

## ЭЛЕКТРОННАЯ КВАНТОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Pt-Fe НАНОПРОВОДОВ

Е.М. Смелова<sup>1</sup>, К.М. Цысарь<sup>1</sup>, А.М. Салецкий<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова,  
Физический факультет  
smelova\_k\_m@mail.ru*

Развитие современных технологий требует постоянного поиска новых способов миниатюризации электроники. Один из способов увеличения плотности записи и передачи информации без увеличения размеров проводящих структур - спин-поляризованный электронный транспорт, в котором для передачи информации наряду с зарядом частиц используется также их спин. Так в 2010 г. компания IBM (IBM's labs, Yorktown, New York) произвела первый прототип - чип (racetrack memory) на основе проводящих Ni магнитных нанопроводов. На первое место выходит поиск новых физических принципов, на основе которых будут построены быстродействующие наноустройства с низкими энергопотреблением и тепловыделением [1]. В спинтронных устройствах переворот спина практически не требует затрат энергии. Скорость изменения положения спина очень высока. Эксперименты показали, что переворот спина осуществляется за несколько пикосекунд. Создание стабильных наноструктур и детальное исследование их квантовых свойств становится одной из наиболее важных областей современной науки [2]. Особое внимание исследователей привлекает изучение проводящих свойств магнитных одномерных наноструктур – наноконтактов и нанопроводов [2,3]. Ток в магнитных нанопроводах может быть спин-поляризованным, и при этом появляется новая возможность управления проводимостью - посредством наложения и изменения внешнего магнитного поля. Впервые взаимосвязь между проводящими и магнитными свойствами одномерных наноконтактов в эксперименте обнаружил Х.-Д. Чопра и др. [4]. Данное явление получило название «гигантское магнетосопротивление». Особое внимание уделяется исследованию низкоразмерных сплавов, возможность формирования которых доказана во многих экспериментальных работах [5]. Причем в низкоразмерных структурах возможно сплавление даже таких элементов, которые не сплавляются в объеме [6]. Сплавление химически активных атомов магнитных элементов (Fe, Co) с атомами благородных металлов (Pt, Au), обладающих низкой реакционной способностью, приводит к формированию новых одномерных наносплавов, обладающих рядом уникальных физических свойств (гигантская магнитная анизотропия, наномagnetизм) [7]. Теоретическому исследованию проводящих свойств смешанных магнитных одномерных нанопроводов посвящена настоящая работа.

В представленной работе проводится многоуровневое теоретическое исследование квантовых свойства смешанных Pt-Fe нанопроводов. С помощью первопринципной молекулярной динамики, реализованной в программе VASp [8], проводится исследование магнитных свойств наноструктур и электронной структуры нанопроводов. В программу заложено самосогласованное решение системы уравнений Кона-Шэма в базе плоских волн для определения равновесной электронной плотности [9]. Для расчета полной энергии системы проводилось интегрирование в обратном пространстве по специальной сетке  $k$ -точек  $1 \times 1 \times 7$  построенной по схеме, предложенной Монкхорстом и Паком [10]. Все представленные в работе вычисления выполнены с использованием приближения обобщенных градиентов [11] для потенциала обменно-корреляционного взаимодействия и с использованием PAW (Projector Augmented-Wave)-потенциалов [12]. Pt-Fe нанопровод моделировался в работе равномерно чередующейся цепочкой атомов Pt и Fe. Исследование проводящих свойств Pt-Fe нанопроводов проводилось с помощью метода неравновесных функций Грина, реализованного в программе Smeagol. Программный комплекс SMEAGOL (<http://www.smeagol.tcd.ie/>) предоставляет возможность провести расчеты из первых принципов квантового спин-поляризованного электронного транспорта через металлические наноконтакты и нанопровода со сложным химическим составом, атомной и магнитной структурами с использованием комбинации ФЭП и неравновесной функции Грина [13]. Спин-поляризованный электронный транспорт в Pt-Fe нанопроводах рассчитывается в рамках формализма Ландауэра-Буттикера [14], проводимость рассчитывается по формуле:

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}(\hat{n}) &= \frac{e^2}{h} N_{\sigma} \\
 &= \frac{e^2}{h} \frac{A}{4\pi^2} \frac{1}{2} \sum_v S_{v\sigma}(\hat{n}) \\
 &= \frac{e^2}{h} \frac{A}{4\pi^2} \times \frac{1}{2} \sum_v d\vec{q} |\hat{n} \cdot \nabla_{\vec{q}} \varepsilon_{v\sigma}(\vec{q})| \delta(\varepsilon_{v\sigma}(\vec{q}) - E_F), \quad (1)
 \end{aligned}$$

где  $E_F$  - энергия Ферми,  $N_{\sigma}$  - число каналов проводимости. Напряжение между электродами вычисляется как разность  $\mu_L - \mu_R$ . Далее полный туннельный ток через биметаллический нанопровод рассчитывается с помощью метода неравновесных функций Грина (2)

$$I = \frac{e^2}{h} \int dE T(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \quad (2)$$

где  $T(E)$  - коэффициенты проводимости, зависящие от внешнего напряжения и энергии,  $f(E)$  – функция распределения Ферми,  $\mu_L(\mu_R)$  – химические потенциалы электродов. Комбинация метода неравновесных функций Грина, реализованного в программном коде Smeagol, для вычисления непосредственно проводимости биметаллических нанопроводов и исследование электронной и магнитной структуры провода с помощью первопринципного кода VASp позволяет проводить всестороннее детальное исследование спин-поляризованного электронного транспорта через одномерные нанопровода и наноконтакты.

В результате первопринципного исследования квантовых свойств биметаллических Pt-Fe нанопроводов было показано, что возможно формирование только равномерно смешанных Pt-Fe нанопроводов, которые обладают уникальными магнитными свойствами, в сильной степени зависящими от атомной структуры провода. Изучение атомной структуры Pt-Fe провода показало, что при среднем межатомном расстоянии  $2.3 \text{ \AA}$  (под межатомным расстоянием понимается проекция расстояния между атомами на ось провода) происходит переход провода из линейной конфигурации в конфигурацию «зиг-заг», которая сохраняется в диапазоне межатомных расстояний  $1.7 \text{ \AA}$ - $2.3 \text{ \AA}$ . Последующее сжатие провода до межатомных расстояний  $<1.7 \text{ \AA}$  переводит его в систему из двух однокомпонентных Pt и Fe нанопроводов, расположенных на расстоянии  $\sim 2 \text{ \AA}$  друг относительно друга. Исследование электронной структуры провода показало, что при растяжении Pt-Fe нанопровод переходит из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное. В растянутом линейном Pt-Fe нанопроводе возникает антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов атомов железа, которое поддерживается косвенным обменным взаимодействием между атомами железа через атомы платины, что является исключительно важным результатом для создания новых устройств спинтроники с «управляемыми» магнитными свойствами. Исследование проводящих свойств нанопровода показало, что электронный транспорт через растянутый линейный биметаллический Pt-Fe нанопровод не является спин-поляризованным. Полная проводимость нанопровода составляет  $2G_0$  (Рис. 1, верх). Данная величина сохраняется неизменной в области  $2.3 \text{ \AA}$  -  $2.8 \text{ \AA}$ , соответствующей области существования линейного нанопровода. При сжатии нанопровода полная проводимость увеличивается до  $3G_0$ . Кроме того ток через провод становится спин-поляризованным. Как можно видеть на графике проводимости (Рис. 1, низ) проводимость по каналам со спином вверх соответствует  $2G_0$ , проводимость по каналам со спином-вниз -  $1G_0$ . Степень поляризации туннельного тока через биметаллический Pt-Fe нанопровод составляет 33 %. Таким образом, нами было показано, что антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов атомов железа в одномерном биметаллическом нанопроводе приводит к исчезновению спиновой поляризации тока через него, что является важным результатом для дальнейшего развития спинтроники.

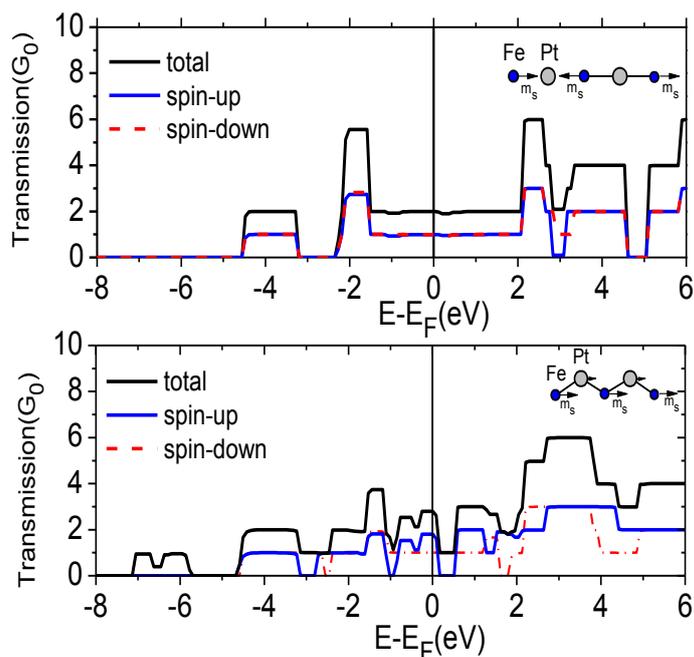


Рис. 1. Проводимость биметаллических Pt-Fe нанопроводов при среднем межатомном расстоянии 2.5 Å (линейный нанопровод) (верх) и 2.3 Å (нанопровод в конфигурации «зиг-заг») (низ).  $E_F$  – энергия Ферми правого и левого электродов

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Sokolov A. // Nature Nanotechnology Lett. 2007. 2. 171 - 175.
2. Haug T. // Phys. Rev. B. 2009. 79. 024414.
3. J. Velez // Phys. Rev. Lett. 2005. 94. 127203.
4. Chopra and Hua S. Z. // Phys. Rev. B. 2002. 66. 020403(R).
5. Bettini J. // Nature Nanotechnology. 2006. 1. 182.
6. Egle S. // Phys. Rev. B. 2010. 81. 134402.
7. Tsysar K. M. // JETP Lett. 2011. 94. 3. 228-232.
8. Kresse G. and Furthmuller J. // Phys. Rev. B. 1996. 54. 11169.
9. Kohn W., Sham L.J. // Phys. Rev. A. 1965. 140. 1133-1138.
10. Monkhorst H. J. and Pack J. D. // Phys. Rev. B. 1976. 13. 5188.
11. Perdew J.P. // Phys. Rev. B. 1992. 46. 6671-6687.
12. Blochl P. P. // Phys. Rev. B. 1994. 50. 17953.
13. Haug H., Jauho A. P. // Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors. 1996.
14. Landauer R. // Philos. Mag. 1970. 21. 863; Å M. // Phys. Rev. Lett. 1986. 57. 1761.