

Исследование магнитных свойств палладиевых наноконтактов методом первопринципной молекулярной динамики.

Смелова Ксения Михайловна¹

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: smelova_k_m@mail.ru

Введение

Современные технологии и методы позволяют создавать различные наноструктуры и изучать их свойства. В последние годы большое количество статей было посвящено теоретическому[1,2,3,4,5] и экспериментальному[6,7,8] исследованию структур низкой размерности, у которых обнаружены уникальные физические свойства (квантовая проводимость, наномagnetизм). Исследование свойств магнитных наноструктур открывает большие перспективы в nanoиндустрии и нанотехнологии. Особый интерес представляет исследование нанопроводов и наноконтактов.

В моей работе методом первопринципной молекулярной динамики проведены исследования магнитных свойств палладиевых наноконтактов и палладиевых нанопроводов.

Методы

Расчеты выполнены методом первопринципной молекулярной динамики на основе теории функционала электронной плотности Томаса Ферми. Для вычислений была использована программа, итерационно решающая самосогласованную систему уравнений Кона-Шэма с использованием псевдопотенциалов в базисе плоских волн[9,10]. Для обмена и корреляции использовались приближения локальной плотности (ЛП) и обобщенного градиента (ОГ). Для интегрирования в обратном пространстве выбирались специальные k-точки по схеме, предложенной Монкхорстом и Паком.

Результаты

Были проведены расчеты основных свойств кристаллической структуры палладия. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными в таблице 1:

	ЛП	ОГ	эксп.
параметр решетки, Å	3,85	3,93	3,89
магнитный момент, μB	0	0,2	0

На рис.1 представлены результаты расчетов магнитного момента на атом для бесконечных одномерных палладиевых нанопроводов. Результаты расчетов показали существование зависимости магнитного момента от расстояния между атомами палладия.

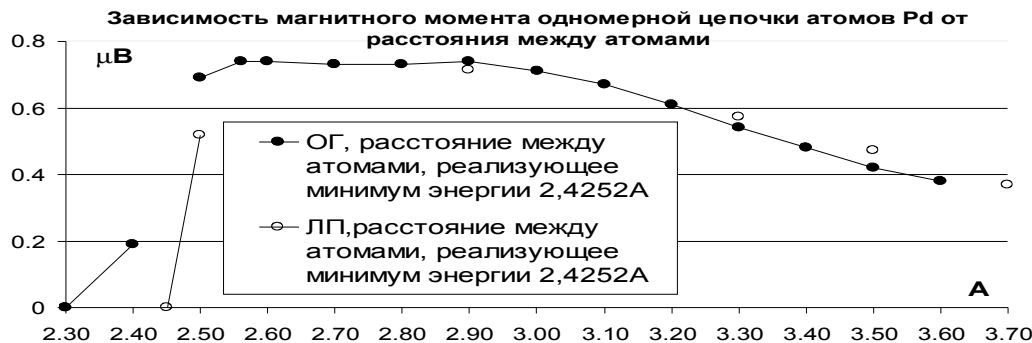
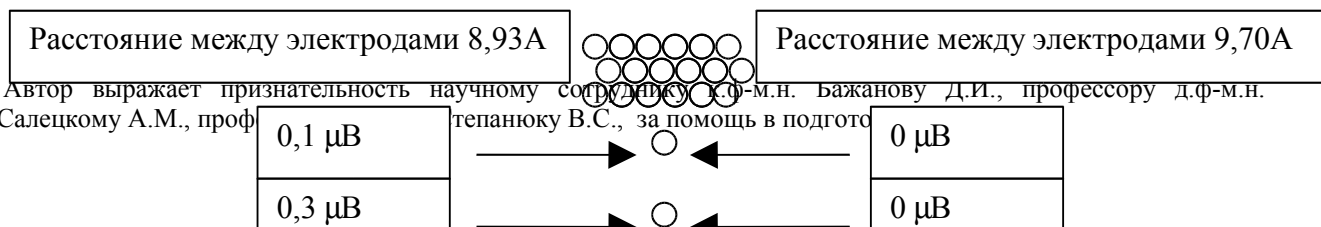
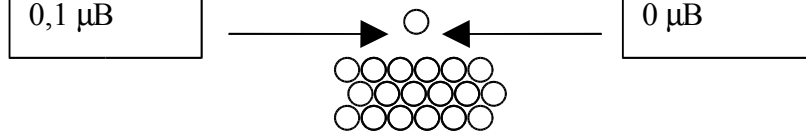


Рис.1

Также были проведены исследования магнитных свойств цепочки атомов палладия между двумя палладиевыми контактами (рис.2):



Автор выражает признательность научному сотруднику к.ф.-м.н. Бажанову Д.И., профессору д.ф.-м.н. Салецкому А.М., профессору В.С., за помощь в подготовке статьи.



В результате проведенных исследований было установлено, что с уменьшением расстояния между палладиевыми контактами (электродами) возникает магнитный момент на атомах палладия в цепочке.

Полученные результаты хорошо согласуются с результатами других теоретических работ[1,2,3,4,5] и экспериментальных исследований[6,7,8].

Литература

1. Delin, E. Tosatti, R. Weht, Magnetism in Atomic-Size Palladium Contacts and Nanowires. *Phys. Rev. Let.*, 92, №5,057201 (2004).
2. Simone S. Alexandre, Maurizio Mattesini, Comment on “Magnetism in Atomic-Size Palladium Contacts and Nanowires”. *Phys. Rev. Let.*, 96,079701 (2006).
3. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, W. Hergert, A. M. Saletsky, P. Bruno and I. Mertig, Magnetism and structure of atomic-size nanocontacts. *Phys. Rev. B* 70, 195420 (2004).
4. J. Fernandez-Rossier, David Jacob, C. Untiedt and J. J. Palacios, Transport in magnetically ordered Pt nanocontacts. *Phys. Rev. B* 72, 224418 (2005).
5. Delin, E. Tosatti, R. Weht, Delin, Tosatti, and Weht Reply, *Phys. Rev. Let.*, 96,079702 (2006).
6. Tomoko Matsuda and Tokushi Kizuka, Palladium Wires of Single Atom Width as Mechanically Controlled Switching Devices. *Japanese Journal of Applied Physics*, 45, 50.
7. Varlei Rodrigues, Jefferson Bettini, Paulo C. Silva, and Daniel Ugarte, Evidence for Spontaneous Spin-Polarized Transport in Magnetic Nanowires, *Phys. Rev. Let.*, 91,096801, (2003).
8. F. Sato, A. S. Moreira, J. Bettini, P. Z. Coura, S. O. Dantas, D. Ugarte, and D. S. Galvao, On the Formation of Copper Linear Atomic Suspended Chains, *Phys. Rev. Let.*, 91,096801, (2003).
9. G. Kresse and J. Furthmuller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54:11169, (1996).
10. P. Blochl. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B* 50, 17953 (1994).