

Wpływ geometrii i nieporządku na własności układów z wysoką polaryzacją spinową

Miejsce realizacji: Instytut Fizyki Molekularnej PAN,
Zakład teorii ciała stałego
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=2>

Opiekun: *dr hab. Maria Pugaczowa-Michalska,*
tel. 61- 86-95-131, maria@ifmpan.poznan.pl

Opiekun pomocniczy: *dr inż. Jakub Kaczkowski,*
jakub.kaczkowski@ifmpan.poznan.pl

Wprowadzenie:

W ostatnich latach układy z wysoką polaryzacją spinową cieszą się niesłabnącym zainteresowaniem ze względu na zastosowania w dziedzinie elektroniki spinowej (spintronika). Rozwiązanie szeregu zagadnień związanych z konstrukcją układów w spintronice w dużym stopniu zależy od wstrzykiwania i manipulacji spinem w układach realnych. Pomocną w tym przypadku jest znajomość mechanizmów odpowiedzialnych za wysoką wartość polaryzacji spinowej materiałów wyjściowych, z których może być zbudowany układ docelowy. Potencjalnymi kandydatami do zastosowań spintronicznych są półmetaliczne związki Heuslera, które charakteryzują się obecnością pasma wzbronionego tylko dla jednego kierunku spinu i właściwościami metalicznymi dla drugiego. Wysoka polaryzacja spinowa na powierzchni i interfejsach jest kluczowym elementem tak zwanego „transportu informacji” w urządzeniach spintronicznych. Niestety, efekty powierzchniowe często prowadzi do zmniejszenia polaryzacji spinowej poprzez niejednorodność chemiczną, odkształcenie lub rekonstrukcję powierzchni.

Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze:

Celem proponowanej pracy jest zbadanie wpływu geometrii układu oraz wpływ nieporządku na strukturę elektronową kilku znanych układów z wysoką wartością polaryzacji spinowej. Z założenia wśród takich materiałów należy wymienić półmetaliczne stopy Heuslera, materiały tlenkowe, półprzewodniki. Badanie wpływu geometrii układu zakłada symulacje układów typu „bulk” z defektami rzędu kilku procent. Ważnym elementem w proponowanych badaniach będzie również uwzględnianie efektów powierzchniowych na wartość polaryzacji spinowej, struktura elektronowa i własności magnetyczne.

Metodyka badań zakłada stosowanie współczesnych metod obliczeniowych. Główną metodą badawczą będzie metoda funkcjonału gęstości zaimplementowana w postaci dostępnych kodów obliczeniowych DFT. Obliczenia będą prowadzone na węzłach dostępnego środowiska Grid.