

05

Исследование энергетических и магнитных свойств монослойной пленки $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ на немагнитных металлических подложках

© М.В. Мамонова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Омск, Россия

E-mail: mamonovamv@omsu.ru

Поступила в Редакцию 30 декабря 2019 г.

В окончательной редакции 30 декабря 2019 г.

Принята к публикации 10 января 2020 г.

В рамках вариационного метода функционала спиновой плотности впервые осуществлено описание влияния температуры и эффектов ферромагнитного упорядочения на адсорбцию атомов переходных металлов на парамагнитных подложках при образовании монослойной пленки сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ в зависимости от концентрации компонент сплава и параметра покрытия θ . Исследовано влияние различных ориентаций поверхностной грани подложки. Энергия адсорбции для плотноупакованной грани минимальна для всех представленных систем. Было показано, что монослойная пленка без перемешивания формируется на подложке Au и W при больших значениях параметра покрытия и концентрации железа, а на подложке из Ag происходит выталкивание на поверхность атомов серебра. Проведено сравнение значений энергии адсорбции, рассчитанной при $\theta = 1$ и $T = 0\text{K}$ в рамках вариационного и первопринципного подходов. Осуществлен расчет методом Корринги–Кона–Ростокера магнитных моментов и параметров обменного взаимодействия объемного сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при равновесных значениях постоянной решетки, полученных в рамках первопринципных расчетов. Значения обменного взаимодействия имеют ферромагнитный характер и с увеличением концентрации никеля для разнотипных ближайших соседей $J_1^{\text{Ni-Fe}}$ увеличивается, а для однотипных $J_1^{\text{Ni-Ni}}$ уменьшается. Обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями осуществляется только для однотипных атомов и для атомов железа имеет ферромагнитный характер, а для атомов никеля слабый антиферромагнитный.

Ключевые слова: активированная адсорбция, ультратонкие магнитные пленки, пермаллой.

DOI: 10.21883/FTT.2020.05.49231.21M

1. Введение

Свойства ультратонких магнитных пленок являются объектом интенсивных исследований благодаря их уникальным магнитным свойствам [1–18]. Важный практический интерес вызывают не только пленки чистых ферромагнитных металлов [2–4], но и их сплавы, в частности пермаллой (сплав Fe и Ni), который широко используется в радиотехнике и компьютерных технологиях. В настоящее время эти пленки являются основным функциональным материалом для широкого спектра устройств для жестких дисков, магнитных записывающих устройств и магнитных биосенсоров [5,6], а также перспективных спинтронных устройств, основанных на эффекте гигантского магнитного сопротивления [7]. В электронных устройствах пленки пермаллой обычно используются в многослойных пленочных структурах, таких как, например, спиновые вентили [8] или в многослойных структурах с гигантским магнитоимпедансным эффектом [9,10]. Магнитные свойства сплава сильно зависят от его состава. Существуют две основные группы пермаллоев: с низким содержанием никеля (40–50% Ni) и с высоким содержанием никеля (70–83% Ni). Магнитная проницаемость высоконикелевых пермаллоев в несколько раз выше, чем магнитная

проницаемость электротехнических сталей. Классический пермаллой (Py) — это сплав, концентрация никеля в котором составляет около 75% никеля. Такой классический пермаллой обладает очень высокими магнитными свойствами.

Экспериментальные исследования структурных и магнитных свойств мультислоев Py с немагнитным металлом указывают на наличие взаимной диффузии между слоями [11–13], приводящей к сильному изменению магнитных свойств. Трехмерная реконструкция трехслойной системы $\text{Py}[25\text{nm}]/\text{Cu}[20\text{nm}]/\text{Co}[10\text{nm}]$, полученная АРТ (атомно-зондовой томографией) в работе [11] показала, что атомы Ni из Py буферного слоя проникают по границам зерен в слой Cu. Этот путь сегрегации формирует начальную стадию образования точечных отверстий и вызывает ферромагнитные мостики через слой немагнитной связи, вызывая уменьшение эффекта гигантского магнитосопротивления (GMR). В [12] работе было обнаружено, что для мультислойной системы FeNi/Ti при комнатной температуре толщина слоя перемешивания на каждой границе раздела была близка к $(7 \pm 1) \text{Å}$, если предполагать симметричное межслойное смешивание. Из сравнительного анализа магнитных измерений и измерений отражательной способности в работе [13] было подтверждено перемешивание на гра-

ницах раздела, а также появление на них небольших суперпарамагнитных наночастиц Ru. Наиболее заметно данный эффект проявился в самых тонких образцах толщиной 8 Å.

Данная статья посвящена теоретическому исследованию, с использованием вариационного подхода метода функционала спиновой плотности, проблемы влияния температурных эффектов перемешивания атомов адсорбата и подложки на адсорбционные свойства монослойной пленки Fe_xNi_{1-x} . Ранее нами была разработана методика теоретического описания процессов образования ультратонких пленок чистых ферромагнитных металлов с учетом перемешивания магнитных атомов с атомами приповерхностного слоя немагнитной металлической подложки. На ее основе был ранее [4,14,14] проведен расчет структурных, энергетических и магнитных характеристик монослойных ферромагнитных пленок Fe, Co и Ni. Для систем Fe/Ag и Fe/Au были выявлены сильные процессы перемешивания, характеризуемые вытеснением ионами железа ионов серебра и золота на поверхность и образованием плоскости из ионов железа в первом приповерхностном слое с наружной пленкой из атомов серебра или золота. Было обнаружено, что пики намагниченности для системы Fe/Au находятся в пленке для грани (111) при всех значениях параметра покрытия, для грани (100) при $\theta = 0.7$ и $\theta = 1$, а для грани (110) только при $\theta = 1$. При этом с ростом температуры наблюдается смещение пиков пространственного распределения намагниченности из области пленки в приповерхностный слой. Для системы Fe/Pt пространственное распределение намагниченности имеет аналогичный вид, различие состоит только в том, что при $T = 100K$ и $\theta = 0.5$ пик распределения намагниченности находится в приповерхностном слое. Для системы Fe/Ag пики распределения намагниченности преимущественно находятся в приповерхностном слое. Полученные данные хорошо соотносятся с результатами экспериментальных исследований методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) поверхностных систем Fe/Au(100) [16] и Fe/Pt(100) [17], проведенными в процессе роста пленки при различных толщинах покрытий. В работе [18] нами были выявлены условия образования устойчивых относительно островковой адсорбции субмонослойных пленок Fe_xNi_{1-x} на плотноупакованных гранях подложек W, Ag и Cu без учета перемешивания. Однако различия в поведении адсорбционных систем, вызывают необходимость более детального описания влияния ориентации грани и температурных эффектов перемешивания атомов адсорбата и подложки. В настоящей работе представлены результаты численного исследования свойств монослойной пленки Fe_xNi_{1-x} на немагнитных подложках W, Ag и Au для различных ориентаций поверхности с низкими значениями индекса Миллера с использованием вариационного метода функционала спиновой плотности и с применением программного комплекса VASP [19]. Для этих наноструктур исследована зави-

симость адсорбционных характеристик от параметра покрытия θ и концентрации железа в ферромагнитной пленке. Также приведены результаты расчетов методом Корринги–Кона–Ростокера [20] магнитных моментов и параметров обменного взаимодействия при равновесных значениях постоянной решетки объемного сплава Fe_xNi_{1-x} , полученными нами в рамках первопринципных расчетов.

2. Модель и методы

В данной работе методика расчета энергетических характеристик активированной адсорбции для ферромагнитных пленок [4,15] с учетом температурных эффектов была распространена на двухкомпонентные сплавы с использованием понятий о бинарных системах. Рассматривается модель полубесконечной подложки из немагнитного металла, которая ограничена бесконечной плоской поверхностью, и адсорбируемой пленкой толщиной h . В результате перемешивания адсорбированных атомов с атомами подложки, что характерно для активированной адсорбции, поверхность подложки реконструируется. Поэтому поверхностная область подложки с перемешиванием выделяется как отдельный слой толщиной l . Тогда $l = p'd^a + (1 - p')d^s$ и $h = pd^a + (1 - p)d^s$ получают зависимость от параметров p и p' , характеризующих относительную долю атомов адсорбата в области пленки и в поверхностной области подложки, и расстояний между плоскостями в кристаллах адсорбата d^a и подложки d^s .

Для реализации вариационного метода пробная функция, задающая распределение электронной плотности в системе, находилась в виде решения линеаризованного уравнения Томаса–Ферми:

$$n(z) = \begin{cases} n_1 e^{1 - 0.5e^{\beta(z+l)}} + 0.5n_2 e^{\beta z} [e^{\beta l} - 1] \\ \quad + 0.5n_3 e^{\beta z} [1 - e^{-\beta h}], & z < -l, \\ 0.5n_1 e^{-\beta(z+l)} + n_2 [1 - 0.5e^{\beta z} - 0.5e^{-\beta(z+l)}] \\ \quad + 0.5n_3 e^{\beta z} [1 - e^{-\beta h}], & -l < z < 0 \\ 0.5n_1 e^{-\beta(z+l)} + 0.5n_2 e^{-\beta z} [1 - e^{-\beta l}] \\ \quad + n_3 [1 - 0.5e^{-\beta z} - 0.5e^{\beta(z-h)}], & 0 < z < h \\ 0.5n_1 e^{-\beta(z+l)} + 0.5n_2 e^{-\beta z} [1 - e^{-\beta l}] \\ \quad + 0.5n_3 e^{-\beta z} [e^{\beta h} - 1], & z > h \end{cases} \quad (1)$$

Здесь β — вариационный параметр. Величина $1/\beta$ представляет собой характерную толщину поверхностного слоя, на которой резко меняется электронная плотность.

Определим межфазную энергию взаимодействия, приходящуюся на единицу площади контакта следующим

образом:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \{f[n(z, \beta)] - f[n_0(z)]\} dz + \sigma_{ei} + \sigma_{ii}(\beta), \quad (2)$$

где $n_0(z)$ — положительный заряд фона, σ_{ei} и σ_{ii} — поправка к межфазной энергии на электрон-ионное взаимодействие и ион-ионное взаимодействие соответственно. Выражения для σ_{ei} и σ_{ii} в силу их громоздкости здесь опущены и подробно приведены в [4]. Данные поправки зависят от следующих характеристик ионной структуры пленки, таких как радиус обрезания псевдопотенциала Ашкрофта r_c , валентность Z и межплоскостное расстояние d , которые получают зависимость от концентрации компонентов в пленке сплава:

$$r_c = \left(\frac{xZ_{Fe}(r_{Fe})^3 + (1-x)Z_{Ni}(r_{Ni})^3}{xZ_{Fe} + (1-x)Z_{Ni}} \right)^{1/3}, \quad (3)$$

$$Z = xZ_{Fe} + (1-x)Z_{Ni}, \quad (4)$$

$$d^a = xd_{Fe} + (1-x)d_{Ni}. \quad (5)$$

А также от параметров ионной структуры подложки: расстояния между ближайшими ионами подложки c_1 в плоскостях, параллельных поверхности в ее объемной части, и межплоскостного расстояния в подложке d_1 , которые меняют свои значения в зависимости от ориентации грани подложки.

Объемная плотность свободной энергии неоднородного электронного газа может быть представлена в виде градиентного разложения

$$f[n(z)] = w_0[n(z)] + w_2 \left[n(z), |\nabla n(z)|^2 \right] + w_4 \left[n(z), |\nabla n(z)|^4 \right] - T(s_{id} + s_{order}), \quad (6)$$

где w_0 есть плотность энергии однородного электронного газа, включающая последовательно кинетическую, электростатическую, обменную и корреляционную энергии, s_{id} , s_{order} — энтропийные вклады в свободную энергию, учитывающие, соответственно, температурные изменения в энтропии для электронного газа и эффекты магнитного упорядочения в электронной подсистеме

$$s_{id} = \frac{\pi^2}{2} k^2 T \left[\frac{n(z)}{\epsilon_F} \right], \quad (7)$$

$$s_{order} = k \frac{n(z)}{2} \times \left[\ln 4 - (1+m) \ln(1+m) - (1-m) \ln(1-m) \right]. \quad (8)$$

Спонтанный магнитный момент, то есть ферромагнетизм в электронной системе возникает при снятии вырождения энергии электронов по проекции спина во внутреннем магнитном поле. В соответствии с данным фактом в полной электронной плотности выделим вклад

от электронов с проекцией спина „вверх“ n_+ и проекцией спина „вниз“ n_- . При этом выполняется соотношение

$$n(z) = n_+(z) + n_-(z). \quad (9)$$

Электронные плотности квазичастиц со спином „вверх“ $n_+(z)$ и со спином „вниз“ $n_-(z)$ могут быть выражены через относительную намагниченность: $m(T) = M(T)/M(T=0)$ следующим образом:

$$n_{+/-}(z) = n(z)(1 \pm m)/2. \quad (10)$$

Экспериментальные исследования [1] ультратонких магнитных пленок с толщинами $N < 4-6$ монослоев показывают, что их намагниченность демонстрирует температурную зависимость с ярко выраженным низкоразмерным характером и зависит как от материала подложки так и от ориентации поверхностной грани. В частности, для систем Fe/Ag(111), Ni/W(110) и Fe/W(110) описывается двумерной моделью Изинга, а для систем Ni/Cu(100) и Fe/Au(111) — двумерной XY-моделью. Так как для системы Ru/Cu/Pt выявлена магнитная анизотропия в плоскости [21], а также для универсальности, при описании температурной зависимости относительной намагниченности $m(T)$ в данной работе применялась двумерная XY-модель:

$$m(T, \theta, x) \simeq \left[\frac{T_c(\theta, x) - T}{T_c(\theta, x)} \right]^{0.23}, \quad (11)$$

Критическая температура магнитного упорядочения моноатомной пленки зависит от параметра покрытия θ и концентрации компонентов сплава

$$T_c(\theta, x) = \theta [xT_c^{Fe}(\theta=1) + (1-x)T_c^{Ni}(\theta=1)], \quad (12)$$

где $T_c^{Fe}(\theta=1) = 521$ К, $T_c^{Ni}(\theta=1) = 209$ К.

Неоднородное пространственное распределение намагниченности в приповерхностном слое пропорционально вкладу в электронную плотность от магнитных атомов адсорбата, поэтому можно записать следующее распределение для намагниченности:

$$m(z) = \begin{cases} 0.5m_2 e^{\beta z} [e^{\beta l} - 1] + 0.5m_3 e^{\beta z} [1 - e^{-\beta h}], & z < -l, \\ m_2 [1 - 0.5e^{\beta z} - 0.5e^{-\beta(z+l)}] + 0.5m_3 e^{\beta z} [1 - e^{-\beta h}], & -l < z < 0 \\ 0.5m_2 e^{-\beta z} [1 - e^{-\beta l}] + m_3 [1 - 0.5e^{-\beta z} - 0.5e^{\beta(z-h)}], & 0 < z < h \\ 0.5m_2 e^{-\beta z} [1 - e^{-\beta l}] + 0.5m_3 e^{-\beta z} [e^{\beta h} - 1], & z > h \end{cases}. \quad (13)$$

где $m_2 = m(T, \theta, x) p'$ and $m_3 = m(T, \theta, x) p$.

Для расчета энергии адсорбции используется энергия адгезии, которой соответствует работа, необходимая

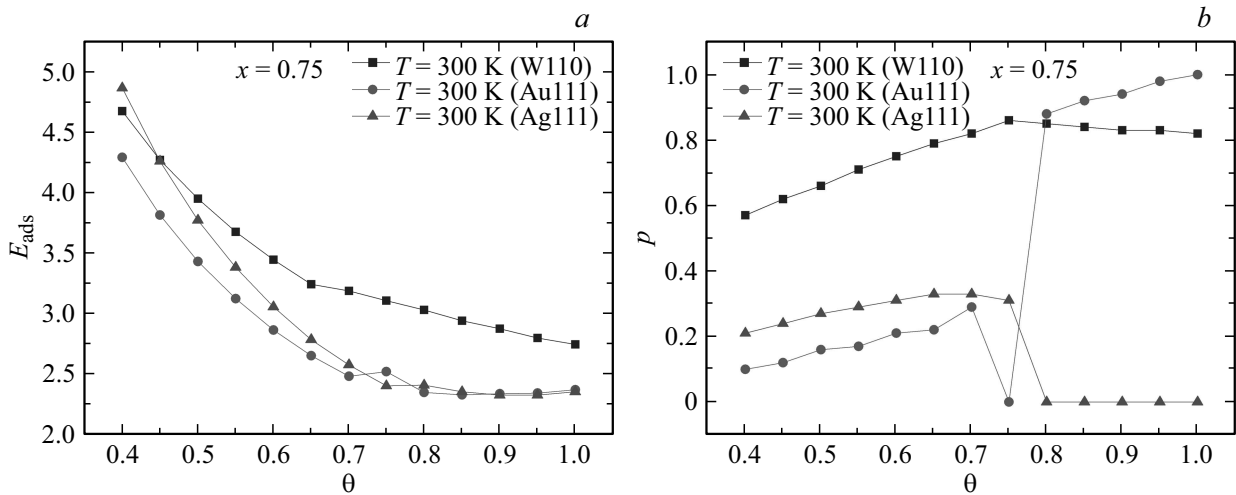


Рис. 1. Зависимость (а) энергии адсорбции E_{ads} и (b) структурного параметра p от покрытия θ при температуре $T = 300$ К для плотноупакованной грани различных материалов подложки при концентрации компонент сплава $x = 0.75$.

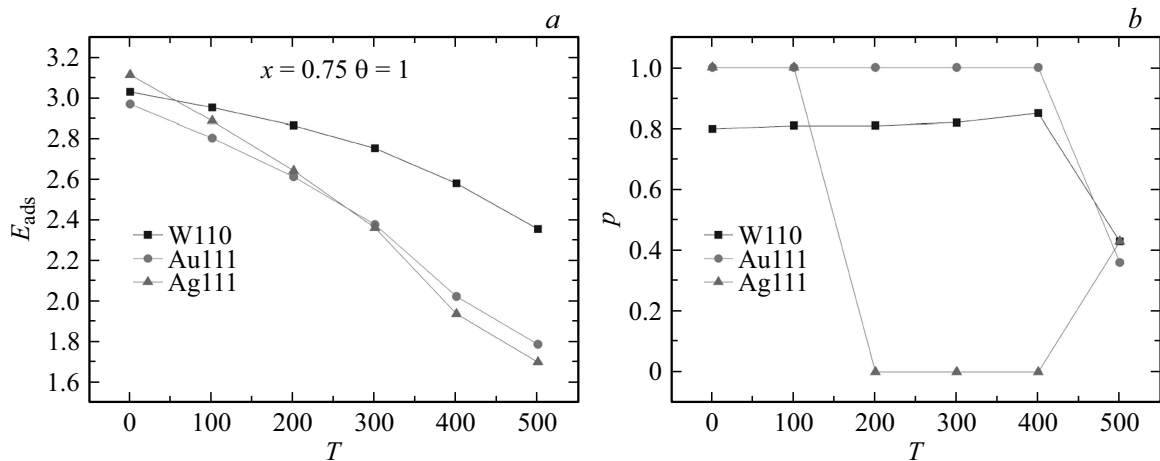


Рис. 2. Зависимость (а) энергии адсорбции E_{ads} и (b) структурного параметра p от температуры для плотноупакованной грани для различных материалов подложки при концентрации компонент сплава $x = 0.75$ и $\theta = 1$.

для удаления адсорбированной частицы с поверхности подложки, т.е. удельная энергия адгезии, приходящаяся на один адсорбированный атом

$$E_{ads} = \min_{p,p'} \left(\frac{\sigma_{surf}^{sub} + 2\sigma_{surf}^{film} - \min_{\beta} \sigma(\beta, p, p')}{n_s^a(p, p')} \right), \quad (14)$$

где n_s^a — поверхностная концентрация адатомов, σ_{surf}^{sub} и σ_{surf}^{film} — поверхностные энергии материалов подложки и пленки соответственно.

3. Результаты расчетов энергии адсорбции с учетом перемешивания

Наиболее стабильными поверхностными гранями материалов и пленок являются плотноупакованные грани поверхности, поэтому в экспериментальных исследованиях напыление чаще всего осуществляется на них.

Сначала проведем исследование адсорбции на плотноупакованной грани различных материалов подложки.

Результаты расчета параметра p и энергии адсорбции E_{ads} монослойной пленки $Fe_{0.75}Ni_{0.25}$ для плотноупакованной грани поверхности немагнитных подложек W, Ag и Au представлены на рис. 1 в зависимости от параметра покрытия при комнатной температуре и на рис. 2 в зависимости от температуры при параметре покрытия $\theta = 1$, когда число атомов адсорбата равняется числу атомов на поверхностной грани подложки. Можно заметить, что энергия адсорбции уменьшается как с увеличением параметра θ (рис. 1, а), так и температуры (рис. 2, а). Анализ $p(\theta)$ на рис. 1, б показывает, что для подложек с меньшей поверхностной энергией, чем для адсорбата, как в случае Ag (111), реализуется структура типа „сэндвич“ с $p(\theta) \approx 0$. В противном случае, как для W (110), эффекты перемешивания слабо выражены, и мы видим явную тенденцию к образованию моно-

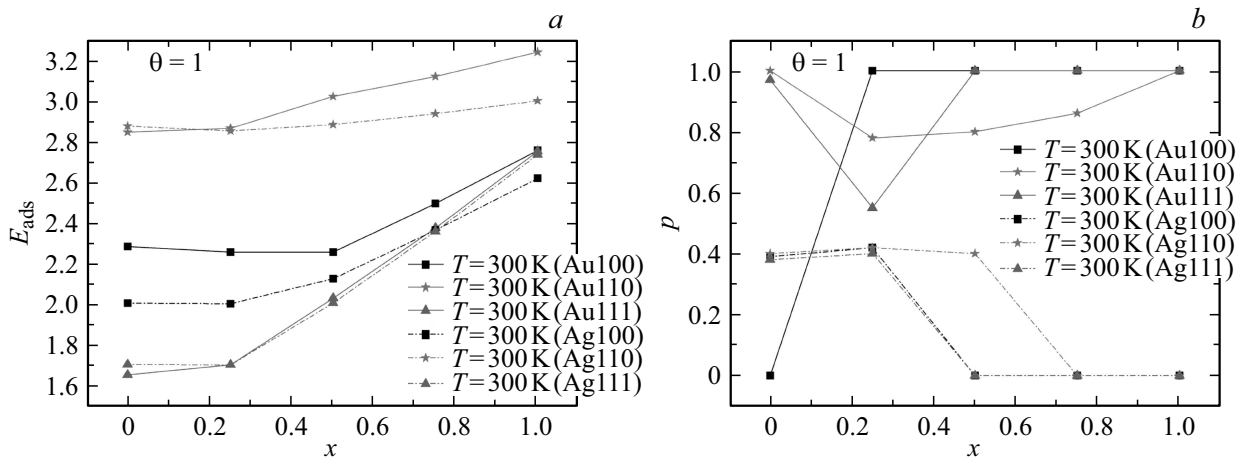


Рис. 3. Зависимость (а) энергии адсорбции E_{ads} и (б) структурного параметра p от концентрации компонентов сплава для систем Fe_xNi_{1-x}/Au и Fe_xNi_{1-x}/Ag при температуре $T = 300$ К и параметра покрытия $\theta = 1$ для различных ориентаций плоскости поверхности.

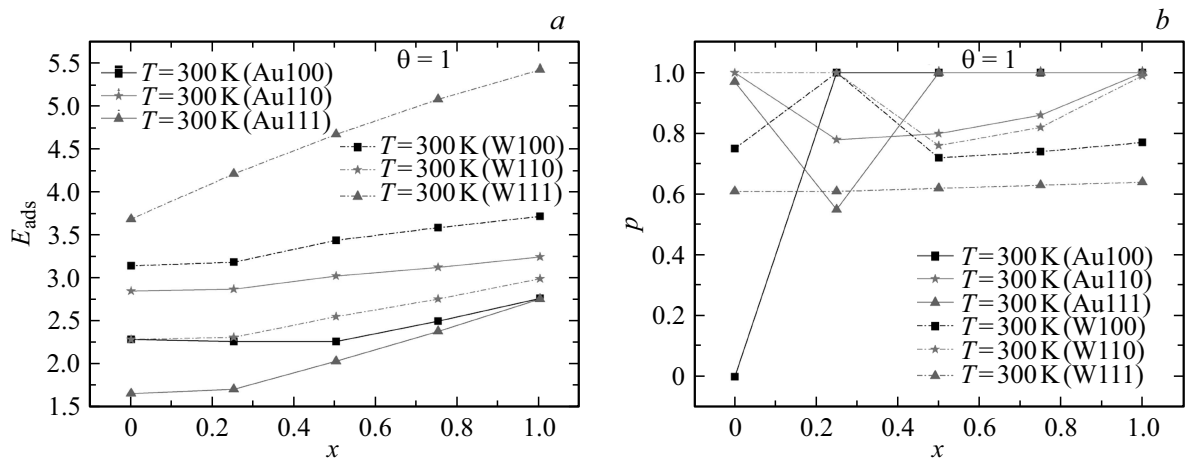


Рис. 4. Зависимость (а) энергии адсорбции E_{ads} и (б) структурного параметра p от концентрации компонентов сплава для систем Fe_xNi_{1-x}/Au и Fe_xNi_{1-x}/W при температуре $T = 300$ К и параметра покрытия $\theta = 1$ для различных ориентаций плоскости поверхности.

слоистой пленки с $p(\theta) \approx 1$ на поверхности подложки. В промежуточном случае как для системы Au(111) ферромагнитное упорядочение приводит к уменьшению перемешивания и образованию монослойной пленки при $\theta \geq 0.8$. Резкое изменение поведения кривой $p(\theta)$ связано с переходом из парамагнитного в ферромагнитное состояние. Так как, согласно формуле (12), при $x = 0.75$ $T_c(\theta < 0.8) < T = 300$ К, т.е. пленка немагнитна.

Поскольку пространственное распределение атомов напыляемой монослойной пленки характеризуется повторением симметрии поверхностной грани подложки, то изменение ориентации поверхностной грани подложки может существенно повлиять на характеристики напыляемой пленки. Поэтому далее были рассчитаны энергия адсорбции и параметр p с учетом ориентации поверхности подложки в зависимости от концентрации компонентов пленочного сплава рис. 3, 4. Как перемешивание, так и энергия адсорбции для плотно упакованной

грани минимальна для всех представленных систем. Энергия адсорбции возрастает с увеличением концентрации железа сильнее для более плотно упакованных граней подложек Ag и Au. Энергия адсорбции атомов сплава на подложке W больше, чем на подложке Ag и Au для соответствующих граней.

4. Расчет структурных и обменных характеристик объемного сплава Fe_xNi_{1-x}

Кроме развитого нами вариационного подхода МФСП, применим к описанию свойств сплава Fe_xNi_{1-x} другие подходы. Так наиболее часто используемым программным пакетом для вычислительных методов моделирования твердых тел из первых принципов является VASP [20]. Другим часто применяемым программным

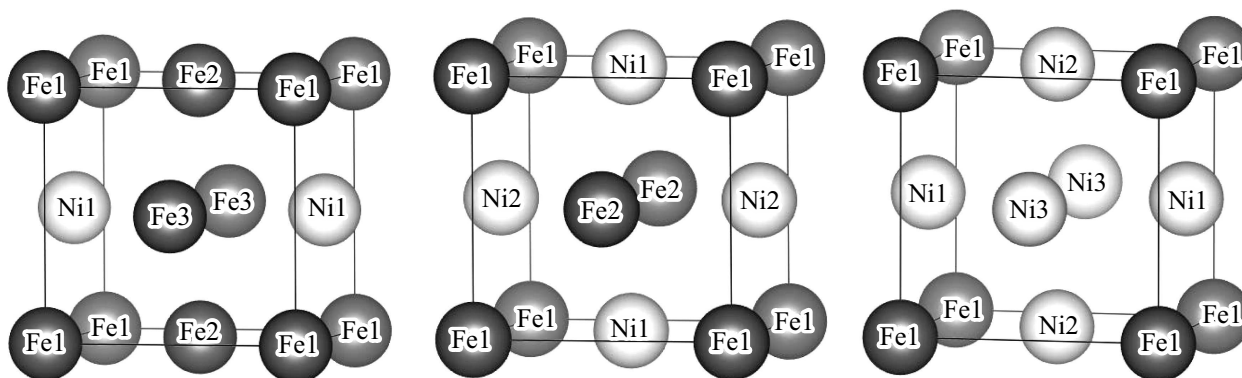


Рис. 5. Кристаллическая структура сплавов Fe_{0.75}Ni_{0.25}, Fe_{0.5}Ni_{0.5}, Fe_{0.25}Ni_{0.75}.

пакетом является SPR-KKR [20], реализующий спин-поляризованный релятивистский метод Корринги–Кона–Ростокера. В данной работе применим его для расчетов магнитных характеристик и обменных интегралов

Рассмотрим сначала объемную структуру. Железони-келевые сплавы с концентрацией Ni ниже 12% имеют ОЦК-структуру, тогда как металлы с содержанием никеля выше 51% имеют ГЦК-структуру. Фазы между

Таблица 1. Результаты расчетов равновесного значения постоянной решетки

Сплав	a_{vasp} , Å	a_{lit} , Å
Fe _{0.75} Ni _{0.25}	3.469	—
Fe _{0.5} Ni _{0.5}	3.432	—
Fe _{0.25} Ni _{0.75}	3.462	—
Ni	3.513	3.52 [22] 3.47 [23]

Таблица 2. Результаты расчетов магнитных моментов

Сплав	μ_{spin}^{Fe} , μ_B	μ_{orbit}^{Fe} , μ_B	μ_{spin}^{Ni} , μ_B	μ_{orbit}^{Ni} , μ_B
Fe _{0.75} Ni _{0.25}	2.1134	0.04997	0.5764	0.03955
Fe _{0.5} Ni _{0.5}	2.3535	0.03959	0.5639	0.0297
Fe _{0.25} Ni _{0.75}	2.8749	0.05364	0.6254	0.037
Ni	—	—	0.5985	0.0497

Таблица 3. Результаты расчетов значения обменного интеграла для ближайших J_1 и для следующих за ближайшими J_2 соседей сплава Fe_xNi_{1-x}

J , 10^{-14} erg	Fe _{0.75} Ni _{0.25}	Fe _{0.5} Ni _{0.5}	Fe _{0.25} Ni _{0.75}	Ni
$J_1^{(Ni-Fe)}$	1.119(3)	1.134(1)	1.821(5)	—
$J_1^{(Fe-Fe)}$	-0.150(2)	2.345(1)	—	—
$J_1^{(Ni-Ni)}$	—	0.471(1)	0.282(1)	0.179
$J_2^{(Fe-Fe)}$	0.685(686)	1.042(106)	0.688(13)	—
$J_2^{(Ni-Ni)}$	-0.0001(1)	-0.038(55)	-0.054(4)	-0.004

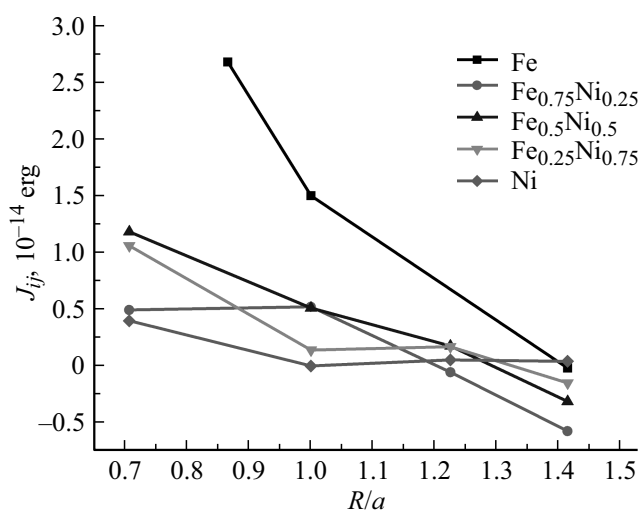


Рис. 6. Зависимость усредненных значений обменного интеграла от приведенного расстояния между атомами.

5%–12% Ni и 51% Ni метастабильны. На рис. 5 представлено схематические изображения ГЦК-ячеек сплава для четырех значений концентраций железа x . Объемной ячейка содержала четыре атома (например для Fe_{0.75}Ni_{0.25} три атома Fe и один атом Ni). В настоящей работе проводились расчеты в программном комплексе VASP равновесных постоянных решетки для ГЦК-сплава Fe_xNi_{1-x} из условия минимума полной энергии ячейки. Получено хорошие согласие рассчитанных значений постоянной решетки для Ni, в пределах разброса экспериментальных данных. Для сплава наблюдаем слабое около 1% изменение постоянной решетки с изменением концентрации железа.

В табл. 2 представлены результаты расчетов в рамках метода SPR-KKR спинового μ_{spin} и орбитального μ_{orb} магнитных моментов, с постоянными рассчитанными в VASP, представленными в табл. 1.

Можно сделать вывод, что увеличение концентрации Ni приводит к увеличению магнитных моментов. Орбитальный магнитные моменты не превышают 5–10% от спинового.

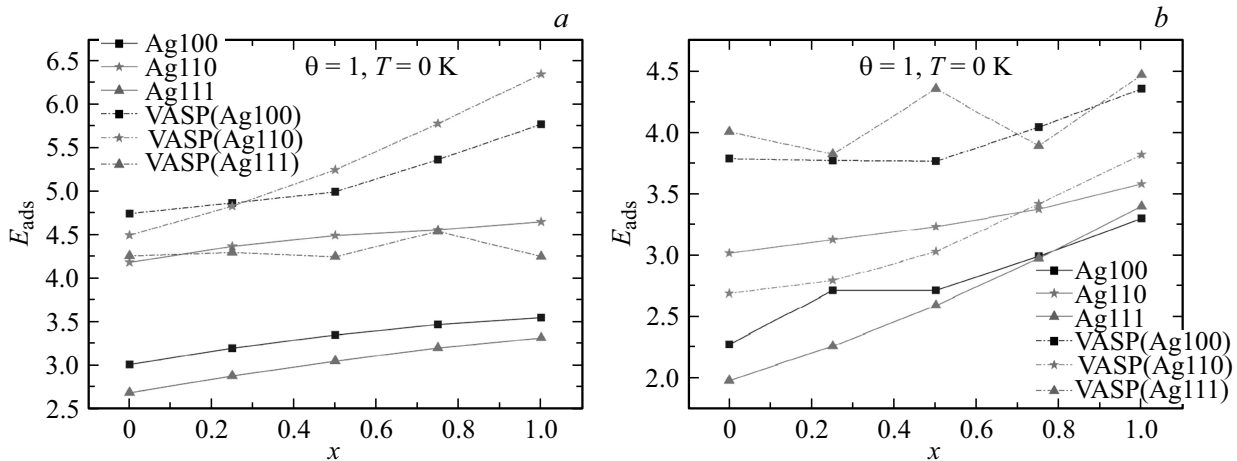


Рис. 7. Зависимость энергии адсорбции E_{ads} от концентрации компонентов сплава, рассчитанные разными методами при температуре $T = 0$ К и покрытии $\theta = 1$ для различных ориентаций грани.

Расчеты значений обменного интеграла для ближайших соседей J_1 и для следующих за ближайшими J_2 , представленные в табл. 3, показали, что значения обменного взаимодействия имеют ферромагнитный характер и с увеличением концентрации никеля для разнотипных ближайших соседей J_1^{Ni-Fe} увеличивается, а для однотипных J_1^{Ni-Ni} уменьшается. Обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями осуществляется только для однотипных атомов и для атомов железа имеет ферромагнитный характер, а для атомов никеля слабый антиферромагнитный.

Из рис. 6 можно увидеть, что при любой концентрации компонентов сплава значения обменного интеграла меньше чем для чистого железа. Резко отличающиеся значения обменных интегралов при концентрации железа $x = 0.75$, вероятно обусловлены метастабильной фазой данной кристаллической структуры.

5. Первопринципные расчеты энергии адсорбции

Для сравнения вариационного и первопринципного подходов при температуре $T = 0$ К и покрытии $\theta = 1$ мы провели расчеты с использованием пакета программ VASP и метода PAW. Монослой сплава Fe_xNi_{1-x} располагались симметрично на каждой стороне пластины толщиной в пять моноатомных слоев Ag и Au для различных ориентаций поверхностной грани. Магнитный момент атомов направлен коллинеарно вдоль оси z . Размерность k -сетки была выбрана $12 \times 12 \times 1$ при энергии обрезания базиса плоских волн равной 350 eV. Постоянная решетки системы выбиралась равной постоянной решетки подложки $a_{Ag} = 5.784 \text{ \AA}$ и $a_{Au} = 5.77 \text{ \AA}$. Проводилась полная оптимизация положений атомов.

Энергия адсорбции вычислялась как разность полной энергии всей многослойной структуры и суммы полной

энергии ее отдельных компонент:

$$E_{ads} = 0.5(E_{film+sub} - E_{Sub} - 8xE_{Fe}^{bulk} - 8(1-x)E_{Ni}^{bulk}), \quad (15)$$

где $E_{film+sub}$ — полная энергия системы пленка/подложка/пленка; E_{Sub} — полная энергия 5 слойной подложки; $E_{Fe}^{bulk} = -8.2423 \text{ eV}$ — полная энергия 1 атома железа в объемной ОЦК-ячейке; $E_{Ni}^{bulk} = -5.4728 \text{ eV}$ — полная энергия 1 атома никеля в объемной ГЦК-ячейке;

Сравнение значений энергии адсорбции как функции концентрации компонентов сплава, рассчитанной при $\theta = 1$, $T = 0$ К в рамках вариационного подхода и первопринципного подходов (VASP), представлено на рис. 7. Наблюдается хорошее качественное согласие результатов. Усреднение плотности заряда ионов по плоскостям, параллельным поверхности, проведенное нами в вариационном методе, может объяснить монотонное поведение зависимости E_{ads} , в отличие от кривых значений полученных VASP. Одной из причин количественного различия является малая толщина подложки в расчетах VASP, в отличие от полубесконечной подложки в вариационном подходе.

6. Заключение

В заключение отметим, что в результате численных исследований были получены значения энергии адсорбции для монослойной пленки Fe_xNi_{1-x} на поверхности с низким индексом Миллера немагнитных подложек Ag, Au и W для различных концентраций компонентов сплава и параметра покрытия адатомами поверхности подложки при температуре от $T = 0$ К до $T_c(\theta, x)$. Результаты расчетов показывают, что энергия адсорбции уменьшается с ростом параметра θ и температуры. Монослойная пленка без перемешивания формируется на подложке Au и W в основном при больших значениях

параметра покрытия и концентрации железа. Энергия адсорбции для плотноупакованной грани минимальна для всех представленных систем и возрастает с увеличением концентрации железа сильнее для W (111) и для более плотноупакованных граней подложек Ag и Au. Энергия адсорбции атомов сплава на подложке W больше, чем на подложке Ag и Au для соответствующих граней.

Из результатов расчета интегралов обменного взаимодействия для ближайших J_1 и следующих за ближайшими соседями J_2 для различных концентраций компонентов сплава следует, что $J_1 > 0$ и $J_2^{(Fe-Fe)} > 0$ способствуют ферромагнитному упорядочению магнитных моментов. Взаимодействие ближайших соседей дополнительно описывается взаимодействием Ni–Fe, но взаимодействие следующих за ближайшими описывается только взаимодействием атомов того же типа. Выявлено, что с ростом концентрации Ni в сплаве значения обменных интегралов J_1^{Ni-Fe} увеличиваются, а J_1^{Ni-Ni} уменьшаются. Обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями для атомов никеля слабый антиферромагнитный характер.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке РФФИ исследовательских проектов № 17-02-00279 и № 18-42-550003 и грантом Президента РФ MD-6868.2018.2. Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

Список литературы

- [1] C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland, G. Lauhoff. Rep. Prog. Phys. **71**, 056501 (2008).
- [2] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. УФН **187**, 817 (2017).
- [3] M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov, I.A. Prudnikova. Surface Physics: Theoretical Models and Experimental Methods, CRC Press, UK (2013).
- [4] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. Теоретические методы расчета структурных, энергетических и магнитных характеристик систем с межфазным взаимодействием. Изд-во Омского гос. ун-та, Омск (2017).
- [5] S. Tumansky. Thin Film Magnetoresistive Sensors. IOP Publishing, Bristol (2001).
- [6] P.P. Freitas, R. Ferreira, S. Cardoso, F. Cardoso. J. Phys. Condens. Matter. **19**, 165221 (2007).
- [7] I. Ennen, D. Kappe, T. Rempel, C. Glenske, A. Hutten. Sensors. **16**, 904 (2016).
- [8] B. Dieny. J. Magn. Magn. Mater. **136**, 335–359 (1994).
- [9] M.A. Correa, F. Bohn, C. Chesman, R.B. da Silva, A.D.C. Viegas, R.L. Sommer. J. Phys. D **43**, 295004 (2010).
- [10] S.O. Volchkov, A.A. Yuvchenko, V.N. Lepalovskij, E Fernandez, G.V. Kurlyandskaya. Solid State Phenomena **190**, 609 (2012).
- [11] J. Schleiwies, G. Schmitz, S. Heitmann, A. Hutten. Appl. Phys. Lett. **78**, 3439 (2001)
- [12] A.V. Svalov, V.O. Vaskovskiy, A. Larranaga, G.V. Kurlyandskaya. Solid State Phenomena **233–234**, 591 (2015).
- [13] R.A. Lopez, J.A. Gonzalez, J.P. Andres, A.V. Svalov, G.V. Kurlyandskaya. Nanomaterials **8**, 780 (2018).
- [14] M.V. Mamonova, N.S. Morozov, V.V. Prudnikov. Phys. Solid State **51**, 2169 (2009).
- [15] S.P. Klimov, M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov. Solid State Phenomena **190**, 27 (2012).
- [16] V. Blum, Ch. Rath, S. Muller, L. Hammer, K. Heinz. Phys. Rev. B **59**, 15966 (1999).
- [17] K. He, L.J. Zhang, X.C. Ma, J.F. Jia, Q.K. Xue, Z.Q. Qiu. Phys. Rev. Lett. **72**, 155432 (2005).
- [18] M.V. Mamonova, V.V. Prudnikov, D.V. Pilipenko. J. Phys.: Conf. Ser. **681**, 012039 (2016).
- [19] X. Fan, J. Wu, Y.P. Chen, M.J. Jerry, H.W. Zhang, J.Q. Xiao. Nature Commun. **4**, 1799 (2013).
- [20] P.G. Kresse, J. Furthmuller. Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- [21] T. Huhne, C. Zecha, H. Ebert. Phys. Rev. B **58** 10238 (1998).
- [22] H.P.J. Wijn. Magnetic Properties of Metals. Springer, Berlin (1991).
- [23] V.L. Moruzzi, J.F. Janak, A.R. Williams. Calculated Electronic Properties of Metals. Pergamon, N. Y. (1978).

Редактор Т.Н. Василевская