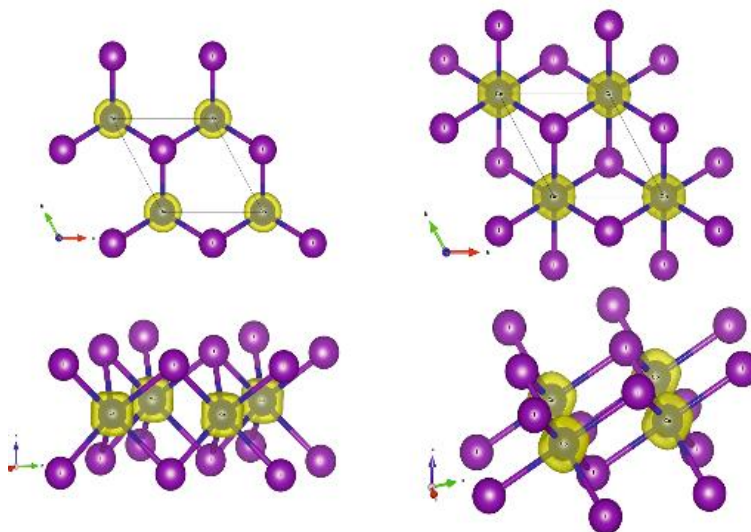


**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК
НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ***Мельчакова Ю.А.*Сибирский федеральный университет
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, д. 79

В данной работе изучен ряд дигалогенидов переходных металлов ($MeHal_2$, где $Me - V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$ $Hal - Br, I$) методами квантовой химии. Элементарные ячейки таких соединений представляют собой слоистые структуры, связанные между собой вдоль нормали к поверхности слабо, что позволяет предположить возможность их существования в планарном виде (см. рисунок). Все $MeHal_2$ являются магнитными плёнками, однако выводы, касающиеся их электронных свойств, разнятся в зависимости от выбранного функционала. В данной работе были проведены расчёты с использованием функционалов PBE и PBE+U, использующий поправку Хаббарда, учитывающую сильные электронные корреляции в исследуемых системах.



Структуры плёнок H-конфигурации (слева) и T-конфигурации (справа)

Наиболее энергетически стабильной конфигурацией относительно кристалла, согласно расчётам энергии систем, оказалась T-конфигурация, т.е. сохраняется расположение атомов такое же, как в объёмном виде. По результатам работы поправка Хаббарда влияет по большей части на ширину запрещённой зоны. Большинство плёнок проявляют полупроводниковые свойства различной степени. Лишь галогениды хрома и железа проявляют свойства спиновых полуметаллов, т.е. по одному из спиновых каналов проявляют металлические свойства, а по другому – полупроводниковые.