

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

1 lutego 2023 r., o godz.10:00

odbędzie się seminarium **on-line (link podany jest na stronie IF PAN),**

na którym

dr Anna Ciechan

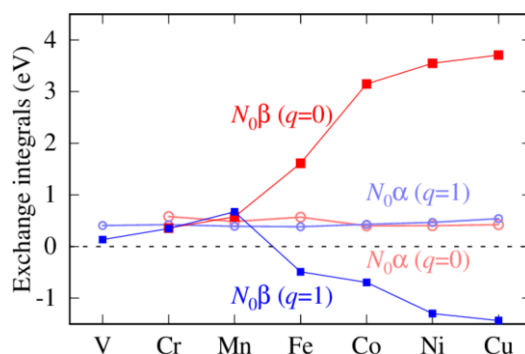
(Instytut Fizyki PAN)

wygłosi referat na temat:

“ Domieszki metali przejściowych w ZnO: sprężenie $s, p - d$ ”

Półprzewodnik ZnO domieszkowany metalami przejściowymi (TM) jest przedmiotem szerokich badań doświadczalnych i teoretycznych dotyczących stanów ładunkowych i spinowych domieszki, a także przejść optycznych w kryształach. W szczególności, oddziaływanie $s, p - d$ pomiędzy elektronami przewodnictwa/dziurami pasma walencyjnego a elektronami $3d$ domieszki stanowi jedną z istotnych charakterystyk rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych.

W wystąpieniu przedstawione zostaną wyniki obliczeń struktury elektronowej jonów metali przejściowych od Ti do Cu w ZnO otrzymane z teorii funkcjonału gęstości w ramach przybliżenia GGA+ U [1]. Użycie poprawek + U dla elektronów na powłokach $d(TM)$ oraz $p(O)$ pozwala na odtworzenie zarówno struktury pasmowej czystego ZnO, jak i poziomów domieszkowych TM. Znajomość rozszczepienia stanów pasmowych w domieszkowanym ZnO pozwala zaś na analizę oddziaływań magnetycznych $s, p - d$.



Stała wymiany $N_0\alpha$ dla oddziaływań $s - d$ jest prawie taka sama dla wszystkich jonów TM. Z kolei, stała sprężenia $N_0\beta$ dla oddziaływań $p - d$ zależy zarówno od domieszki jak i jej stanu ładunkowego. Idąc od V do Cu, stała $N_0\beta$ silnie rośnie co jest bezpośrednio związane z położeniem stanów domieszkowych względem wierzchołka pasma walencyjnego. Ponadto, dla Fe, Co i Ni, znak $N_0\beta$ zależy od stanu ładunkowego domieszki: $N_0\beta$ jest dodatnie wskazując na ferromagnetyczne oddziaływanie $p - d$ dla jonów TM^{2+} ($q = 0$), $N_0\beta$ jest ujemne a oddziaływanie $p - d$ antyferromagnetyczne dla jonów TM^{3+} ($q = 1$). Ponadto, stała $N_0\beta$ może być inna dla lekkich dziur i ciężkich dziur a nawet mieć przeciwny znak. Uzyskane wyniki wskazują na silne oddziaływania kulombowskie na powłoce $3d$, które wpływają na zależność położenia poziomów domieszkowych od ich stanu ładunkowego, a tym samym na oddziaływania $p - d$.

Na koniec, wyniki teoretyczne uzyskane dla sprężen będą porównane z doświadczeniem.

[1] A. Ciechan and P. Bogusławski, *Scientific Reports* (2021) 11:3848.

Serdecznie zapraszamy

**Roman Puźniak
Andrzej Szewczyk
Henryk Szymczak**