

УДК 621.7, 004.4

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА ЦИНКА.  
AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Студентки Зеленина М.С., Козлова О.А.,

*Научн. руководитель - канд. техн. наук, доцент, Стемпицкий В.Р.*

Белорусский государственный университет информатики  
и радиоэлектроники  
Минск, Беларусь

Помимо интересных электрофизических и оптических свойств, оксид цинка является материалом, проявляющим высокотемпературный ферромагнетизм. Ранее удавалось получать соединения на основе оксида цинка с температурой Кюри выше комнатной. Однако, результаты, полученные исследователями, не сводятся к единому выводу, а именно, если одна группа коллективов экспериментаторов получила проявление ферромагнетизма, то другая группа не смогла выявить его.

Высокотемпературный ферромагнетизм наблюдается у оксида цинка легированного переходными 3d элементами. Магнитные ионы примеси в узлах металлической подрешетки кристалла, вызывают проявление магнитных свойств. Следует заметить, что зависимость намагниченности насыщения легированных пленок оксида цинка от концентрации примеси магнитных ионов немонотонна: чем больше возможных степеней окисления у легирующих ионов, тем сложнее поведение концентрационной зависимости [1].

Исследования серии пленок ZnO:Co и ZnO, осажденных на подложках различных типов с помощью процесса MOCVD с использованием в качестве активного газа кислорода или водяного пара, показали, что решающее влияние на возникновение магнетизма в пленках ZnO:Co оказывает структура поверхности пленки, а не допирующая примесь [2]. Предполагается, что причиной ферромагнетизма низкоразмерных форм ZnO является нестехиометрия по кислороду.

Для анализа магнитного состояния наноструктуры используют современные методы зонных расчетов, основанных на теории функционала электронной плотности. Наиболее популярными сре-

ди них является первопринципный (*ab initio*) метод псевдопотенциалов, реализованный в программном пакете VASP.

Используя первопринципные методы, было подтверждено наличие ферромагнитных свойств у оксида цинка легированного переходными 3d элементами [3–5]. Однако особый интерес представляют случаи обнаружения подобных свойств у чистого ZnO.

Посредством программного комплекса VASP проведены расчеты магнитных свойств в чистом оксиде цинка с наличием точечных дефектов [6]. Построены суперячейки размером  $2 \times 2 \times 2$  ( $\text{Zn}_{16}\text{O}_{16}$ ) с внедрениями (вакансиями) атомов цинка и кислорода. Расчет производился в два этапа: структурная релаксация и расчет электронных и магнитных свойств материала. Обнаружено, что полный магнитный момент, приходящийся на суперячейку, отличен от нуля в случаях вакансии цинка либо при наличии внедренного атома кислорода. Основным магнитным состоянием системы при наличии таких точечных дефектов является ферромагнитное состояние.

Объектом изучения настоящей работы является оксид цинка. Как известно, пленки оксида цинка имеют зернистую структуру. В целях получения достоверных результатов теоретических расчетов, была воспроизведена модель границы зерна и проведено моделирование полученной структуры в программном комплексе VASP.

Межзеренную границу можно рассматривать как область, в которой осуществляется контакт двух кристаллов, различающихся только ориентацией. Граница зерен – атомный слой толщиной 1-2 атомных диаметра, по обе стороны от которого кристаллические решетки различаются только пространственной разориентацией.

Применяя подход, изложенный выше, была построена модель межзеренной границы, у которой угол разориентации между кристаллитами составляет десять градусов. На рис. 1 изображена структура после процесса релаксации.

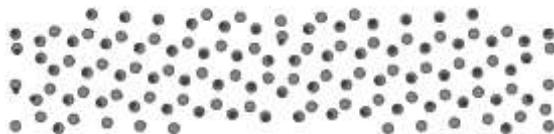


Рис. 1. Малоугловая модель границы зерна оксида цинка

Было получено подтверждение того, что межзеренная граница имеет свойства ферромагнетика. Магнитный момент равен  $2 \mu_B$ . Таким образом, в структуре существует система неспаренных электронов. На рисунке 2 представлено распределение намагниченности насыщения. Как видно, все неспаренные электроны локализованы на межзеренной границе.

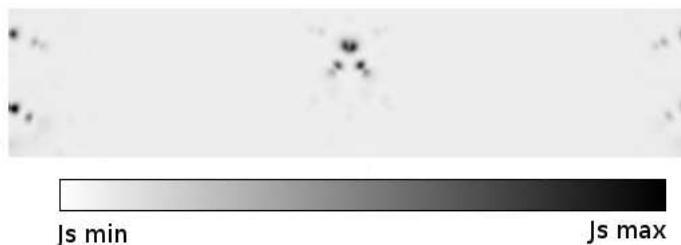


Рис. 2. Распределения намагниченности насыщения, в структуре моделирующей границу зерна оксида цинка

Причины их возникновения можно связать с нарушениями трансляционной симметрии системы, которые инициируют значительные зарядовые и спиновые перераспределения, а также обусловленные этим эффекты локализации-делокализации прифермевских электронов с образованием атомных магнитных моментов.

### *Литература*

1. Страумал Б. Б., Протасова С. Г., Мазилкин А. А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97, с. 415–426
2. Ивановский А. Л. // УФН. 2007. Т. 177, № 10, С. 1083–1104.
3. Byung-Sub Kang, Kwang-Pyo Chae. // J. Mag. 2012. 17 (3). 163–167.
4. Bin Shao, Hong Liu, Jian Wu et al. // J. Appl. Phys. 2012. 111, 07C301-07C301-3.
5. Bin Shao, Min Feng, Hong Liu et al. // J. Appl. Phys. 2013. 114, 07C728-07C728-3.

6. Xu Zuo, Soack-Dae Yoon, Aria Yang et al. // J. Appl. Phys. 2009. 105. 07C508-1-07C508-3.

УДК 004.9

## **ЦВЕТОВАЯ ПАЛИТРА ХУДОЖЕСТВЕННОЙ КНИГИ**

студент гр. 103610 Ходар М.С.

*Научный руководитель - канд. техн. наук, доцент Романюк Г.Э.*

Белорусский национальный технический университет

Минск, Беларусь

**Введение.** Ни один человек не станет спорить с тем, что различные цвета окружающие нас, тем или иным способом влияют на человека. И влияние это может оказывать не только психологическое воздействие, но и физиологическое. Ярким примером тому будет служить лимон. Стоит нам только посмотреть на этот яркий, желтый фрукт и у многих из нас появится желание скривить лицо или ощущение кислинки во рту. Ощущения и эмоции, вызываемые каким либо цветом, аналогичны ощущениям, связанным с предметом или явлением, постоянно окрашенным в данный цвет.

**Влияние цвета на человека.** Со времен развития науки были проведены многочисленные исследования в направлении влияния различных цветов на человека. К примеру, Р. Франсе, М. Сент-Джордж, В. Уолтон и др. [1, 2] в результате многочисленных исследований пришли к выводу, что существует биологическая врожденность предпочтений цветов. Так, дети в возрасте до одного года независимо от расы и места проживания обнаруживают одинаковые предпочтения: красный, оранжевый и желтый они предпочитают зеленому, голубому и фиолетовому. Среди подростков и взрослых цвета по своей популярности распределяются следующим образом: голубой, зеленый, красный, желтый, оранжевый, фиолетовый, белый.

Другие исследования в области маркетинга определяли реакцию потребителей на различные цвета той или иной продукции. Представлена часть результатов, полученных после исследования. [4]

Черный используют компании, которые гордятся классической изысканностью. Черный работает особенно хорошо для дорогих товаров. Код цвета: престиж, ценность, вечность, изысканность.