом-двойником с границей двойникования по плоскостям (101) или (100).

Согласно данным рентгеноструктурного анализа железо замещает атомы галлия. Структура кристаллов остается моноклинной.

Магнитометрические данные и ЭПР-спектроскопия подтверждают выводы рентгеноструктурного анализа и позволяет сделать заключение о присутствии трех типов магнитного упорядочения: диамагнитное (матрица), парамагнитное (вхождение Fe в структуру в тетраэдрические и октаэдрические позиции) и ферромагнитное.

Теоретическое моделирование гистерезисных характеристик позволяет предположить, что ферромагнитное (в общем смысле) состояние обусловлено областью вблизи границы двойникования размерами порядка 50–100 мкм.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Благодарим сотрудников Физико-технического института имени А.Ф. Иоффе РАН Кицай А.А., Носова Ю.Г. и Николаева В.И. за предоставленные образцы кристаллов. Также благодарим доцента кафедры физики Земли Санкт-Петербургского государственного университета Сергиенко Е.С. за помощь в выполнении работ с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ («Геомодель», Центр Микроскопии и Микроанализа) и доцента кафедры микро- и нанoeлектроники Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) Гареева К.Г. за обсуждения и консультации.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ю.Г. Носов, С.В. Шапенков, О.Ф. Вывенко, А.А. Кицай, В.И. Николаев. Кристаллизация  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> из раствора-расплава и исследование полученных кристаллов методом катодолуминесценции // Физика и техника полупроводников. 2024. Т.58, вып. 10. С. 548–551.
- [2] Магнитные свойства кристаллов  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Fe, полученных методом выращивания из раствора-расплава / К.Г. Гареев, П.В. Харитонский, Е.С. Сергиенко, М.Е. Куншин, А.А. Кицай, Ю.Г. Носов, В.И. Николаев // Нанofизика и нанoeлектроника: Тез. докл. XXX Симпозиума, Нижний Новгород, 9–13 марта 2026 / Нижний Новгород, 2026. С. 144.
- [3] P.V. Kharitonskii, E.A. Setrov, A.Yu. Ralin. Modeling of hysteresis characteristics of a dilute magnetic with dipole-dipole interaction of particles // Materials Physics and Mechanics. 2024. 52, 2, 142.
- [4] P. Kharitonskii, A. Krasilin, N. Belskaya, S. Yanson, N. Bobrov, A. Ralin, K. Gareev, N. Zolotov, D. Zaytse and E. Sergienko. Superparamagnetism of Baked Clays Containing Polymorphs of Iron Oxides: Experimental Study and Theoretical Modeling // Magnetochemistry. 2025.11, 103.
- [5] A.P. Roberts, X. Zhao, P. Hu, A. Abrajevitch, Y. Chen, R. J. Harrison, D. Heslop, Z. Jiang, J. Li, Q. Liu, A. R. Muxworthy, H. Oda, H. St. C. O'Neill, B. J. Pillans and Tetsu. Magnetic Domain State and Anisotropy in Hematite ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) From First-Order Reversal Curve Diagrams // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 2021.126, e2021JB023027.
- [6] E. C. Hettiaratchy, J. S. Jamison, B. Wang, N. Bagués, R. A. Guest, D. W. McComb, and R. C. Myers. Interface-induced ferromagnetism in  $\mu$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> superlattices // Journal Vacuum Science & Technology A. 2020. 38, 063413.