

Felületi szennyezők mágneses tulajdonságai

Simon Eszter, V. évf., ELTE TTK

Témavezető: **Újfalussy Balázs** tudományos főmunkatárs
SZFKI Elméleti Szilárdtestfizikai Osztály

Napjainkban egyre nagyobb az érdeklődés a kis méretű nanostruktúrák tulajdonságai iránt. Az ezekre végzett első elvű számításokkal olyan elektromos és mágneses mennyiségeket lehet meghatározni, amely a kísérletek számára még nem hozzáférhetők. Ezen számítások alapja a sűrűségfukcionál-elmélet, amelynek segítségével a kölcsönható elektronrendszer teljes energiáját tudjuk meghatározni. A Hohenberg-Kohn tétel és a Kohn-Sham egyenletekkel egy önkonzisztens eljárást alkalmazhatunk az elektronok fizikai tulajdonságainak meghatározására. A Kohn-Sham egyenletek megoldására több módszer is létezik, az egyik ilyen a Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) módszer, melyet Green-függvényes módszernek is hívnak. Ennek felhasználásával olyan két dimenziós rendszerek tulajdonságait is meg lehet határozni, mint felületek vagy határfelületek.

Jelen munka során Cu(100) és Cu(111) felületre, illetve a rétegbe helyezett egy és két Co szennyező atom állapotosságát és mágneses tulajdonságát vizsgáljuk az úgynevezett KKR beágyazás technika segítségével. Ennek során a szennyezőt szubsztitúciós módon helyezzük a felületre illetve rétegbe. A beágyazás technika legnagyobb előnye, hogy periodikus határfeltételek figyelembe vétele nélkül lehet elvégezni a számításokat, ellentétben az úgynevezett szupercella módszerekkel. A kapott eredményeket pedig a szilárdtestfizikában jól ismert, egyszerű modellekkel értelmezzük.

A dolgozat részletesen bemutatja a számolások során használt elméleti hátteret, kezdve a sűrűségfukcionál-elmélettől a többszörös szórás elméletig. Ezek után következnek az eredmények, melyek tartalmazzák a szennyező állapotosságát, mágneses momentumát, illetve két a szennyező közötti kicserélődési energiát.

A véges méretű nanostruktúrák az adatrögzítésben is nagyon fontos szerepet töltenek be, ezért is szükséges ezeknek az elméleti modellezése.