



Mercredi 30/09/2015, 10h00-12h00

SPEC Amphi Bloch, Bât.774,, Orme des Merisiers

Dongzhe Li

SPEC - groupe GMT

Anisotropie magnéto-cristalline de nanostructures métalliques: étude combinant méthode des liaisons fortes et calculs premiers principes

Résumé

La question cruciale dans l'exploration du stockage ultime à haute densité est l'anisotropie magnéto-cristalline (MCA) qui provient du couplage spin-orbite. Utilisant à la fois la méthode des liaisons fortes et les calculs « premiers principes », nous calculons la MCA de nanocristaux de fer et de cobalt qui peuvent être obtenus par croissance épitaxiale sur un substrat SrTiO₃ avec un contrôle remarquable de leur taille, forme et structure. Afin de définir une décomposition locale appropriée de la MCA, nous avons implémenté le « Théorème de Force » à l'aide d'une formulation grand-canonique dans le code QUANTUM ESPRESSO ainsi que dans notre modèle de liaisons fortes. Il est intéressant de noter que pour les deux éléments, la MCA totale de nanocristaux isolés est largement dominée par les facettes (001) dont il résulte un comportement opposé: une anisotropie « hors-plan » pour les nanocristaux (contenant plusieurs centaines d'atomes) de fer et « dans le plan » pour ceux de cobalt. Nous avons également mis en évidence un fort renforcement de la MCA pour les petits clusters (contenant quelques atomes seulement) déposés sur un substrat SrTiO₃. En conséquence, nous prévoyons que les nanocristaux de fer (même de très petite taille) devraient être magnétiquement plus stables et sont donc de bons candidats potentiels pour le stockage magnétique. Enfin, notre analyse MCA résolu en orbitales s'applique également à d'autres systèmes et permet, par exemple, de prédire le comportement de la MCA de films minces magnétiques après déposition de matériaux organiques comme le graphène ou de molécules tel C60.

Magneto-crystalline anisotropy of metallic nanostructures: Tight-binding and first-principles studies

Abstract

The crucial issue in exploring ultimate density data storage is magneto-crystalline anisotropy (MCA) which originates from spin-orbit coupling. Using both tight-binding and first-principles methods, we report the MCA of Fe and Co nanocrystals that can be grown epitaxially on SrTiO₃ with a remarkable control of their size, shape and structure. In order to define the proper local decomposition of MCA, we implemented the "Force Theorem" within the grand-canonical formulation in QUANTUM ESPRESSO as well as in our tight-binding model. Interestingly, for both elements, the total MCA of free nanocrystals is largely dominated by (001) facets resulting in the opposite behavior: out-of-plane and in-plane magnetization direction is favored in Fe and Co nanocrystals (containing up to several hundred atoms), respectively. We also find a strong enhancement of MCA for small clusters (containing only several atoms) upon their deposition on a SrTiO₃ substrate. As a consequence, we predict that the Fe nanocrystals (even rather small) should be magnetically stable and are thus good potential candidates for magnetic storage devices. Finally, our rather

general orbital-resolved analysis of MCA applies also to other systems and allows, for example, predicting the MCA behavior of magnetic thin films upon covering by various organic materials such as graphene or C60 molecule.