

## **Geometry and disorder effect on the magnetic and electronic structure of systems with high polarization**

Contact: Institute of Molecular Physics Polish Academy of Sciences,  
Department of Solid State Theory

Advisor: dr hab. Maria Pugaczowa-Michalska  
tel. 61-86-95-131, e-mail: [maria@ifmpan.poznan.pl](mailto:maria@ifmpan.poznan.pl)

Co-advisor: dr Jakub Kaczkowski,  
e-mail: [kaczkowski@ifmpan.poznan.pl](mailto:kaczkowski@ifmpan.poznan.pl)

### **Introduction:**

A new class of systems with high polarization has attracted considerable attention in the last few years, primarily due to potential applications in the emerging field of spin-based electronics (spintronics). Promising candidates for these materials are the half-metallic Heusler compounds, which are characterized by the presence of a band gap in only one spin direction and by metallic properties in the other spin direction. High spin polarization at surfaces and interfaces is a key component for transport of information using the spin degree of freedom of the electron. Unfortunately, the physics and chemistry of surfaces can reduce this spin polarization through chemical inhomogeneity, strain or surface reconstruction.

### **Aim and methods:**

The main purpose of research is to investigate the effects of geometry and disorder on electronic structure and magnetic properties of such materials as Heusler alloys, oxide materials, and semiconductors on based on DFT (density-functional theory) calculations. The polarization of some bulk materials will be computed using band structure calculations for the equivalent disordered system with a few % of antisite defects. Energetically preferred surface reconstruction will be studied for half-metallic compounds. The electronic structure, lattice dynamics and magnetic properties of selected half-metallic systems will be investigated. The main research method will be the density functional method (DFT) implemented in the form of computational codes. The calculations will be carried out on the nodes of the available Grid environment.

## *Влияние геометрии и беспорядка на свойства систем с высокой спиновой поляризацией*

Научный отдел: Institute of Molecular Physics PAS, Department of Solid States Theory

<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=2>

Контактная информация:

Научный руководитель: dr hab. Maria Pugaczowa-Michalska,

tel. 61-86-95-131, [maria@ifmpan.poznan.pl](mailto:maria@ifmpan.poznan.pl)

Со-руководитель: Ph.D. Eng Jakub Kaczkowski: [jakub.kaczkowski@ifmpan.poznan.pl](mailto:jakub.kaczkowski@ifmpan.poznan.pl)

### **Введение:**

За последние несколько лет новый класс систем с высокой поляризацией привлек значительное внимание, в первую очередь, из-за потенциальных применений в появляющейся области электроники спина (спинтроника). Это было вызвано идеей использования спиновых степеней свободы в устройствах хранения и обработки информации. Перспективными кандидатами на такого рода материалы являются полуметаллические соединения Гейслера, которые характеризуются наличием запрещенной зоны только в одном направлении спина и металлическими свойствами в другом направлении спина. Высокая спиновая поляризация на поверхностях и интерфейсах является ключевым компонентом для переноса информации с использованием степени свободы какой является спин электрона в этой ситуации. К сожалению, эффекты на поверхностях могут уменьшить спиновую поляризацию за счет химической неоднородности, деформации или поверхностной реконструкции.

### **Цель и методы:**

Цель предлагаемой работы - исследовать влияние геометрии и беспорядка на электронную структуру и магнитные свойства на основе расчетов теории функционала плотности для некоторых популярных материалов (сплавы Гейслера, оксидные материалы, полупроводники). Поляризация некоторых объемных материалов будет найдена с использованием расчетов зонной структуры для эквивалентной неупорядоченной системы с несколькими % дефектов. В предлагаемых исследованиях будет учитываться энергетика реконструкции поверхности для выбранных полуметаллических соединений, и будут нас интересовать: электронная структура, динамика решетки и магнитные свойства. Как основной метод исследования предлагается функционал плотности (DFT), реализованный в виде вычислительных кодов. Расчеты будут выполняться на узлах доступной среды Грид.