

# **SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA**

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

**14 grudnia 2016 r., o godz.10:00**

w sali 203 (bud. 1) odbędzie się seminarium, na którym

**Dr Anna Ciechan**

*Institut Fizyki PAN, Warszawa*

wyłosi referat na temat:

## **„Domieszki metali przejściowych w ZnO: metastabilność $Mn^{3+}$ i walencyjność jonów Fe”**

Półprzewodnik ZnO domieszkowany metalami przejściowymi jest przedmiotem intensywnych badań doświadczalnych dotyczących stanów ładunkowych i spinowych domieszki, a także przejść optycznych. Obliczenia DFT struktury pasmowej takich układów wymagają wyjścia poza standardowe przybliżenia dla oddziaływań korelacyjno-wymiennych i uwzględnienia dodatkowych efektów związanych z silną lokalizacją elektronów na powłoce d. Zaproponowany opis izolowanych jonów w ZnO został uzupełniony o człony typu Hubbarda +U i zweryfikowany z danymi doświadczalnymi.

Otrzymane wyniki wyjaśniają metastabilność jonów  $Mn^{3+}$  w procesie fotojonizacji, zaobserwowaną w pomiarach foto-EPR. W przypadku ZnO:Fe, poziom donorowy otrzymany w górnej części przerwy energetycznej odtwarza wartość energii aktywacji elektronów do pasma przewodnictwa uzyskaną w pomiarach transportowych. Wskazuje również na łatwą kompensację Fe ze stanu 2+ do 3+ przez nieintencjonalne akceptory w próbkach ZnO.

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak  
Henryk Szymczak  
Andrzej Wiśniewski