

## II-P-1.56

### NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC ĐIỆN TỬ CỦA KHOẢNG TRỐNG OXY TRONG VẬT LIỆU SRTiO<sub>3</sub> BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG AB INITIO.

Đỗ Đức Cường<sup>(1)</sup>, Huỳnh Thanh Nhân<sup>(1)</sup>, Hoàng Anh Tuấn Kiệt<sup>(2)</sup>

(1) Khoa Vật lý - Vật lý Kỹ thuật, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

(2) Trường ĐH Hoa Sen

#### Tóm tắt

Khoảng trống oxy (oxygen vacancy) là một trong những loại khuyết tật thường thấy trong vật liệu oxit. Sự hiện diện của khoảng trống oxy gây ảnh hưởng đáng kể tới tính chất vật lý và hóa học của vật liệu, đặc biệt ảnh hưởng mạnh lên tính chất vận chuyển của vật liệu (transport properties). Trong nghiên cứu này, chúng tôi thực hiện nghiên cứu ảnh hưởng của khoảng trống oxy lên cấu trúc điện tử của vật liệu oxit SrTiO<sub>3</sub> bằng phương pháp mô phỏng ab initio. Thông qua các tính toán về cấu trúc điện tử, mật độ điện tích và phân bố hạt tải ,..., chúng ta có thể hiểu được ảnh hưởng của khoảng trống oxy lên tính vận chuyển của vật liệu, từ đó giải thích được chi tiết nguyên nhân dẫn đến các sự thay đổi tính chất vận chuyển của vật liệu SrTiO<sub>3</sub> do sự hiện diện của khoảng trống oxy.

### ELECTRONIC STRUCTURE OF OXYGEN VACANCY IN SRTiO<sub>3</sub> USING AB INITIO METHOD.

#### Abstract

Oxygen vacancies are the common and fundamental point defect in metal oxides. The presence of this kind of defect has profound effects on the physical and chemical properties, especially in transport properties. In this study, we study effect of oxygen vacancy on electronic structure of SrTiO<sub>3</sub> by using ab initio method. Through the calculations of electronic structures, charge density and charge distribution,... we can understand effect of oxygen vacancy on transport properties of materials. From that, we can explain detail reasons which cause the changes of transport properties in SrTiO<sub>3</sub> due to oxygen vacancy.

#### References

- [1] Do Duc Cuong, Bora Lee, Kyeong Mi Choi, Hyo -Shin Ahn, Seungwu Han and Jaichan Lee, "Oxygen vacancy clustering and electron localization in oxygen deficient SrTiO<sub>3-d</sub> : LDA+U study," Phys. Rev. Lett. 98, 115503 (2007)
- [2] Hyo-Shin Ahn, Do Duc Cuong, Jaichan Lee, and Seungwu Han, "LDA+U study on fully relaxed LaTiO<sub>3</sub> and (SrTiO<sub>3</sub>)<sub>m</sub>(LaTiO<sub>3</sub>)<sub>n</sub> superlattice structures," J. Kor. Phys. Soc., 49 (4), 1536-1542 (2006)

---

Email liên hệ: [ddcuong@phys.hcmuns.edu.vn](mailto:ddcuong@phys.hcmuns.edu.vn)