

Deformuotų SrRuO₃ plonųjų plėvelių modeliavimas taikant tankio funkcionalo teoriją

Modelling of strained SrRuO₃ thin films within density functional theory framework

Šarūnas Masys, Valdas Jonauskas

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
sarunas.masys@tfai.vu.lt

Nors per pastaruosius 50 metų pasaulinėje literatūroje pasirodė daugiau nei 1000 darbų, skirtų įvairiems SrRuO₃ tyrimams, šis perovskitinės struktūros oksidas nepalaukia dominės tyrėjų [1]. Susidomėjimas dar labiau išaugo, kuomet pavyko eksperimentiškai stabilizuoti SrRuO₃ tetragoninę ir/arba monoklininę fazes kambario temperatūroje taikant deformacijų inžinerijos metodus [2-5].

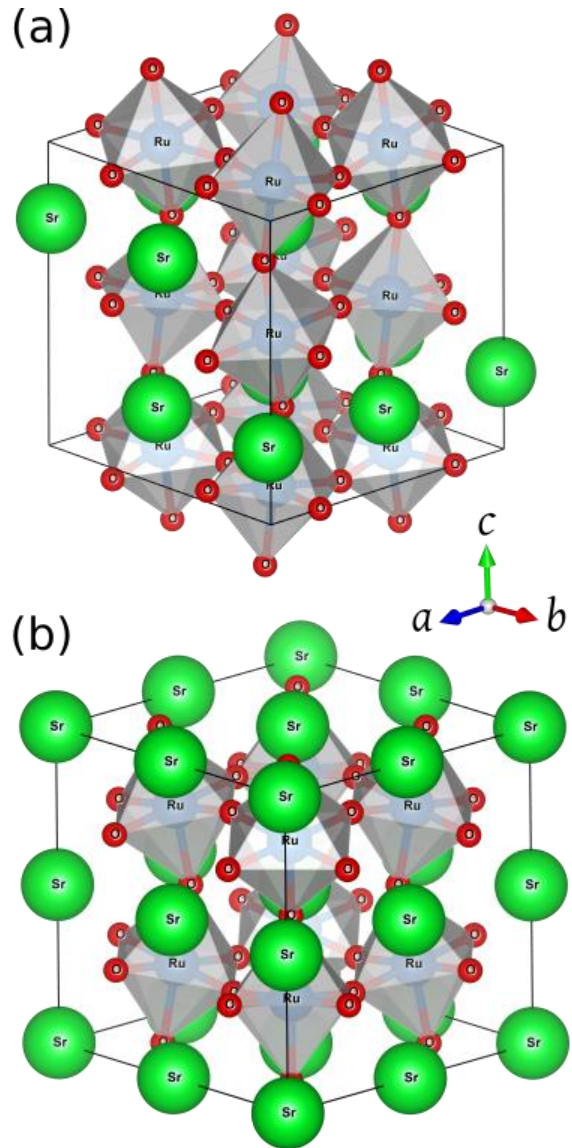
A. Vailiono ir kt. darbe [3] tyrinėjamas SrRuO₃ gardelės atsakas į gniuždymo ir tempimo deformacijas, kurios sukelia auginimas ant padėklų, pasižyminčių skirtingomis gardelės konstantomis. Esant gniuždymo deformacijai (SrTiO₃ padėklas), SrRuO₃ gardelė įgyja *P2₁/m* simetriją, tačiau tempimo deformacijos atveju (DyScO₃ padėklas) nustatyti tikslią sistemos simetriją nėra paprasta, nes skirtumai tarp galimų kandidatų (1 pav.) – *Cmcm* ir *I4/mmm* – yra pernelyg menki, kad juos būtų galima įvertinti eksperimentiškai. Tikslios SrRuO₃ gardelės simetrijos nustatymas (tuo pačiu ir priskyrimas RuO₆ oktaedrų pasisukimo sistemai) yra svarbus, nes ji gali smarkiai įtakoti medžiagos elektroninę ir magnetinę sandarą.

Laimei, šią problemą galima išspręsti teoriniu lygmeniu – atlikus abiejų SrRuO₃ simetrijų *ab initio* modeliavimą tankio funkcionalo teorijos rėmuose. Tuo tikslu buvo atlikti atitinkami teoriniai skaičiavimai CRYSTAL14 [6] kvantinės chemijos paketu. Pakaitinei-koreliacinei sąveikai aprašyti pasirinktas PBEsol funkcionalas [7] su 10% Hartree-Focko pakaitinės energijos dalimi, nes mūsų kristalinės sandaros įvertinimas rodo [8], jog tokia kombinacija itin tiksliai atkuria SrRuO₃ struktūrą. Gauti modeliavimo rezultatai yra pateikti 1 lentelėje.

1 lentelė. Pagal eksperimentinius matavimus [3] fiksuotos *Cmcm* ir *I4/mmm* simetrijų (1 pav.) gardelės konstantos ir atlikus dalinę optimizaciją apskaičiuoti jų pilnųjų energijų nuostoliai visiškai relaksuotos ortorombinės (pagrindinės būsenos) SrRuO₃ fazės atžvilgiu.

	<i>Cmcm</i>	<i>I4/mmm</i>
a (Å)	7,897	7,897
b (Å)	7,829	7,897
c (Å)	7,903	7,903
ΔE (meV/f.v.)	36,1	76,2

Iš čia matyti, kad esant tempimo deformacijai SrRuO₃ gardelei kur kas energetiškai naudingiau pasirinkti *Cmcm* nei *I4/mmm* simetriją, nes pastarosios energijos nuostolis apie 40 meV fomulės vienetui (f.v.) didesnis. Tokie rezultatai vienareikšmiškai išsklaido eksperimentinių matavimų metu kilusias abejones.



1 pav. Kristalinė (a) *Cmcm* ir (b) *I4/mmm* simetrijos SrRuO₃ sandara.

Reikšminiai žodžiai: tankio funkcionalo teorija, perovskitiniai kristalai, plonųjų plėvelių įtempis.

Literatūra

- [1] G. Koster *et al.*, Rev. Mod. Phys. **84**, 253 (2012).
- [2] K. J. Choi *et al.*, Adv. Mater. **22**, 759 (2010).
- [3] A. Vailionis *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 064101 (2011).
- [4] A. Herklotz *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 144412 (2013).
- [5] W. Lu *et al.*, Sci. Rep. **5**, 10245 (2015).
- [6] R. Dovesi *et al.*, Int. J. Quantum Chem. **114**, 1287 (2014).
- [7] J. P. Perdew *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008).
- [8] Š. Masys & V. Jonauskas, Lith. J. Phys. **57**, 78 (2017).