

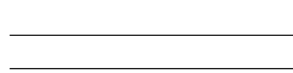
УДК 539.143.4

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В ДЕЛАФОССИТЕ CuAlO_2

Галимуллина С.И., Шарипова А.Р., Сафонова О.А., Ашихмин А.А.,
Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: apogoreltsev@rambler.ru, alrusha@yandex.ru*

Из проведенных нами ранее экспериментов с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах $^{63,65}\text{Cu}$ в полупроводниковом соединении CuAlO_2 (кристаллическая структура делафоссита) были определены



значения квадрупольной частоты ν_Q (28.12 МГц) и параметра асимметрии η ($\eta \sim 0$). Полученные в эксперименте квадрупольные параметры были использованы для исследования особенностей распределения электронной плотности (ЭП) в делафоссите CuAlO_2 в области ядра меди. На рис. 1 приведена диаграмма энергетических уровней для кластера $\text{Cu}_7\text{Al}_6\text{O}_{14}^{-1}$.



Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней для кластера $\text{Cu}_7\text{Al}_6\text{O}_{14}^{-1}$

Стрелками показаны заселенности уровней электронами со спином «вверх» и со спином «вниз». Величина щели LUMO-НОМО составляет $\Delta = 3.333421$ eV, что вполне согласуется с экспериментальными результатами. Однако, как видно из рисунка, верхний уровень валентной зоны полностью занят. И если предположить, что образец чистый не содержащий примесей, то не совсем ясен механизм p – проводимости данного соединения. В настоящее время в

данном направлении ведутся исследования. Были выполнены, в частности, расчеты энергетических диаграмм для дефектной структуры.