

На правах рукописи

СМЕЛОВА Екатерина Михайловна



**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ И
ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ
НАНОКОНТАКТОВ И НАНОПРОВОДОВ**

Специальности: 01.04.07 - физика конденсированного состояния
01.04.11 - физика магнитных явлений

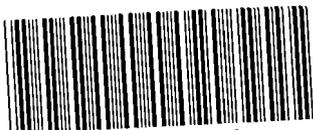
1 ФЕВ 2017

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени кандидата

физико – математических наук

Москва – 2016



006662574

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского Государственного Университета имени М. В. Ломоносова.

Научные руководители: Салецкий Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор

Клавсюк Андрей Леонидович, кандидат физико-математических наук

Официальные оппоненты: Успенский Юрий Алексеевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), заведующий сектором.

Спичкин Юрий Иванович, кандидат физико-математических наук, ООО «Перспективные магнитные технологии и консультации», генеральный директор.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет».

Защита состоится «16» февраля 2017 г. в 17 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.002.01 по специальностям «физика конденсированного состояния» и «физика магнитных явлений» при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, физический факультет, южная физическая аудитория.

С диссертацией можно ознакомиться в Отделе диссертаций Научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д.27) и на официальной странице диссертационного совета: <http://www.phys.msu.ru/rus/research/disser/sovnet-D501-002-01/>

Автореферат разослан «15» февраля 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 501.002.01
кандидат физико-математических наук



Лаптинская Т. В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы:

Спинтроника — это область квантовой электроники, в которой для физического представления информации наряду с зарядом используется спин частиц. Особый интерес для спинтроники представляют одномерные структуры — наноконтакты (НК) и нанопровода (НП), на основе которых возможно формирование высокоэффективных наносхем с малыми размерами и низким потреблением электроэнергии. В НК и НП существует возможность манипуляции спинами атомов, и как следствие, управление магнитными и проводящими квантовыми свойствами. Металлические НК и НП, обладающие магнитными свойствами, могут быть использованы в качестве устройств спинтроники, как своеобразные спиновые фильтры, пропускающие электроны преимущественно одной спиновой поляризации, так как ток в них может быть спин-поляризованным. Для использования одномерных структур в нанолитронике, необходимо оптимизировать методы создания наноструктур и усовершенствовать способы управления их квантовыми свойствами.

Одним из уникальных свойств одномерных наноструктур является квантовая электронная проводимость даже при комнатных температурах, когда ток через НК или НП может переноситься всего лишь одним электроном. Изучение электронных свойств одномерных наноструктур занимает важное место в современных научных исследованиях. Считается, что перспективными для спинтроники являются смешанные НК и НП из атомов переходных и благородных металлов (Au, Pt, Pd), обладающих низкой реакционной способностью, и атомов 3d элементов (Co, Fe, Ni), так как смешение с атомами 3d элементов может привести к появлению необычных магнитных свойств у системы в целом, таких как магнитная анизотропия или гигантское баллистическое магнетосопротивление.

Следует особо отметить, что такие смешанные системы могут обладать высокой структурной устойчивостью к внешним воздействиям различной природы, что является наиболее важным новым эффектом смешения элементов в наноструктурах для разработки новых устройств спинтроники и нанолитроники[1,2]. Изучение свойств НК необходимо не только для практического применения, но и для фундаментальной физики. В связи с тем, что экспериментальное получение и исследование одномерных структур на сегодняшний день сопряжено с большими затратами и является трудоемким и ресурсоемким процессом, важным становится теоретическое исследование процессов и особенностей формирования НК и НП, а также изучение их физических свойств[3,4].

Цели и задачи диссертационной работы

Основной целью работы является теоретическое изучение методами квантовой механики проводящих свойств одномерных биметаллических НК и НП, образованных из атомов благородных или переходных 3d-5d металлов, их взаимосвязи с геометрией системы, электронной структурой, магнитными и механическими свойствами, компонентным (элементным) составом. Изучение изменения электронной структуры НК и НП в процессе их формирования и роста в зависимости от компонентного состава и геометрии. Провести оценку возможности появления спин-поляризованного электронного тока в магнитных НК и НП.

В соответствии с заявленной целью были поставлены следующие задачи:

1. Установление взаимосвязи между механическими свойствами, свойствами электронной структуры, и геометрией биметаллических НК и НП из атомов 3d-5d металлов ($M = \text{Fe, Co, Pd, Pt, Au, Ag}$) в зависимости от их компонентного состава.
2. Исследование зависимости магнитных свойств биметаллических НК и НП от геометрии, химического компонентного состава, электронной структуры, деформаций «растяжения-сжатия», возникающих в процессе формирования одномерных структур.
3. Изучение проводящих свойств НК и НП, их зависимости от геометрии, химического компонентного состава НП или НК, деформаций «растяжения-сжатия», возникающих в процессе формирования одномерных структур;
4. Исследование взаимосвязи магнитных и проводящих свойств биметаллических НК и НП.

Научная новизна работы

В работе впервые проведено исследование методом первопринципной молекулярной динамики атомной структуры и квантовых свойств металлических однокомпонентных и смешанных НК и НП, изучено влияние атомной структуры и компонентного состава одномерных систем на их проводящие и магнитные свойства, получены следующие новые результаты.

1. Обнаружено новое явление в низкоразмерных структурах – формирование одномерных спиновых фильтров в двухкомпонентных НП Au-Co, Pt-Fe, на основании исследования электронной структуры одномерных наносистем объяснен механизм формирования состояния спинового фильтра в двухкомпонентных НП.
2. Обнаружена общая закономерность зависимости магнитных свойств от компонентного состава провода. В том числе при деформациях типа «растяжения-сжатия»

зарегистрирован переход из ферромагнитного в антиферромагнитное состояние во всех исследованных двухкомпонентных НП с железом в качестве второго магнитного компонента (Pd-Fe, Pt-Fe, Au-Fe); объяснен механизм существования данного перехода в одномерных НП.

3. Установлена зависимость проводящих свойств одномерных биметаллических НП от магнитных свойств, компонентного состава провода, его атомной структуры и геометрии.

4. Установлена зависимость геометрии двухкомпонентных НП от их компонентного состава.

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов подтверждается проверочными численными экспериментами, а также соответствием результатов экспериментальным данным и теоретическим расчетам.

Практическая ценность

Результаты теоретических исследований свойств атомной и электронной структуры, магнитных и проводящих свойств металлических однокомпонентных и смешанных НК и НП способствуют разработке новых устройств нанoeлектроники и спинтроники с потенциально важными магнитными, проводящими и механическими свойствами. В частности, при создании

1. устройств памяти на основе смешанных НП из атомов благородных и переходных металлов и ферромагнитных элементов с управляемыми магнитными и проводящими свойствами;

2. устройств записи информации на основе стабильных НП с управляемым переходом из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное, сопровождаемым изменением проводящих свойств системы;

3. спиновых переключающих устройств с экстремально малыми размерами (порядка нескольких Å) и с управляемыми проводящими свойствами;

Положения, выносимые на защиту:

1. Зависимость квантовой проводимости двухкомпонентных НП от типа магнитного упорядочения спинов атомов магнитных элементов в проводе.
2. Влияние химического состава и геометрии биметаллических НП на их электронные свойства и проводимость, приводящее к появлению или исчезновению спинполяризованного тока в НП.
3. Образование нового проводящего состояния - спиновый фильтр в Au-Co и Pt-Fe НП, которое обусловлено изменением электронной структуры в проводе.

4. Увеличение стабильности однокомпонентного (Pd, Pt, Au) провода при смещении с атомами (Fe, Co).
5. Магнитные свойства биметаллических НК и НП.

Апробация работы:

Вошедшие в диссертацию материалы докладывались и обсуждались на 14 конференциях:

- [1] XVI Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных "Ломоносов-2009", Москва (Россия), 8-12 Апреля (2009) (секция физика твердого тела)
- [2] VII национальная конференция «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии РСНЭ-НБИК-2009» Москва (Россия) 16-21 ноября (2009)
- [3] XVII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2010», Москва (Россия), 8-12 Апреля (2010)
- [4] Шестнадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых, Волгоград, (2010)
- [5] "The 2nd Russian-Japanese Young Scientists Conference on NanoMaterials and NanoTechnology", Tokyo, Japan, 21 - 22 septemer, (2010)
- [6] "19th International Symposium NANOSTRUCTURES: Physics and Technology" NANO-2011, Ekaterinburg, Russia, 20–25 June, (2011)
- [7] Moscow international symposium of magnetism "MISM-2011", Moscow (Russian Federation), 21-25 August (2011)
- [8] European Materials Research Society 2011 FALL MEETING E-MRS 2011, Warsaw (Poland) 19-23 September (2011)
- [9] VIII национальная конференция «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии РСНЭ-НБИК-2011» Москва (Россия) 14-18 ноября (2011)
- [10] the Joint European Magnetic Symposia (JEMS 2012), Parma, Italy, (2012)
- [11] XIV Всероссийская школа-семинар «Волны-2013», Москва, Россия, (2013)
- [12] Moscow international symposium of magnetism "MISM-2014", Moscow, Russian Federation, (2014)
- [13] "22-th International Symposium NANOSTRUCTURES: Physics and Technology" NANO-2014, Moscow, Russian Federation, (2014)
- [14] International Conference "Micro- and Nanoelectronics - 2016" ICMNE – 2016, (2016)

Результаты исследований обсуждались на научных семинарах кафедры общей физики физического факультета МГУ.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ и Министерства образования.

Публикации

По результатам исследований, представленных в диссертации, опубликовано 24 научные работы, список которых приведен в конце автореферата, в том числе 9 статей в реферируемых журналах из списка предложенного ВАК.

Личный вклад автора

Все изложенные в диссертационной работе оригинальные результаты получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **Введении** обоснована актуальность исследуемой проблемы, описано краткое содержание работы по главам.

В **Первой главе** проведено сопоставление полученных в диссертационной работе результатов с мировым уровнем исследований в области физики одномерных структур, сформулированы цели и задачи работы.

Во **Второй главе** описан метод теоретического исследования квантовых свойств одномерных структур, используемый в работе, а также описана модель и основные параметры вычислений. Исследование проведено методом первопринципной молекулярной динамики на основе теории функционала электронной плотности. Результаты исследований являются высоко точными и достоверными, так как проводятся в строго математической формулировке без использования различных подгоночных переменных и параметров. Для теоретических расчётов были использованы два программных кода: VASP и SMEAGOL. С помощью программы VASP проводились расчёты атомной структуры, геометрии и магнитных свойств исследуемых структур. Программа VASP итерационно решает самосогласованную систему уравнений Кона-Шема в базисе плоских волн [5], кроме того в вычислениях были использованы: приближение локальной плотности (ЛП) и обобщенного градиента (ОГ) для потенциала обменно-корреляционного взаимодействия. Расчет транспортных свойств проводился в работе с помощью первопринципного кода SMEAGOL [6,7,8], являющегося программной надстройкой программы SIESTA, основанной на методе локализованных атомных орбиталей (ЛКАО).

В **Третьей главе** приводятся основные результаты работы и их обсуждение.

Проведено теоретическое исследование квантовых свойств смешанных Au-Co и Au-Ag НК. В работе проведено исследование следующих конфигураций цепи контакта:

Au-Ag-Ag, Au-Co-Co, Ag-Au-Ag, Co-Au-Co, отличающихся положением атомов двух сортов вдоль цепи контакта. Были рассчитаны основные характеристики для исследованных Au-Co и Au-Ag НК: энергия связи, межатомные расстояния, сила разрыва НК и распределение электронной плотности в НК. Энергия связи вычислялась по формуле:

$$E = \frac{(E_n - E_{эл} - E_{цепи})}{3} \quad (1)$$

где E_n - полная энергия всей системы, $E_{эл}$ - энергия электродов, $E_{цепи}$ - сумма энергий изолированных атомов, входящих в трехатомный НК.

Обнаружено образование устойчивых связей между атомами разных элементов в цепи контакта, позволяющее объяснить причину стабилизации при больших значениях межатомных расстояний и увеличение его прочности. Установлено, что в НК полученных при смещении атомов Co и Au увеличивает прочность контакта по сравнению с чистым золотом (увеличивается значение силы, необходимой для разрыва НК, Таб. 1.), смещение атомов Ag и Au в цепи контакта приводит к увеличению диапазона межатомных расстояний, при которых возможно существование смешанного НК.

Таб. 1.

Сила разрыва НК, расстояние между атомами НК и схематическое представление НК в момент разрыва для конфигураций НК.

конфигурация	Сила разрыва НК	Расстояние между атомами НК в момент его разрыва			Схематическое представление НК
	F, 10^{-9} Н	a, Å	b, Å	d, Å	
Au-Au-Au	0.88	2.73	2.73	9.46	
Ag-Au-Ag	0.76	2.82	2.82	9.83	
Au-Ag-Ag	0.55	2.79	3.05	9.85	
Au-Co-Co	1	2.72	2.17	8.59	
Co-Au-Co	1.03	2.62	2.62	8.58	

Исследование структурной устойчивости смешанных нанопроводов.

Представленные выше результаты исследований НК послужили базой для проведения многоуровневого комплексного теоретического исследования квантовых свойств двухкомпонентных смешанных НП состоящих из атомов двух сортов: атомов благородных или поздних переходных 3d- и 5d- металлов, как базового элемента, и атомов магнитных элементов 3d- и 5d- металлов в качестве второго магнитного компонента. Результаты исследования атомной структуры смешанных проводов, состоящих из базовых

(Pd, Pt, Au) показало, что при сжатии всех смешанных НП происходит переход провода из линейной конфигурации в зигзаговую вне зависимости от сорта второго магнитного компонента.

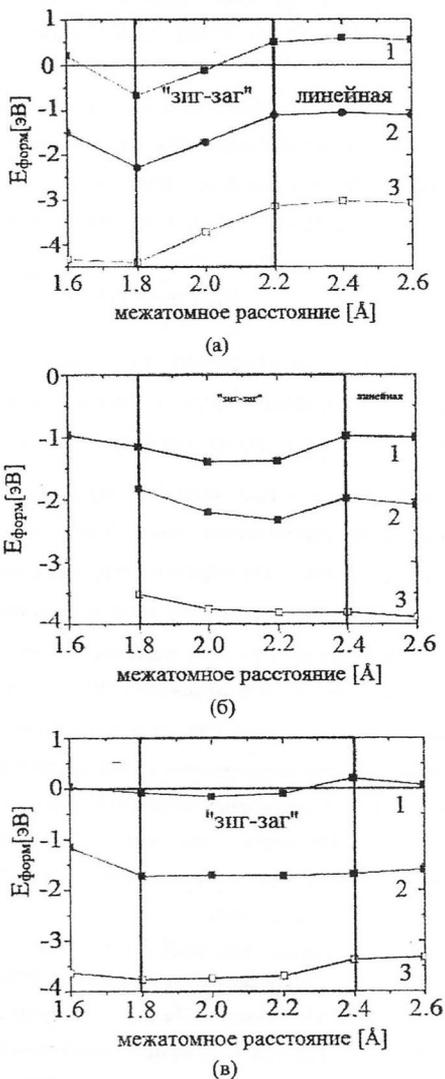


Рис.1. Зависимость энергии формирования ($E_{\text{форм}}$) биметаллических нанопроводов от среднего межатомного расстояния : Pt-Ni (1), Pt-Co (2), Pt-Fe (3) (а); Au-Ni (1), Au-Co (2), Au-Fe (3) (б); Pd-Ni (1); Pd-Co (2), Pd-Fe (3) (в).

Среднее межатомное расстояние для перехода смешанного провода в зигзаговую конфигурацию соответствует межатомному расстоянию перехода в зигзаговую конфигурацию однокомпонентных проводов базовых элементов (Pd, Pt, Au) и практически не изменяется при смене второго магнитного компонента провода (Co, Fe, Ni).

Для анализа эффективности смешения атомов в магнитных смешанных проводах были вычислены значения энергии формирования двухкомпонентного нанопровода. Энергия формирования ($E_{\text{форм}}(r)$) была рассчитана для одномерного смешанного НП при различных значениях среднего межатомного расстояния (r) по преобразованной формуле Мисдема, предложенной в работе [9] для трехмерных сплавов:

$$E_{\text{форм}}(r) = E_{\frac{1}{2}}(r) - E_{\text{осн}}(r) - \left(\frac{E_{\text{магн}}(r) - E_{\text{осн}}(r)}{4} \right) \quad (2)$$

- где $E_{\text{магн}}(r)$ - полная энергия однокомпонентного нанопровода из атомов магнитного металла (Fe, Co, Ni); $E_{\text{осн}}(r)$ - полная энергия однокомпонентного нанопровода из атомов основного элемента (Pd, Pt, Au); $E_{\frac{1}{2}}(r)$ - полная энергия смешанного НП. $E_{\text{форм}}(r)$ - это энергия, необходимая для встраивания одного элемента в другой.

На рис.1 представлены рассчитанные зависимости $E_{\text{форм}}(r)$ от среднего межатомного расстояния для всех рассмотренных конфигураций смешанных НП. Из рис. 1 видно, что $E_{\text{форм}}(r)$ зависит от величины среднего межатомного расстояния, геометрии провода и его компонентного состава. При этом результаты расчетов показывают, что наиболее выгодным является формирование смешанных НП в зигзаговой конфигурации. Как показали исследования, компонентный состав провода влияет на величину $E_{\text{форм}}$. При этом максимальные значения энергии формирования соответствуют смешанному проводу Pt-Fe (рис.1, а), кривая 3), т.е. формирование смешанных Pt-Fe НП является наиболее выгодным энергетически. Наименее выгодным является формирование двухкомпонентных нанопроводов с магнитным атомом никеля в качестве второго магнитного компонента (рис.1(а, б, в) кривая 3).

Магнитные свойства смешанных Pt-X, Pd-X, Au-X, (X= Fe, Ni, Co) НП

Исследование магнитных свойств двухкомпонентных смешанных нанопроводов, состоящих из атомов ряда 3d- и 5d- металлов. На рис.2, а) представлены зависимости величины магнитного момента провода от среднего межатомного расстояния r для исследованных НП. Из рис.2, а) видно, все исследованные НП обладают магнитным моментом, при этом его величина сильно зависит от геометрии провода. В работе показано, что в основном состоянии во всей области существования смешанные НП с

атомами Co и Ni в качестве второго магнитного компонента (Pt-Co, Pt-Ni, Pd-Co, Pd-Ni, Au-Co, Au-Ni) являются ферромагнитными.

Во всех смешанных (Pt-Fe, Pd-Fe, Au-Fe) НП с атомами Fe в качестве второго (магнитного) компонента при увеличении межатомных расстояний наблюдается переход из ферромагнитного состояния (E_{FM}) в антиферромагнитное (E_{AFM}), сопровождающийся трансформацией провода из конфигурации «зигзаг» в линейную. в (рис.2,б)).

На рис.2,б представлены зависимости разности полных энергий ферромагнитного и антиферромагнитного состояний провода $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$ от среднего межатомного расстояния. Смена базового элемента (Pt, Pd, Au) влияет на величину разности энергии $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$, а также на момент перехода из состояния ферромагнитного упорядочения в антиферромагнитное.

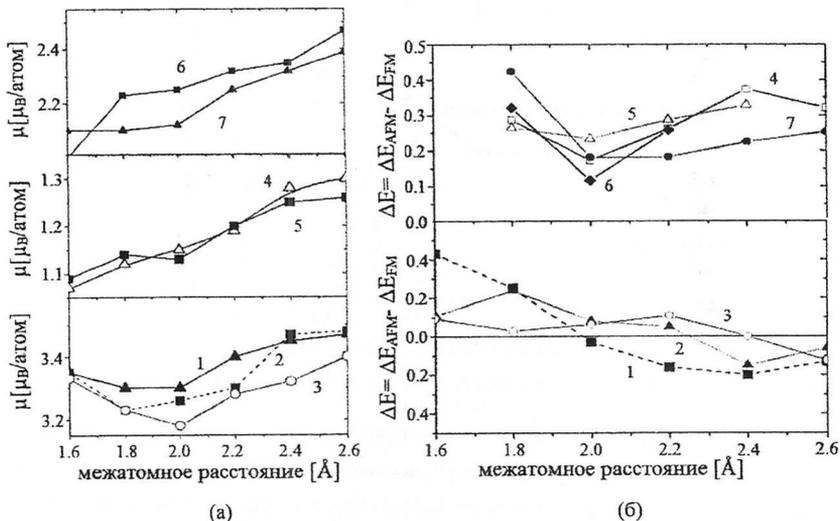


Рис.2. Зависимость магнитного момента НП (а) и ΔE (разность между полной энергией ферро- и антиферро- магнитных состояний в смешанных НП (б) от межатомного расстояния: (Pt-Fe (1), Pd-Fe (2), Au-Fe (3), Pt-Ni (4), Pd-Ni (5), Pd-Co (6), Pt-Co (7)).

Спиновая фильтрация и переход из ферромагнитного в антиферромагнитное состояние в смешанных Pt-Fe НП

В следующей части работы представлено подробное исследование магнитных свойств наиболее стабильных смешанных нанопроводов Pt-Fe, обладающих магнитным переходом при изменении геометрии провода. На рис. 3 представлена зависимость

локальных магнитных моментов атомов Pt и Fe при среднем межатомном расстоянии в проводе. Магнитный момент атомов Pt в Pt-Fe НП в конфигурации «зиг-заг» составляет 0.6мдв, что хорошо согласуется с исследованиями магнитных свойств Pd и Pd-Fe НП [10]. В то же время магнитный момент атомов Pt резко уменьшается до 0мдв в линейных Pt-Fe НП в антиферромагнитном состоянии.

Для объяснения появления ферромагнитного перехода провода при увеличении и уменьшении межатомного расстояния были рассчитаны ППС в Pt-Fe НП в ферромагнитном, а также антиферромагнитном состояниях. Расчеты зонной структуры показали, что основной вклад в ферромагнитный переход вносит $s-d_z^2$ гибридная зона. Рис. 4 иллюстрирует структуру $s-d_z^2$ гибридной зоны между атомами Pt и Fe провода для зигзагового НП в ферромагнитном состоянии (рис.4, а), а также для линейного Pt-Fe НП в антиферромагнитном состоянии (рис. 4, б)).

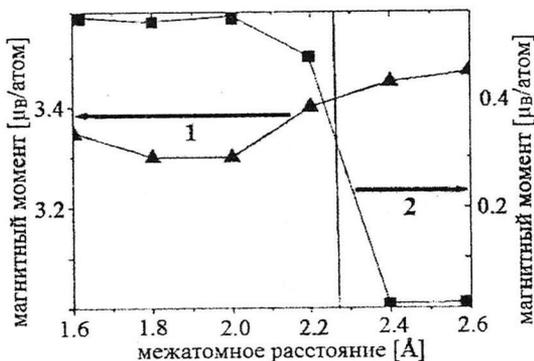


Рис.3. Значения магнитных моментов атомов Fe (1) и Pt (2) в зависимости от среднего межатомного расстояния.

Рис. 4, а) иллюстрирует ПС для $s-d_z^2$ гибридной зоны атомов Pt и Fe провода в ферромагнитном состоянии для межатомного расстояния 2.2 Å. В связи с отклонением Pt и Fe атомов от оси провода в зигзаговой конфигурации в проводе появляется прямое обменное взаимодействие между атомами Fe, что стабилизирует ферромагнитное упорядочение в Pt-Fe НП.

В случае антиферромагнитного упорядочения атомов железа в линейном проводе зонная структура Pt-Fe НП сильно меняется. На рисунке 4,б представлена ППС ($s-d_z^2$) для растянутых линейных Pt -Fe НП в антиферромагнитном состоянии при межатомном расстоянии 2.5 Å. Как видно, две сложные гибридные энергетические зоны, образованы в результате перекрытия орбиталей Pt и Fe атомов. Формирование этой сложной структуры гибридных зон в проводе приводит к появлению косвенного обменного

взаимодействия [11] между атомами железа через состояния атомов платины, что приводит к образованию стабильных антиферромагнитных решений.

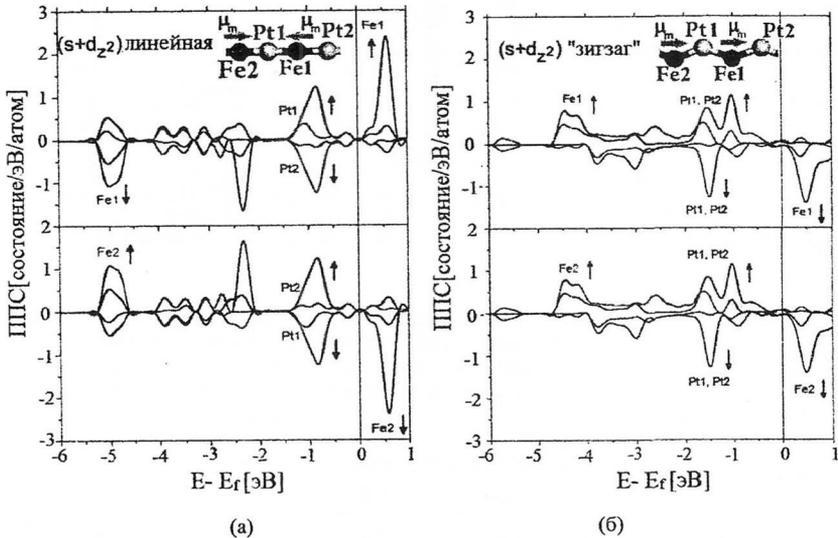


Рис.4. Зависимость ППС от $E - E_f$ для $(s-d_2)$ -состояний атомов Pt и Fe в Pt-Fe НП для: конфигурации «зигзаг» при межатомном расстоянии 2.2\AA (а), линейного НП при межатомном расстоянии 2.5\AA (б).

Проводимость равномерно смешанных Pt-Fe нанопроводов

Необычное поведение Pt-Fe НП в области перехода из линейной конфигурации в зигзаговую и наличие в них магнитного перехода, послужило поводом к проведению детального исследования взаимосвязи магнитных и проводящих свойств одномерных Pt-Fe НП. Проводимость магнитных Pt-Fe НП вычислена во всем диапазоне межатомных расстояний, соответствующих области существования смешанных НП ($1.2\text{\AA} - 2.6\text{\AA}$). Обнаружено два режима проводимости в конфигурациях «зиг-заг» Pt -Fe НП: «состояние с высокой проводимостью» (рис.5, а) и «состояние с низкой проводимостью» (рис.5, б) с неизменными значениями проводимости в диапазоне $(1.6 - 2.3\text{\AA})$.

Расчеты полной энергии показали, что $\Delta E = E_{\text{НТС}} - E_{\text{ЛТС}}$ между энергиями «состояние с низкой проводимостью» ($E_{\text{ЛТС}}$) и «состояние с высокой проводимостью» ($E_{\text{НТС}}$) провода изменяется при увеличении и уменьшении межатомных расстояний провода.

В Таб. 2 представлены значения разности энергий ΔE для характерных значений средних межатомных расстояний γ между атомами в НП и значения (x) , соответствующего степени сжатия провода перпендикулярно его оси.

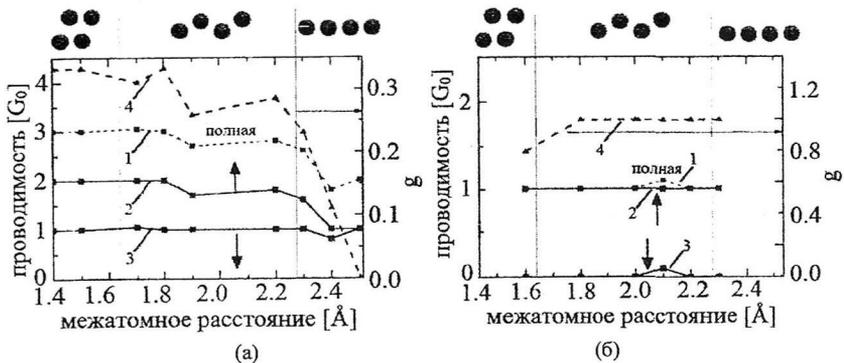


Рис.5. Полная квантовая проводимость Pt-Fe нанопровода (1), спин-поляризованная проводимость каналов со спином-вверх (2) и со спином-вниз (3), а также степень спиновой поляризации квантового электронного транспорта (g) в зависимости от среднего межатомного расстояния (4): состояние «с высокой проводимостью» (а), состояние «с низкой проводимостью» (б).

Таб. 2.

Разность энергий (ΔE), деформация (x) и среднее межатомное расстояние (d) в Pt-Fe НП.

$r(\text{Å})$	1.6	1.8	2.2	2.3
$x(\text{Å})$	1.7	1.4	0.9	0
$\Delta E(\text{эВ})$	0.942	0.153	0.216	0

Разность энергий (ΔE) принимает значение 0 эВ для практически линейного нанопровода при межатомных расстояниях порядка 2.3 Å, и возрастает до 1 эВ в конфигурации двух взаимодействующих НП при межатомном расстоянии порядка 1.6 Å. Таким образом, «состояние с низкой проводимостью» является основным для конфигурации «зиг-заг» Pt-Fe НП. В линейном НП (> 2.3 Å) основное состояние соответствует значению проводимости $2G_0$ и «состояние с низкой проводимостью» исчезает, то есть в смешанных Pt-Fe НП для конфигурации «зиг-заг» в зависимости от межатомного расстояния может существовать состояние как с «низкой», так и с «высокой» проводимостью.

Для объяснения магнитных свойств и появления спинового фильтра в смешанных Pt-Fe НП проведено подробное исследование зонной структуры НП. На рис. 6 представлена ППС для Pt-Fe НП в конфигурации «зигзаг». В зонной структуре Pt-Fe НП образуются три гибридные зоны: $d_{xy}-d_x^2$, $s-d_z^2$ и $d_{xz}-d_{yz}$. В состоянии спинового фильтра («состояние с низкой проводимостью») образуется (рис. 7, б) только $d_{xz}-d_{yz}$ гибридная зона на уровне Ферми. Эта зона дает основной вклад в полную ПС на уровне Ферми.

Новая- d_{xz} - d_{yz} гибридная зона образована перекрытием электронных орбиталей в плоскости, ортогональной к оси провода

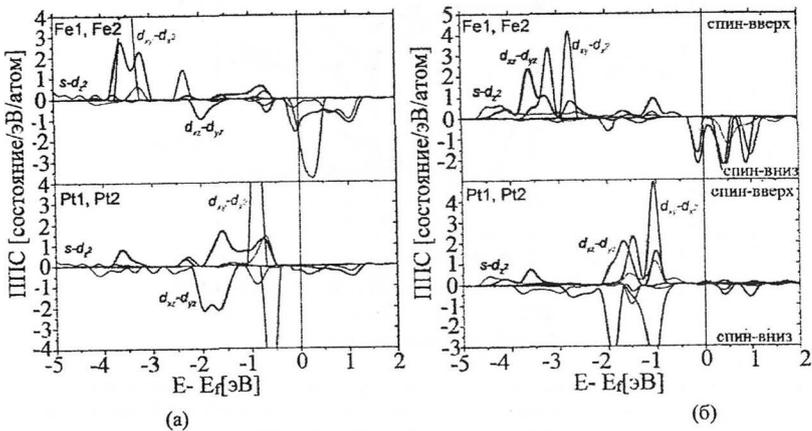


Рис.6. Зависимость ППС атомов Fe и Pt в проводе в зигзаговой конфигурации при среднем межатомном расстоянии 2.2Å от $E - E_f$: спин-поляризованное состояние («состояние с высокой проводимостью») (а) и спиновый фильтр («состояние с низкой проводимостью») (б).

Проводимость равномерно смешанных Au-Co нанопроводов

Последняя часть этой работы посвящена изучению спин-поляризованного электронного транспорта в магнитных Au-Co смешанных НП.

Для количественной оценки спиновой поляризации электронного транспорта через НП определим степень спиновой поляризации [12]:

$$g = \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}} \quad (3)$$

На рис. 7, кривая 4 представлена зависимость g от межатомного расстояния для Au-Co провода. Степень спиновой поляризации (g) возрастает до 0.99 для Au-Co НП (см. рис.8, кривая 4). Таким образом, расчеты спектров проводимости показали, что Au-Co НП в конфигурации «зиг-заг» представляет собой спиновый фильтр. Исследование зависимости проводящих свойств от геометрии и атомной структуры провода показало исчезновение спиновой поляризации электронного транспорта в линейном растянутом Au-Co НП, значения проводимости через каналы со спином вверх и со спином вниз одинаковы и составляют $1G_0$ (рис.7, кривые 2, 3) во всем диапазоне (2.4 Å - 2.8Å) существования линейной конфигурации нанопровода.

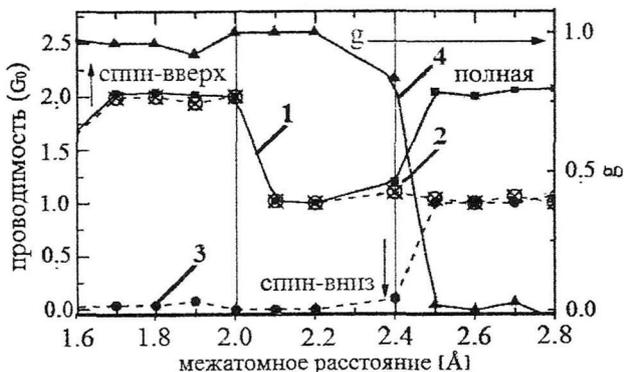


Рис.7. Зависимость проводимости в Au-Co проводе: полная проводимость (1), спин-поляризованная проводимость состояния со спином вверх(2) и со спином вниз (3) а также степень спиновой поляризации (g) квантового электронного транспорта(4) от межатомного расстояния.

В Заключение сформулированы основные результаты и выводы:

1. Показано, что в смешанных НК в исследованных конфигурациях (Ag-Au-Ag, Au-Ag-Ag, Co-Au-Co, Au-Co Co) добавление атомов Co увеличивает прочность контакта по сравнению с чистым золотым (увеличивается значение силы, необходимой для разрыва НК), а добавление атомов Ag приводит к увеличению диапазона межатомных расстояний, при которых возможно существование смешанного НК.

2. В смешанном НК конфигурации Au-Co-Au на расстояниях больше 10.56 Å происходит вытягивание атомов золота из электродов с образованием стабильных (по сравнению с чистыми золотыми НК) смешанных 5-ти атомных НК.

3. Смешение атомов благородных (Au) и переходных металлов (Pt, Pd) с атомами магнитных элементов приводит к стабилизации провода и повышению его устойчивости к деформациям «растяжения-сжатия».

4. Формирование стабильных одномерных сплавов наблюдается даже для тех элементов, которые не сплавляются в кристаллическом массиве – Au-Co. Во всех биметаллических нанопроводах при сжатии и переходе провода в конфигурацию «зиг-заг» происходит значительное уменьшение энергии его формирования. При этом наиболее выгодным является формирование биметаллических нанопроводов с атомами Fe или Co в качестве второго магнитного компонента.

5. Биметаллические нанопровода, образованные из атомов Pt, Pd, Au в качестве базового элемента и атомов Co, Fe, Ni в качестве второго магнитного компонента

обладают магнитными свойствами. Максимальные значения магнитного момента соответствуют нанопроводам типа Pd-, Pt-, Au-Fe, что свидетельствует о максимальной намагниченности биметаллических одномерных систем с железом в качестве второго компонента.

6. Для биметаллических нанопроводов с атомами Fe в качестве второго магнитного компонента (Pt-Fe, Pd-Fe, Au-Fe) при растяжении наблюдается переход из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное, сопровождающийся трансформацией провода из конфигурации «зиг-заг» в линейную.

7. Обнаружена зависимость проводящих свойств одномерных Pt -Fe нанопроводов от их геометрии. Обнаружено появление спиновой поляризации электронного транспорта в “зиг-заг” конфигурации НП при ферромагнитном упорядочении магнитных моментов атомов железа и ее исчезновение в линейном Pt -Fe нанопроводе с одинаковым в обоих случаях значением проводимости $1 G_0$.

8. Обнаружено два режима проводимости в «зигзаговых» конфигурациях Pt -Fe нанопроводов: «высокопроводящее состояние» и «низкопроводящее состояние». Для «высокопроводящего состояния» величина проводимости через спин-вверх канал порядка $2 G_0$, а через спин-вниз канал $1 G_0$. Для «низкопроводящего состояния» транспорт есть только через спин-вверх канал на уровне Ферми ($\sim 1 G_0$), транспорт через спин-вниз канал равен нулю. («низкопроводящее состояние» является основным состоянием для «зигзаговой» конфигурации Pt -Fe нанопроводов).

9. Расчеты проводимости показали, что «низкопроводящее состояние» Au-Co и Pt-Fe нанопроводов представляет собой спин-фильтр систему.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- [1] Andrei Sokolov, Chunjuan Zhang, Evgeny Y. Tsybmal, Jody Redepenning, Bernard Doudin, *Nature Nanotechnology*, 2, 171-175 (2007)
- [2] Stefan Egle, Cecile Bacca, Hans-Fridtjof Pernau, Magdalena Huefner, Denise Hinzke, Ulrich Nowak, Elke Scheer, *Phys. Rev. B*, 81, 134402 (2010)
- [3] S. Di Napoli, A. Weichselbaum, P. Roura-Bas, A. A. Aligia, Y. Mokrousov, S. Blugel, *Phys. Rev. Lett.* 110, 196402 (2013)
- [4] Renato B. Pontes, E. Z. da Silva, A. Fazzio, Antonio J. R. da Silva, *J. AM. CHEM. SOC.*, 130, 9897-9903(2008)
- [5] W. Kohn and L.J. Sham., 140:A1133, (1965)
- [6] S. Sanvito, to appear on : "Handbook of Computational Nanotechnology"
- [7] S. Sanvito, C.J. Lambert, J.H. Jefferson, A.M Bratkovsky, *Phys. Rev. B*, 59, 11936 (1999)
- [8] A. R. Rocha, V. M. Garc'ia-Su'arez, S. Bailey, C. Lambert, J. Ferrer, S. Sanvito, «The Smeagol method for spin- and molecular-electronics», *Phys. Rev. B*. 73, 085414 (2006)
- [9] A. R. Miedema, P. F. de Shatel, F. R. de Boer, *Physica* 100B, 1-28 (1980)
- [10] Tsysar K.M., Bazhanov D.I., Smelova E.M., Saletsky A.M., *Phys. Status Solidi B*, том 251, № 4, с. 871-876,(2014)
- [11] G. A. Sawatzky, W. Geertsman and C. Haas, *J. Magn. Magn. Mater.*, 3, 37, (1976)
- [12] V. Repain, J. M. Berroir, S. Rousset, J. Lecoer, , *Surf. Sci.*, 447, L152 (2000)

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Е.М. Smelova, К. М. Tsysar, А. М. Saletsky, Emergence of spin-filter states in Pt-Fe nanowires // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014, 16, с.8360-8366.

2. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, Атомная и электронная структуры смешанных проводов Au и Co. Исследование методом первопринципной молекулярной динамики // *Письма в ЖЭТФ*, 2011, том 93, вып. 3, с. 139-142.

3. К. М. Tsysar, D. I. Bazhanov, E. M. Smelova, A. M. Saletsky, Emergence of giant magnetic anisotropy in freestanding Au/Co nanowires // *Applied Physics Letters*, 2012, 101, с. 043108.

4. К. М. Цысарь, Е. М. Смелова, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, Влияние деформаций растяжения-сжатия на состояние магнитного упорядочения смешанных Pd-Fe нанопроводов // *Письма в ЖЭТФ*, 2011, том 94, вып. 3, с. 246-251.

5. К. М. Tsysar, D. I. Bazhanov, E. M. Smelova, A. M. Saletsky, Effect of alloying of magnetic and non-magnetic low reactivity atoms into atomic chain, // *Phys. Status Solidi B*, том 251, 2014, № 4, с. 871-876.

6. Е. М. Смелова, А. Л. Клавсюк, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, Исследование механических и электронных свойств Ag-Au и Co-Au наноконтактов методом первопринципной молекулярной динамики // *Вестник Московского Университета Серия 3. Физика. Астрономия*, 2013, №1, с. 88-91.

7. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, Электронная квантовая проводимость в биметаллических Pt-Fe нанопроводах // *Известия РАН, Серия физическая*, 2014, 78, № 2, с. 149-151.

8. А. Л. Клавсюк, С.В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, Моделирование процессов формирования металлических наноконтактов методом молекулярной динамики // *Физика Твёрдого Тела*, 2011, том 53, вып.11, с. 2237-2242.

9. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий, Исследование механических свойств палладиевых наноконтактов методом молекулярной динамики // *Письма в ЖЭТФ*, 2010, том 91, вып. 3, с.169-172.

10. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, Исследование квантовых свойств золотых наноконтактов // *Сборник тезисов XVI Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных "Ломоносов-2009"*, Москва (Россия), 8-12 Апреля, 2009, (секция физика твердого тела),

11. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, Исследование свойств атомной и электронной структуры золотых наноконтактов из первых принципов // *Сборник тезисов VII национальной конференции «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии РСНЭ-НБИК-2009»*, Москва (Россия) 16-21 ноября, 2009, с.521.

12. К. М. Цысарь, Е. М. Смелова, Исследование квантовых свойств золотых наноконтактов // Сборник тезисов XVII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2010», Москва (Россия), 8-12 Апреля , 2010.
13. A. L. Klavysyuk, S. V. Kolesnikov, E. M. Smelova and A. M. Saletsky, Structure, quantum effects and magnetism in transition metal nanocontacts, // Abstracts book of The 2nd Russian-Japanese Young Scientists Conference on NanoMaterials and NanoTechnology", Tokyo, Japan, 21 - 22 septemer, 2010, с.2.
14. А. Л. Клавсюк, С.В. Колесников, Е.М. Смелова, А.М. Салецкий, Механические свойства атомных палладиевых контактов, // Сборник тезисов шестнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, Волгоград, 2010, с. 108.
15. К. М. Tsysar, E. M. Smelova, D. I. Bazhanov, A.M. Saletsky, The emerging of giant magnetic anisotropy in Au-Co nanowires // Abstracts book of "19th International Symposium NANOSTRUCTURES: Physics and Technology" NANO-2011, Ekaterinburg, Russia, 20–25 June, 2011.
16. К. М. Tsysar, E. M. Smelova, D. I. Bazhanov, A. M. Saletsky, The emerging of giant magnetic anisotropy in Au-Co nanowires // Abstracts book of Moscow international symposium of magnetism "MISM-2011", Moscow (Russian Federation), 21-25 August (2011), с.145.
17. К. М. Tsysar, E.M. Smelova, D. I. Bazhanov, A. M. Saletsky, GIANT MAGNETIC ANISOTROPY IN MIXED AU-CO NANOWIRES // Abstracts book of European Materials Research Society 2011 FALL MEETING E-MRS 2011, Warsaw (Poland) 19-23 September, 2011.
18. К. М. Цысарь, Е.М.Смелова, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, Анизотропия магнитных свойств смешанных au-co нанопроводов // Сборник тезисов VIII национальной конференции «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии РСНЭ-НБИК-2011» Москва (Россия), 14-18 ноября, 2011.
19. Е. М. Смелова, К. М. Цысарь, Д. И. Бажанов, А. М. Салецкий, Исследование особенностей формирования Au и смешанных Au-Co наноконтактов между двумя золотыми электродами // Сборник тезисов VIII национальной конференции «Рентгеновское, Синхротронное излучения, Нейтроны и Электроны для исследования наносистем и материалов Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии РСНЭ-НБИК-2011» Москва (Россия) 14-18 ноября, 2011.
20. К. М. Tsysar, E. M. Smelova, D. I. Bazhanov, A. M. Saletsky, Giant magnetic anisotropy in Au/Co nanowires, // Abstracts book of the Joint European Magnetic Symposia (JEMS 2012), Parma, Italy, 2012.
21. К. М. Цысарь, Е.М. Смелова, А.М. Салецкий // Сборник тезисов XIV Всероссийской школы-семинара «Волны-2013», Москва, Россия, 2013.
22. Е. М. Smelova, К. М. Tsysar, A. M. Saletsky, Emergence of spin-filter states in Pt-Fe nanowires // Abstracts book of Moscow international symposium of magnetism "MISM-2014", Moscow, Russian Federation, 2014.
23. Е. М. Smelova, К. М. Tsysar, A. M. Saletsky, Theoretical Study of the Emergence of Spin-Filter State in One-Dimensional Pt-Fe Bimetallic Nanowires // Abstracts book of 22-th International Symposium NANOSTRUCTURES: Physics and Technology" NANO-2014, Moscow, Russian Federation, 2014.
24. К. М. Tsysar, E. M. Smelova, A. M. Saletsky, Unique Magnetic Properties of Bimetallic Nanowires for Application in Spintronic and Nanoelectronics, // Abstracts book of 22-th International Symposium NANOSTRUCTURES: Physics and Technology, NANO-2014, Moscow, Russian Federation, 2014.

Подписано к печати 28.12.2016 г.
Тираж 100 экз. Заказ № 192
Отпечатано в отделе оперативной печати
Физического факультета МГУ