



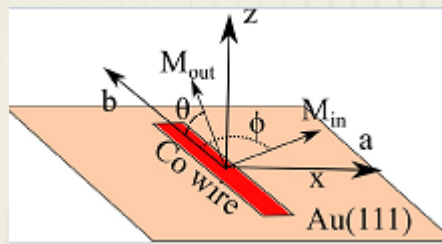
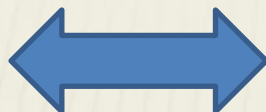
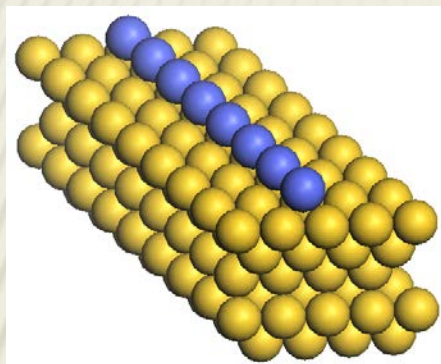
# ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПАРАМЕТРА РЕШЁТКИ ЗОЛОТА И ПЛАТИНЫ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОСАЖДЁННЫХ НА ИХ ПОВЕРХНОСТЬ НАНОПРОВОДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

*Коробова Ю.Г., Бажанов Д.И.*

---

Московский государственный  
университет им. Ломоносова,  
Физический факультет  
[korobovajg@yandex.ru](mailto:korobovajg@yandex.ru)

# ОБЪЕКТ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ



Теория функционала  
электронной плотности (DFT)

Программный пакет для  
моделирования  
электронной структуры  
(VASP)

- PAW-GGA
- Базис плоских волн
- Спин-орбитальное взаимодействие
- Дипольная поправка

Провод Co на поверхности Au(111)  
Провод Fe на поверхности Pt(111)



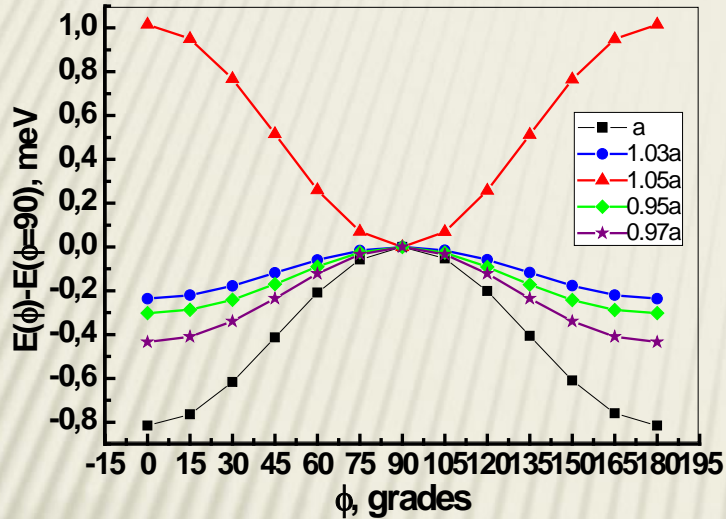
Уменьшение и увеличение параметра  
решётки на 3% и 5%



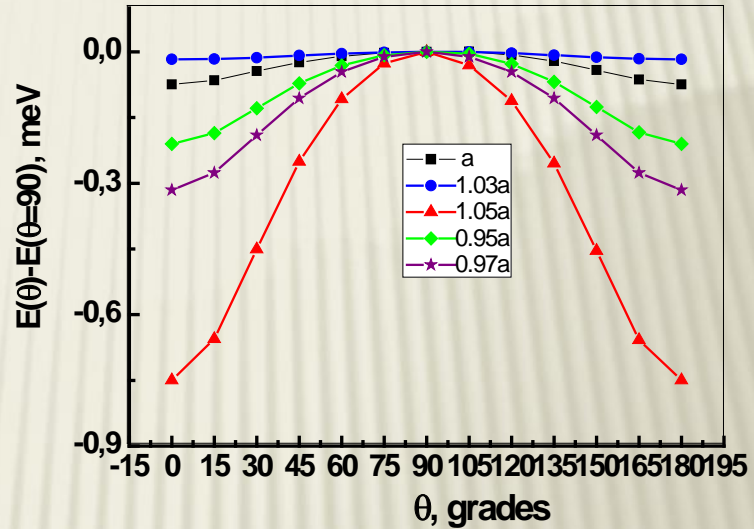
Энергия магнитной анизотропии  
Направление оси лёгкого  
намагничивания

# НАНОПРОВОД Co НА ПОВЕРХНОСТИ Au(111)

$\Delta E$  in-plane Co wire on Au(111)



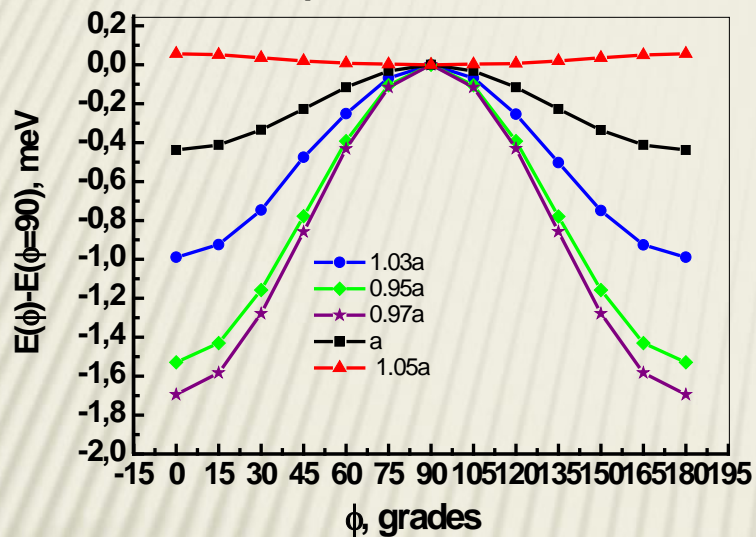
$\Delta E$  out-plane Co wire on Au(111)



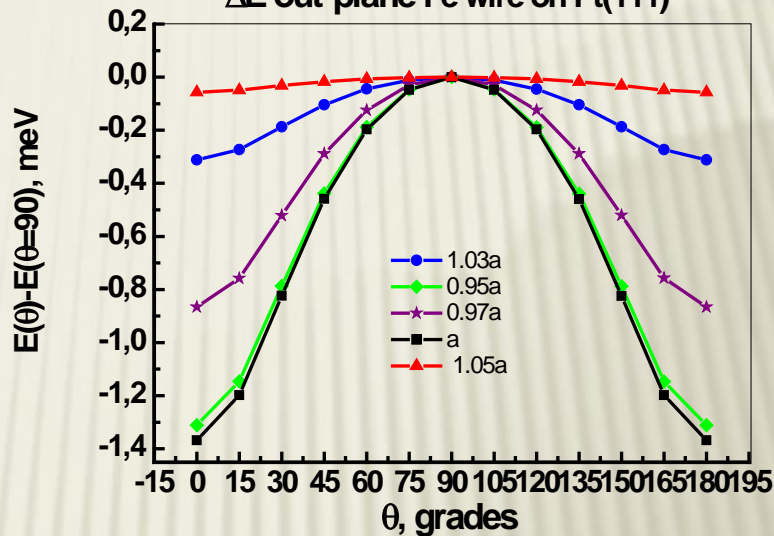
	MAE in- plane, мэВ	MAE out- plane, мэВ	Лёгкая ось	Тяжёлая ось
0.95a	0.303	0.210		⊥
0.97a	0.435	0.316		⊥
a	0.816	0.075		⊥
1.03a	0.236	0.017		⊥
1.05a	1.016	0.750	⊥	Z

# НАНОПРОВОД Fe НА ПОВЕРХНОСТИ Pt(111)

$\Delta E$  in-plane Fe wire on Pt(111)



$\Delta E$  out-plane Fe wire on Pt(111)



	MAE in- plane, мэВ	MAE out- plane, мэВ	Лёгкая ось	Тяжёлая ось
0.95a	1.529	1.311		⊥
0.97a	1.694	0.866		⊥
a	0.439	1.368		Z
1.03a	0.989	0.312		⊥
1.05a	0.056	0.057	⊥	Z

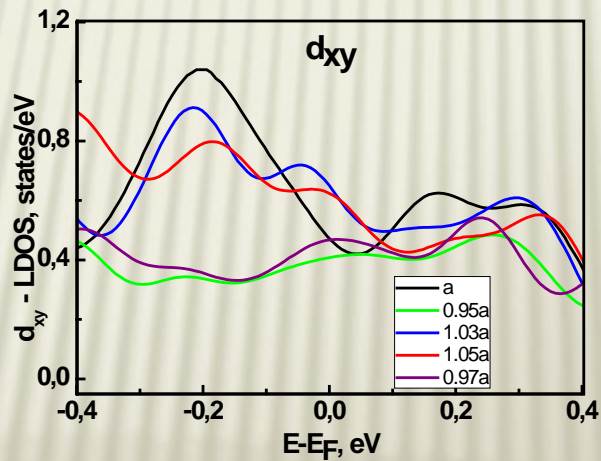
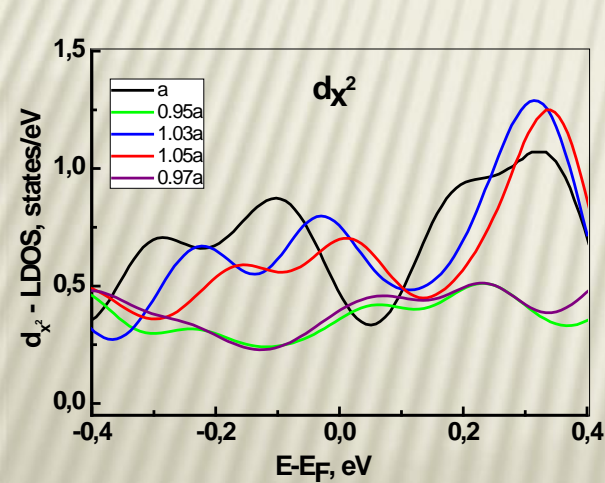
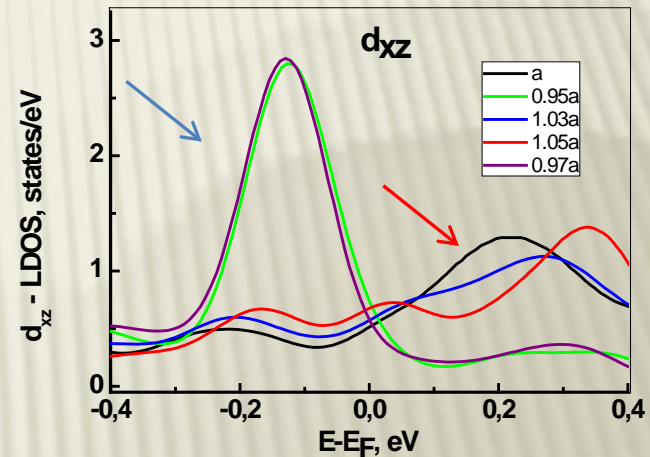
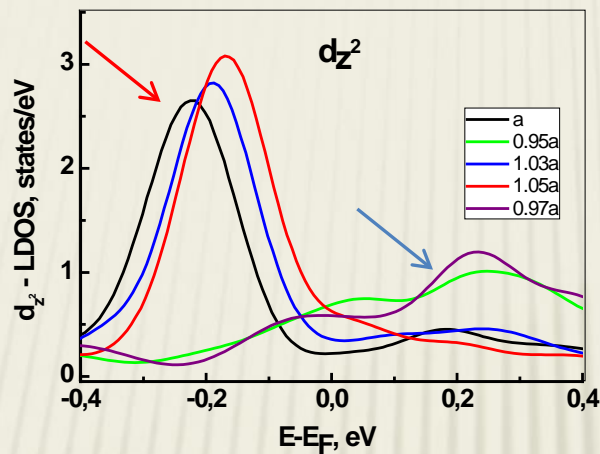
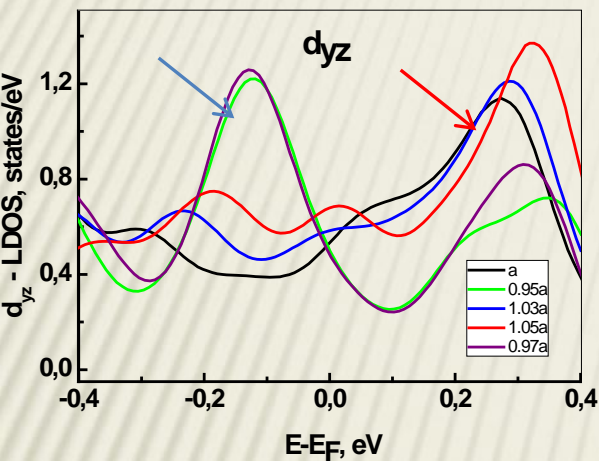
# ЛОКАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

*D. Wang, R. Wu and A. Freeman, Phys. Rev. B 47, 14932, (1993).*

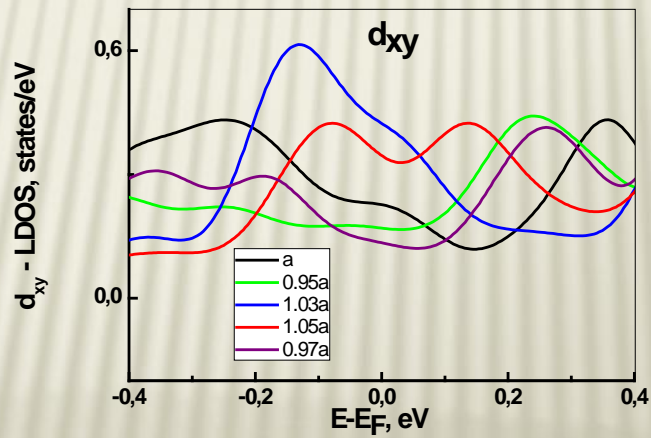
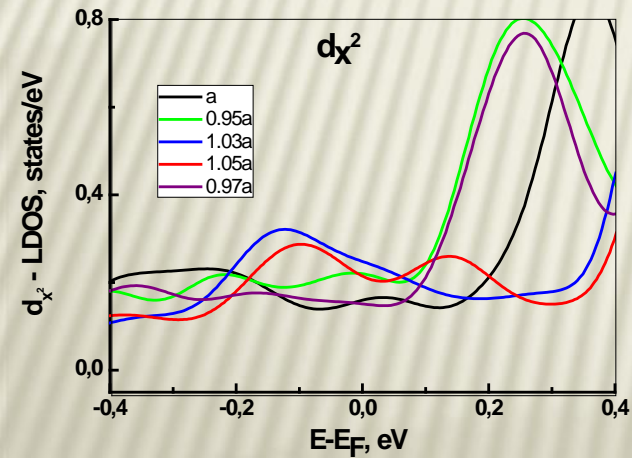
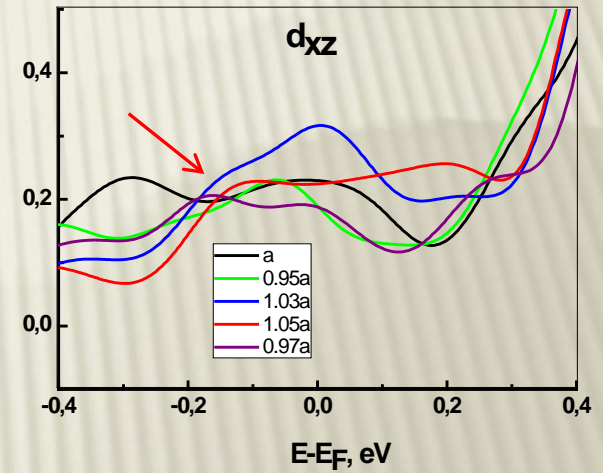
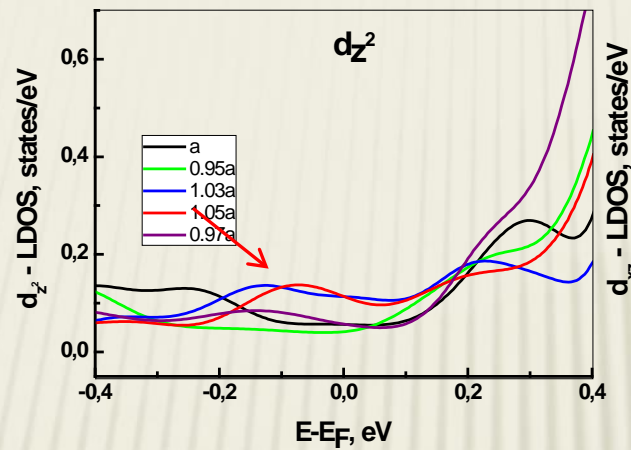
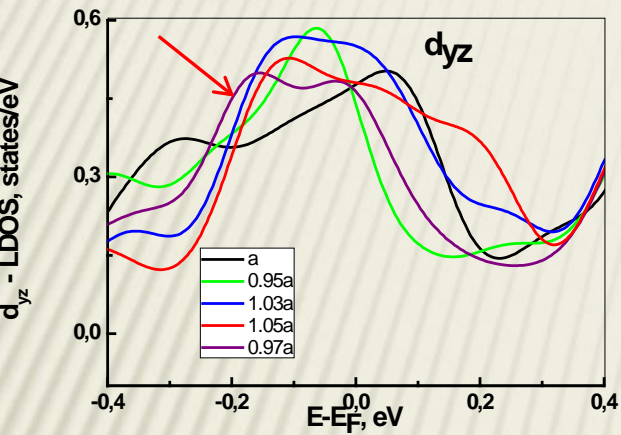
$$\text{MAE} = E_x - E_z \sim \xi^2 \sum_{o,u} \frac{|\langle o|L_z|o\rangle|^2 - |\langle o|L_x|u\rangle|^2}{\epsilon_u - \epsilon_o}$$

		u>				
		xy	xz	z <sup>2</sup>	yz	x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup>
o>	xy					out
	xz			in	out	
	z <sup>2</sup>		in		in	
	yz		out	in		
	x <sup>2</sup> -y <sup>2</sup>	out				

# НАНОПРОВОД Co НА ПОВЕРХНОСТИ Au(111)



# НАНОПРОВОД Fe НА ПОВЕРХНОСТИ Pt(111)



# АНАЛИЗ МАЕ В МОДЕЛИ БРУНО

*Patrick Bruno, Phys. Rev. B, 39, 865 (1989)*

$$MAE = \varepsilon/4\mu_B[M_{L(easy)} - M_{L(hard)}],$$

где  $\varepsilon$  – константа спин-орбитального взаимодействия

Co/Au(111)

	$M_{L\text{ easy}},$ $\mu_B$	$M_{L\text{ hard}},$ $\mu_B$
0.95a	0.163	0.141
0,97a	0.161	0.139
a	0.223	0.134
1.03a	0.217	0.158
1.05a	0.198	0.195

Fe/Pt(111)

	$M_{L\text{ easy}},$ $\mu_B$	$M_{L\text{ hard}},$ $\mu_B$
0.95a	0.125	0.082
0,97a	0.133	0.130
a	0.130	0.117
1.03a	0.118	0.110
1.05a	0.092	0.087



# ВЫВОДЫ

---

- Величина энергии магнитной анизотропии и направление оси лёгкого намагничивания чувствительны к изменению параметра решётки
- В случае увеличения постоянной решётки подложки на 5% наблюдается изменение направления оси лёгкого намагничивания для обеих рассмотренных систем
- Наличие магнитной анизотропии хорошо описывается в рамках теории возмущений второго порядка
- Полученные направления осей лёгкого и тяжёлого намагничивания согласуются с моделью Бруно

*Спасибо за внимание!*