

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ
ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥΠΟΛΗ, 157 84 ΑΘΗΝΑ

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥΠΟΛΗ, 157 80 ΑΘΗΝΑ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΑ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

Δευτέρα

12/4/2010

ώρα 1:15 μ.μ.

Πολυτεχνειούπολη,
Αίθουσα Σεμιναρίων Τομέα Φυσικής,
(Αίθουσα 027, Ισόγειο κτιρίου Φυσικής)

Ηλεκτρονική δομή μαγνητικών υλικών με εφαρμογές στη μαγνητοηλεκτρονική: Μελέτη βασισμένη σε υπολογισμούς από πρώτες αρχές

Φοίβος Μαυρόπουλος

Institut für Festkörperforschung and Institute for Advanced Simulation,
Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich, Γερμανία

Ο τομέας της μαγνητοηλεκτρονικής (*magnetoelectronics* ή *spintronics*) στοχεύει στην εκμετάλλευση του ηλεκτρονικού σπιν για την αποτελεσματικότερη αποθήκευση και μετάδοση πληροφορίας. Η ανάπτυξη νέων μαγνητικών υλικών και υβριδίων είναι σημαντικότερη για τη μαγνητοηλεκτρονική. Στην παρουσίαση θα δοθεί έμφαση στη θεωρητική μελέτη σε δύο σχετικές περιοχές:

(α) Στα μεταλλικά σιδηρομαγνητικά κράματα $Fe_{3-x}Mn_xSi$, τα οποία παρουσιάζουν ενδιαφέρον για εφαρμογή σε μαγνητικές διόδους σήραγγος. Σύμφωνα με πειραματικά δεδομένα, η μαγνήτιση και η θερμοκρασία Curie μειώνονται ως συνάρτηση της συγκέντρωσης Mn. Με τη βοήθεια υπολογισμών βασισμένων στη θεωρία του συναρτησιακού της πυκνότητας βρήκαμε ότι αυτή η συμπεριφορά οφείλεται στη μετατόπιση ηλεκτρονικών σταθμών λόγω μεταβολής του υβριδισμού των κυματοσυναρτήσεων, ταυτόχρονα με την απαίτηση για τοπική ηλεκτρική ουδετερότητα. Προβλέπουμε επίσης ότι η πόλωση σπιν στη στάθμη Fermi αυξάνει συναρτήσει της συγκέντρωσης Mn, φτάνοντας το ιδεατό 100% για $x > 75\%$.

(β) Σε εμπλουτισμένους μαγνητικούς μονωτές που παρουσιάζουν μαγνητισμό τύπου sp, και ειδικότερα στην εμφάνιση σιδηρομαγνητικής τάξης στο μονωτή MgO εμπλουτισμένο με N. Καθώς το άτομο αζώτου είναι λιγότερο ηλεκτραρνητικό από το άτομο οξυγόνου, οι πρόσμιξεις N παρουσιάζουν μια οπή, πολωμένη κατά σπιν, περίπου 0.5 eV υψηλότερα από το όριο της ζώνης σθένους του MgO. Οι υπολογισμοί μας δείχνουν ότι οι κυματοσυναρτήσεις των πολωμένων οπών είναι επαρκώς εκτεταμένες ώστε, σε χαμηλές θερμοκρασίες, η επικάλυψή τους να προκαλεί εμφάνιση σιδηρομαγνητικής τάξης για συγκεντρώσεις N άνω του 2-3%. Ωστόσο ενδέχεται να κυριαρχούν φαινόμενα ισχυρού συσχετισμού ηλεκτρονίων τα οποία αλλάζουν την εικόνα της ηλεκτρονικής δομής, προκαλώντας αλληλεπιδράσεις υπερανταλλαγής (*superexchange*) και τροχιακής τάξης (*orbital ordering*), μειώνοντας ακόμα περισσότερο τη θερμοκρασία Curie. Θα συζητήσουμε τις συνθήκες υπό τις οποίες ενδέχεται εμφάνιση τέτοιων φαινομένων, καθώς και τη φυσική των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής στο $MgO_{1-x}N_x$.

Ο κ. Μαυρόπουλος είναι υποψήφιος για τη θέση Επίκουρου Καθηγητή με γνωστικό αντικείμενο «Θεωρητική Φυσική Συμπυκνωμένης Υλης» στον Τομέα Φυσικής

Υπεύθυνοι Οργάνωσης Σεμιναρίων:

Σ. Γλένης
Γ. Βαρελογιάννης

Πανεπιστήμιο Αθηνών,
Ε. Μ. Π.

τηλ. 210 7276811
τηλ. 2107723710

sglenis@phys.uoa.gr
varelogi@central.ntua.gr