ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций»

X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/120

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ ТЯЖЕЛЫХ Р-ЭЛЕМЕНТОВ IV – VI ГРУПП

[1,2]Борисова С.Д., [1,2] Русина Г.Г.
[1]*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*
[2]*Томский государственный университет, Томск, Россия*

Кластеры тяжелых р-элементов Pb, Bi, Te, являющихся перспективными материалами для спинтроники, вызывают большой интерес исследователей. На свойства кластеров значительное влияние оказывает размерный эффект. Только за счет уменьшения размеров вещество может менять тип проводимости или оно из немагнитного состояния переходит в магнитное [1]. Также кластеры тяжелых *р*-элементов IV-VI групп, характеризуются выраженным релятивизмом. Для таких кластеров важным является учет спин-орбитального взаимодействия, которое оказывает существенное влияние на их магнитные свойства.

В данной работе для чистых и смешанных триммеров Bi, Te, и Pb, а также для их катионов и анионов, с использованием DFT и программного кода VASP [2] было исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия (SOC) на магнитные свойства.

Расчет магнитного момента проводился для двух направлений магнитизации: в плоскости треугольника и перпендикулярно плоскости треугольника. Показано, что учет SOC приводит чаще всего к уменьшению спинового магнитного момента от целочисленного значения (0,1,2), хотя вклад от орбитальных моментов в некоторых кластерах может немного компенсировать потерю в полном магнитном моменте. Также для некоторых кластеров наблюдается отсутствие коллинеарности для спиновых и орбитальных моментов на атомах кластера. Наибольшим положительным значением энергии магнитной анизотропии (ЭМА) обладают нейтральный кластер Bi_3 и его анион, а также катион Pb_3, что соответствует оси легкого намагничивания параллельно плоскости треугольника.

Литература

1. Blonski P., Dennier S., Hafner J. Strong spin-orbit effects in small Pt clusters: Geometric structure, magnetic isomers and anisotropy // J. Chem. Phys. 2011. V. 134. P. 034107-12.
2. Kresse G. and Hafner J. Ab initio molecular dynamics for open-shell transition metals. // Phys. Rev. B 1993. V. 48. P. 13115-13118.