

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ КЛАСТЕРОВ СИЛИЦИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.

Глушков Г. И., Тучин А. В., Битюцкая Л. А.

Воронежский государственный университет, Россия, 394006, Воронеж,
Университетская пл. д.1, 8(4732)2281160,
me144@phys.vsu.ru

Основной задачей исследований в области полупроводниковой спинтроники является поиск магнитных материалов, позволяющих поляризовать по спину носители заряда и инжектировать их в полупроводник. Магнитные свойства силицидов 3d-металлов проявляются при достижении наноразмеров. Wu с соавторами [1] методом DFT показал, что ультратонкие пленки моносилицидов Mn Si и CoSi со структурой CsCl имеют ненулевой эффективный магнитными при толщине пленок от одного до трех монослоев. Seo, Lee методом CVD получили нанонити моносилицида CoSi со структурой P213 диаметром менее 30 нм, обладающих ферромагнитными свойствами $\mu_{\text{эфф}} = 1.37 \pm 0.53 \mu_{\text{B}}/\text{Co}$ [2].

Целью работы является исследование влияния конфигурации и числа атомов на магнитные свойства самоорганизованных кластеров силицидов переходных металлов TMSi_n (TM=Ni, Co, Fe, Mn; n=4, 7, 8).

Неограниченным методом DFT в кластерном приближении проводились расчеты полной энергии (E_{tot}), приведенной энергии связи (E_b) и эффективного магнитного момента ($\mu_{\text{эфф}}$). В качестве обменного функционала выбран B3LYP. В качестве базисного набора выбран валентно-расщепленный базис 6-31G(dp). Расчеты проводились в программном комплексе Gaussian03. Оценка стабильности кластеров проводилась в терминах энергии связи (E_b).

Расчеты показали, что энергия связи в основном состоянии всех элементарных кластеров TMSi_4 , TMSi_8 и TMSi_7 закономерно увеличивается в ряду от Mn к Ni, т.е. по мере заполнения внешней 3d-оболочки переходного металла. Данный результат находится в согласии с результатами, полученными ранее теоретически в работах [1,2]. E_b чувствительна к конфигурации атомов: компактные кластеры стабильнее линейных, что указывает на большую роль эффектов кривизны и нескомпенсированности спина атомов 3d-металла. Переходы в возбужденные состояния с изменением спина возможны под действием оптического излучения. Схожий механизм обнаружен в структурах на основе оксида иттрия в работе [3]

Литература

1. Wu H., et al.// Phys. Rev. B, V.72, N.14, 2005, Pp. 144425-144437
2. Seo K., et al.// NanoLetters, V.3, N5, 2009, Pp. 1145-1150.
3. Hummon M. T., et al.// Phys. Rev. Letters, V. 110, 2013, Pp. 143001-1-143001-5.