

4,03 Å, в зависимости от размера ионов металла и халькогена. Эти величины на 15-25% больше, чем длины связей, в соединениях переходных металлов твердых веществ, что указывает на ограниченное энергетическое и пространственное перекрытие орбиталей в соединениях ХПМ. Кристаллографическая конфигурация металлов М в структуре ХПМ может быть как тригонально призматической, так и октаэдрической [6].

Разнообразный физико-химический состав квазидвухмерных структур на основе ХПМ предоставляет множество возможностей для использования электронных и магнитных свойств указанных соединений для широкого круга приложений микро- и наноэлектроники, в частности для устройств хранения энергии, каталитически активных элементов в оптоэлектронике, и в структурных компонентах микроэлектронных приборов. Однако остаются нерешенными ключевые проблемы, связанные с увеличением электрической проводимости и повышением стабильности квазидвухмерных структур, решение которых требует интеграции экспериментальных и теоретических исследований.

Список литературы

1. *Novoselov K. S. et al. // Science. 2011. Vol. 306. P. 666–669.*
2. *Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P.109–162.*
3. *Geim A. K. // Science Vol. 2009. Vol. 324. P. 1530–1534.*
4. *Li H. et al. // Small. 2012. Vol. 8. P. 63–67.*
5. *Castro Neto A. H. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 4382–4385.*
6. *Chhowalla M., Shin H.S., Eda G., Li L.-J., Loh K. P., Zhang H. // Nature chemistry. 2013. Vol. 5. P. 263–275.*

УДК 537.622.4

ФЕРРОМАГНЕТИЗМ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА ЦИНКА

М.С. ЗЕЛЕНИНА¹, О.А. КОЗЛОВА¹, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ¹, В.В. БАРКАЛИН²

¹*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь
nil44@bsuir.by*

²*Белорусский национальный технический университет
пр-т Независимости, 65, г. Минск, 220013, Республика Беларусь
barkaline@yahoo.com*

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.

Ключевые слова: граница зерна, оксид цинка, ферромагнетизм.

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 зависи-

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

Используя первопринципные методы, было в очередной раз 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 $2 \times 2 \times 2$ ($Zn_{16}O_{16}$) 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.

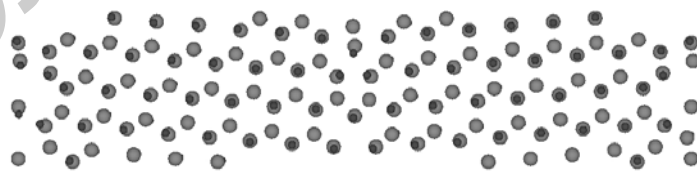


Рис. 1. Малоугловая модель границы зерна оксида цинка

Было получено подтверждение того, что межзеренная граница имеет свойства ферромагнетика. Магнитный момент равен 2 μ_B . Таким образом, в структуре существует система неспаренных электронов. На рис. 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 прифермиевских электронов с образованием атомных магнитных моментов.

Список литературы

1. Страумал Б. Б., Протасова С. Г. 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. 17C728-17C725-3.
6. Xu Zuo, Soack-Dae Yoon, Aria Yang et al. // J. Appl. Phys. 2009. 105. 07C508-1-07C508-3.

УДК 621.794.61

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ InAs И GaAs НАНОШНУРОВ

Д.А. ЯЦЫНО, Я.С. АРСИТОВ, Д.Б. МИГАС

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь
migas@bsuir.by

Результаты расчетов, проведенных с помощью метода из первых принципов, показали, что свойства $\langle 111 \rangle$ -ориентированных GaAs и InAs нанощнуров изменяются от металлических до полупроводниковых в зависимости морфологии наноструктур. Отсутствие $\{112\}$ граней в виде кромок между каждыми соседними $\{011\}$ гранями, которые характеризуют поверхность GaAs и InAs нанощнуров, приводит к появлению электронных состояний в запрещенной зоне, находящихся на уровне Ферми, и металлических свойств. В то время как наличие $\{112\}$ граней обеспечивает полупроводниковый характер электронных энергетических зон.

Ключевые слова: GaAs и InAs нанощнуры, морфология и зонная структура нанощнуров.

Полупроводниковые наноразмерные шнуры (нанощнуры) являются уникальными структурами для исследования квантоворазмерных эффектов и также представляют собой готовые элементы для изготовления электронных и оптоэлектронных приборов