

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СПИН-ЗАВИСИМЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛА ОКСИДА ЦИНКА ОТ ВНЕШНЕЙ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ

студент гр. 5М2801 Зеленина М. С.,  
*Научный руководитель – канд. техн. наук Стемпицкий В. Р.*  
 Белорусский государственный университет  
 информатики и радиоэлектроники  
 Минск, Беларусь

В рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в программном комплексе VASP [1], исследована зависимость электронных свойств оксида цинка от внешней упругой деформации.

На первом этапе выполнены предварительные расчеты для определения сходимости энергии в зависимости от числа  $k$ -точек в зоне Бриллюэна и энергии обрезания. Установлено, что для процедуры согласования и расчета плотности электронных состояний необходимо использовать расчетную сетку  $8 \times 8 \times 8$   $k$ -точек и энергию обрезания - 550 эВ.

Согласно симметрии кристалла (пространственная группа  $R\bar{6}3\text{-mc}$ ) рассчитаны шесть независимых констант упругости, которые представлены в таблице 1. Для оценки полученных результатов представлены также экспериментальные данные ( $\mathcal{E}$ ), взятые из литературных источников [2], а также разница ( $\Delta$ ) данных из расчета ( $P$ ) и данных  $\mathcal{E}$  в процентах.

Таблица 1 – Константы упругости

Источник результатов	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{66}$
Эксперимент ( $\mathcal{E}$ )	195,4	111,2	92,5	199,8	39,6	42,1
Текущий расчет ( $P$ )	179,5	107,7	83,03	194,6	41,7	41,8
$\Delta, \%$	8,1	7,5	2,1	5,9	2,1	2,3

Как видно расхождение с экспериментальными данными не превышает десяти процентов. Этой точности достаточно для дальнейшего изучения оксида цинка находящегося под действием упругой деформации.

Системы деформировали посредством изменения постоянной решетки до 3 процентов от первоначального значения. При этом координаты атомов, значения которых, соответствуют деформированной системе «замораживались», т. е. при релаксации системы атомные позиции по направлению сжатия не менялись.

Пожалуй, самый распространенный случай деформации системы – это сжатие в одном направлении, т. е. одна из координат атомных позиций изменяется и фиксируется, две другие проходят процесс релаксации.

Проведены расчеты для систем моделирующие беспримесный объемный ZnO. Гексагональная сингония имеет ось вращения шестого порядка, сжатие вдоль которой, приводит к наиболее ощутимым последствиям. В пределах трех процентов сжатия вдоль оси вращения, значения ширины запрещенной зоны не изменялось. Деформация, вместе с ростом полной энергии, приводит к большому расщеплению энергетических уровней в зонной структуре твердого тела.

Качественно аналогичная картина наблюдается и для 2D деформации и для гидростатического сжатия. Расщепление зон наблюдается во всех случаях.

Качественно 2D деформация и гидростатическое сжатия (сжатие по всем направлениям) носит такой же характер, как и 1D деформации. Расщепление зон наблюдается во всех случаях.

Не один из типов деформации не приводит к значительному изменению ширины запрещенной зоны в идеальном кристалле ZnO. Так же полупроводник, не смотря на давление, во всех случаях остается прямымзонным. Магнитный момент в системах равен нулю.

Дальнейшее развитие исследований видется в изучении зависимости электромагнитных свойств упругодеформированного кристалла оксида цинка с примесями переходных металлов.

[1]Kresse, G., Marsman, M., & Furthmüller, J. // VASP the guide: tutorial. Vienna: University of Vienna, 2003

[2] Polian, A., Grimsditch, M. and Grzegory, I. (1996) Journal of Applied Physics, 79, 3343