

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

5 grudnia 2018 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: właściwości magnetyczne i optyczne”

Półprzewodnik ZnO domieszkowany metalami przejściowymi (TM) jest przedmiotem intensywnych badań doświadczalnych dotyczących stanów ładunkowych i spinowych domieszki, a także przejść optycznych w kryształach.

W wystąpieniu przedstawione zostaną wyniki obliczeń struktury elektronowej jonów metali przejściowych 3d w ZnO otrzymane z teorii funkcjonału gęstości. Pokazane zostanie, jak pracują standardowe przybliżenia (LDA/GGA) dla oddziaływań korelacyjno-wymiennych i dlaczego nie dają one dobrych wyników w przypadku półprzewodników. Użycie poprawek +U typu Hubbarda dla elektronów na powłokach d(TM) oraz p(O) pozwala z kolei na odtworzenie zarówno struktury pasmowej czystego ZnO, jak i możliwych stanów ładunkowych i spinowych domieszek TM. Obliczone energie optycznych przejść wewnątrzpowłokowych i jonizacyjnych są zgodne z doświadczeniem.

Uzyskane wyniki wskazują na silne oddziaływania kulombowskie na powłoce 3d, widoczne w zależności położenia poziomów domieszkowych od ich stanu ładunkowego. Oddziaływanie to jest powodem metastabilności Mn³⁺ widocznej w pomiarach foto-EPR [1] oraz silnej zależności stałych wymiany p-d od stanu ładunkowego Fe, Co i Ni [2]. Analiza rozszczepienia spinowego poziomów TM serii TM=Ti, ..., Cu w ZnO również wskazuje na jego zależność od stanu ładunkowego domieszki, i ogólnie od oddziaływania wymiany między elektronami 3d [3].

[1] A. Ciechan, P. Bogusławski, Phys. Rev. B 94 (2016) 165143.

[2] J. Papierska et al., Phys. Rev. B 94 (2016) 224414.

[3] A. Ciechan, P. Bogusławski, Optical Materials 79 (2018) 264

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak
Henryk Szymczak
Andrzej Szewczyk