

Programul IDEI, Proiecte de cercetare exploratorie

privind implementarea proiectului **Cod PN-II-ID-PCE-2012-4-0028**
cu titlul:

Joncțiuni magnetice pe bază de halogenuri alcaline și de argint
în perioada septembrie 2013 – decembrie 2014

Faza unică 2013

Obiective:

- 1. Proprietăți structurale, magnetice și de transport de spin în sistemul Fe/CaS/Fe(001)**
- 2. Rolul interfețelor Fe/NaCl(001) în determinarea proprietăților fizice ale joncțiunilor tunel de tip Fe/NaCl/Fe(001)**
- 3. Proprietăți magnetice în sisteme "half"-metalice, de tip B₁**

Toate obiectivele prevăzute în planul de realizare au fost finalizate, așa cum rezultă din raportul de fază

1. Proprietăți structurale, magnetice și de transport de spin în sistemul Fe/CaS/Fe(001)

1.1 Calculul structurii electronice a compusului CaS

Structura de bandă a sulfuri de calciu, CaS s-a determinat folosind formalismul TB-LMTO și respectiv parametrizarea Vosko-Vilk-Nussair pentru potențialul de schimb. În Fig.1.1 prezentăm structura de bandă și densitatea totală a stărilor pentru compusul CaS. Monosulfura de calciu este un semiconductor având vârful în bandă de valență, în punctul Γ_{15} , iar capătul benzii de conducție în punctul X_3 . Are un "gap" în bandă de 0.146Ry. Partea inferioară a benzii de valență este determinată de stările S(3s) și este separată de benzile de valență superioare printr-un "gap" de $\approx 0,5$ Ry. Benzile de valență superioare au un caracter predominant S(3p), totodată cu contribuții mici ale stărilor 4s, 4p și 3d ale calciului. Banda de conducție constă predominant din stările Ca(3d) și respectiv Ca(4s).

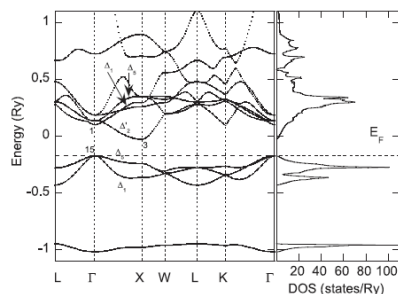


Fig.1.1

1.2 Studiul proprietăților magnetice ale joncțiunilor tunel Fe/CaS/Fe(001).

Admițând o heterostructură de tip 6Fe/9CaS/7Fe, am calculat proprietățile magnetice considerând două configurații posibile: (1) IC₁, la care atomii de Fe sunt aranjați deasupra celor de Ca și S, și respectiv

(2) IC₂, în care atomii de fier sunt localizați deasupra spațiilor libere situate între pozițiile atomilor de Ca și respectiv S.

Plecând de la aceste configurații, am determinat transferul de sarcină și profilele magnetice ale celor două heterostructuri – Fig.1.2. Pentru ambele configurații, transferul de sarcină este relativ mic și localizat în principal la interfețe. În cazul interfeței IC₁, ca urmare a electronegativității mai mari a sulfului, transferul de sarcină este ușor mai mare pentru atomii Fe₂, poziționați deasupra atomilor de sulf (-0.406 electroni), față de cei de tip Fe₁, situați deasupra celor din calciu (-0.367 electroni). Ca urmare, în configurația IC₁, apare o densitate de sarcină care "oscilează" în antifază cu cea în stratul de CaS interfacial, conducând la diminuarea energiei corespunzătoare interacțiilor electrostatice și amplificând stabilitatea interfeței. Se evidențiază o amplificare a momentului magnetic al fierului la interfețele Fe/CaS (001), în geometria IC₁ (2.92 μ_B comparativ cu 2,46 μ_B în configurația IC₂).

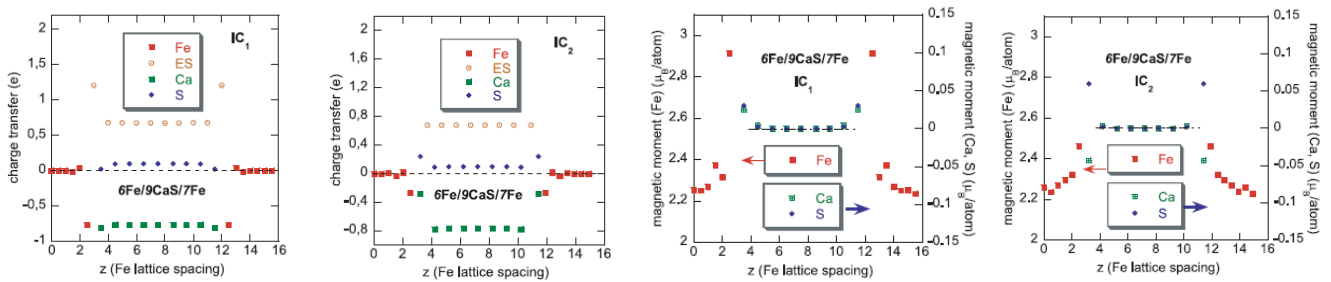


Fig.1.2

1.3. Studiul proprietăților de transport ale joncțiunilor tunel

Evoluțiile conductanțelor dependente de spin precum și a raportului TMR, în funcție de grosimea m a barierei, în joncțiunile tunel 6Fe/mCaS/7Fe (001) sunt redată în Fig. 1.3. Pentru ambele configurații conductanțele descresc exponențial cu lărgimea barierei. În cazul interfeței de tip IC₁ conductanța FM în banda cu spini minoritari este ușor mai mare comparativ cu cea determinată în cazul dispunerii AFM a magnetizărilor electrozilor, sau pentru banda cu spini minoritari în configurația FM. O valoare maximă TMR de 350 % s-a obținut pentru o barieră având o lărgime formată din $m = 7-8$ straturi. În cazul configurației interfeței de tip IC₂, conductanța FM în banda cu spini minoritari variază mai lent comparativ cu valorile obținute în banda cu spini majoritari (FM) și ambele conductanțe, pentru o dispunere AFM a magnetizărilor electrozilor, și atinge o valoare maximă de 5000 % pentru $m = 10$.

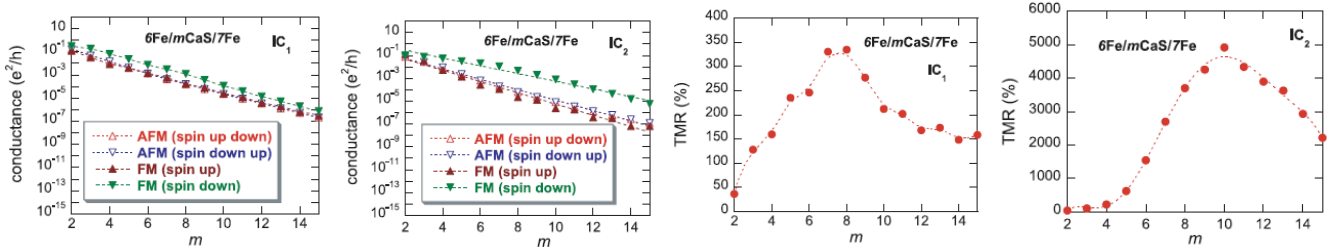


Fig.1.3

Am determinat conductanțele parțial rezolvate $k_{||}$ în joncțiunile tunel 6Fe/mCaS/7Fe(001) cu $m = 5$ sau 9, în ambele configurații ale interfețelor (IC₁ sau IC₂). Unele rezultate sunt prezentate în Fig.1.4.

Curenții de tunelare se modifică considerabil în funcție de canalul de spin și depinde deasemenea de structura interfeței Fe/CaS(001). Contribuțiile principale la conductanța FM, pentru heterostructurile de tip IC₁, sunt date de stările Δ_1 , care prezintă un maxim în jurul punctului Γ , precum și de stările Δ_5 . În cazul configurației interfeței de tip IC₂, stările Δ_1 centrate în punctul Γ sunt decuplate ca urmare a structurii interfeței. Stările Δ_1 au funcții de undă de tip s, p_z sau d₂. La interfața IC₁, ca urmare a hibridizării puternice Fe(3d₂)-S(3p_z), stările Δ_1 vor avea o contribuție importantă la conductanța FM în canalul cu spini majoritari, în timp ce la interfețele de tip IC₂, ca urmare a ruperii legăturii Fe-S, scade contribuția stărilor Δ_1 la conductanța FM în canalul cu spini majoritari.

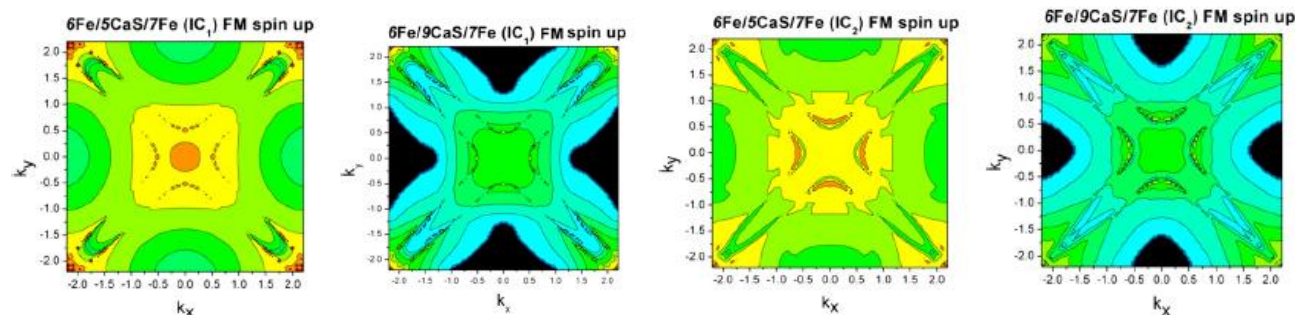


Fig.1.4

În concluzie, remarcăm faptul că o valoare TMR de 5000 % , poate fi obținută în joncțiunile tunel de tip Fe/CaS/Fe(001) în cazul unei interfețe de tip IC₂.

Rezultatele științifice obținute au fost publicate în lucrarea:

”Structural, electronic, magnetic and spin dependent transport properties of Fe/CaS/Fe(001) heterostructures” P. Vlaic, E.Burzo, K. Carva, J. Appl.Phys. 113, 053715 (2013) IF=2.185

2. Rolul interfețelor Fe/NaCl(001) în determinarea proprietăților fizice ale joncțiunilor tunel de tip Fe/NaCl/Fe(001)

2.1 Analiza stabilității interfețelor Fe/NaCl/Fe(001) în suprastructura de tip c(2×2)

Ca urmare a doar unei mici diferențe între parametrii de rețea ai fierului și respectiv NaCl, la interfețele de tip Fe/NaCl(001), am studiat pentru început stabilitatea la interfețe considerând 3 posibile configurații (IC₁, IC₂, IC₃) – Fig.2.1 și 2.2). Calculele efectuate, atât pentru stările FM și AFM ale electrozilor au condus la o constată a rețelei, la echilibru de 2.75Å, independentă de geometria interfeței. Această valoare este ușor mai mică decât constanta de rețea a fierului (2.87Å) și respectiv jumătate din constanta de rețea a NaCl, determinată experimental. Menționăm faptul că formalismul LSDA utilizat, subestimează prin câteva procente parametrii de rețea calculați. Heterostructurile cu interfețe Fe/NaCl/Fe(001), în configurația IC₁, au energii mai joase comparativ cu cele având configurația IC₂ la interfață, pentru a < 2.95 Å – Fig.2.3. Ca atare, aceasta configurație se relevă mai probabilă în cazul

sistemului studiat, plecând atât de la valorile calculate precum și de la parametri de rețea determinați experimental.

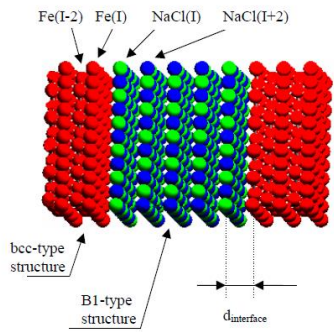


Fig.2.1

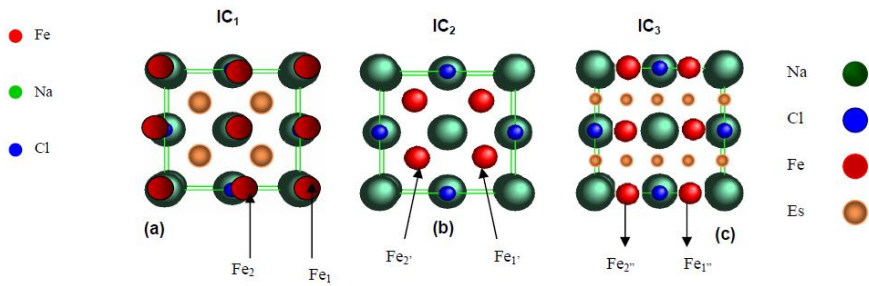


Fig.2.2

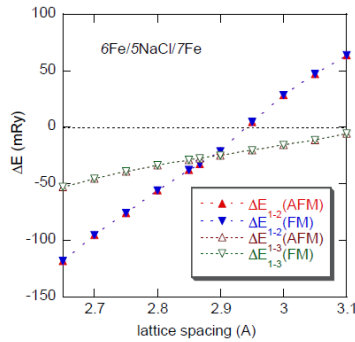


Fig.2.3

2.2. Evoluția proprietăților magnetice în corelație cu structura interfacială

Studiul a fost realizat pentru toate tipurile de interfețe. În cele ce urmează ne vom referi, în particular, la rezultatele obținute pentru interfața de tip IC₁. Transferul de sarcină precum și profilul magnetizărilor, în cazul unei joncțiuni magnetice tunel 6Fe/9NaCl/7Fe(001) de tip IC₁, sunt redată în Fig.2.4. Transferul de sarcină este relativ mic și localizat în principal la interfața Fe/NaCl(001). Consistent cu electronegativitatea mai mare a clorului, diminuarea sarcini electronice este mai mare pentru atomii de fier Fe₂(I) situați deasupra pozițiilor anionilor IC₁ comparativ cu locația acestora deasupra pozițiilor cationice (Na). Ca urmare, densitatea de sarcină în straturile de fier, la interfață, fluctuează în antifază cu sarcinile pe ionii de Na și Cl, minimizând astfel energia electrostatică și amplificând stabilitatea interfeței Fe/NaCl(001). Cuplajul de schimb dintre straturi, în heterostructurile Fe/NaCl/Fe(001), este feromagnetic (FM) pentru configurațiile de tip IC₁ și IC₃ și antiferomagnetic (AFM) pentru aranjamentul IC₂. În toate cazurile cuplajul de schimb scade exponențial cu grosimea barierei. Pentru configurația barierei de tip IC₁, conductanța în dispunerea FM a electrozilor, este mai mare în canalul cu spin minoritari, în particular pentru grosimi mai mari ale barierei. Polarizarea de spin a curentului de tunelare (FM) crește rapid cu grosimea barierei și ca atare se obțin valori TMR de $3.2 \cdot 10^4$ % pentru joncțiuni de tip 6Fe/mNaCl/7Fe cu $m > 10$ – Fig.2.5. Pentru configurațiile IC₂ sau IC₃, valorile TMR variază puțin cu grosimea stratului izolator și nu depășesc 500 %.

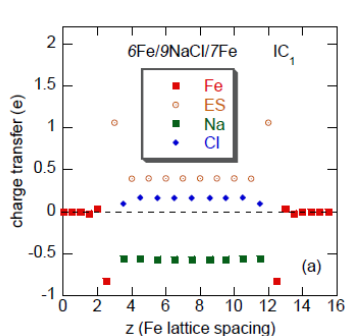


Fig.2.4

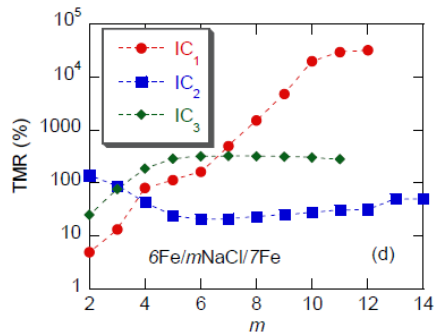
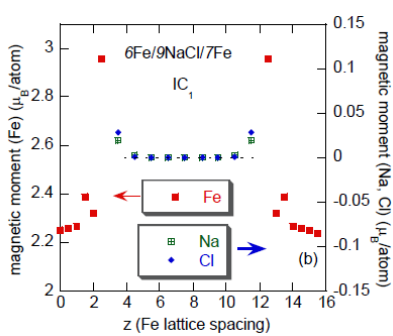


Fig.2.5

Am studiat și efectul interdifuziei la interfața Fe/NaCl(001) în configurația IC₁ – Fig.2.6. Interdifuziile la interfețele Fe₁(Fe₂)_{1-x}Cl_x/NaCl_{1-x}Fe_x sau Fe₂(Fe₁)_{1-x}Na_x/Na_{1-x}Fe_xCl afectează semnificativ proprietățile magnetorezistive ale joncțiunilor tunel studiate.

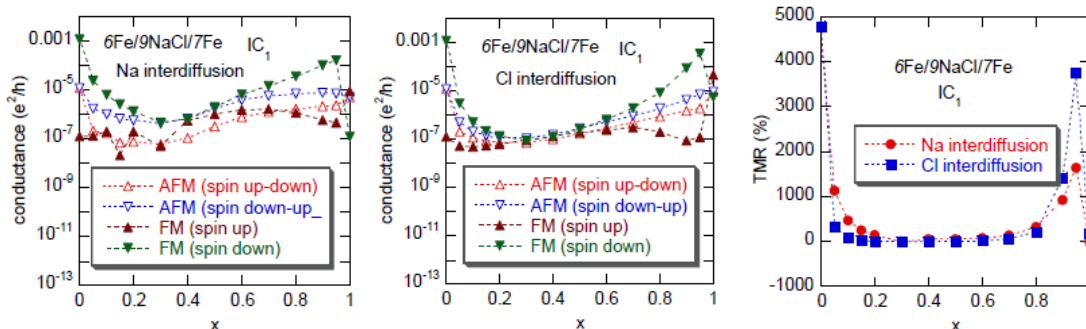


Fig.2.6

Rezultatele obținute în cadrul proiectului au fost publicate:

”Impact of Fe/NaCl(001) interface structure on electronic, magnetic and spin-polarized transport properties of Fe/NaCl/Fe(001) heterojunctions: an ab initio study”, P. Vlaic, E.Burzo and K.Carva, Journal of Alloys and Compounds, 598, 41-53 (2014) IF = 2.734.

3. Proprietăți magnetice în sisteme ”half”-metalice, de tip B₁

3.1. Studiul proprietăților magnetice ale probelor masive

Materiale de tip ”half” metalic au o comportare metalică pentru o direcție a spinului și ca atare au o polarizare de spin de 100 %, la nivelul Fermi. În acest context am studiat proprietățile fizice ale compusului SrC. Compusul metastabil SrC este de tip ”half” metalic. Parametrul de rețea, la echilibru, este de 5,55 Å și un moment magnetic în starea masivă de 2μ_B/f.u. Ca atare acest compus este compatibil epitaxial cu bariere de tip NaCl (a = 2.64 Å) care au un ”gap” direct în bandă de tip B₁ precum și cu cele de tip CaS (a = 5.96 Å) având un ”gap” indirect Γ-X.

3.2 Evoluția proprietăților fizice ale joncțiunilor

Plecând de la aceste rezultate, am studiat proprietățile magnetice și electronice, în stare fundamentală, ale structurilor de tip multistrat SrC/NaCl(CaS)/SrC(001) – Fig3.1. În acest sistem, relațiile epitaxiale între straturile componente sunt de tip SrC[100]|| [100]NaCl(CaS); Pd[110]||SrC[100].

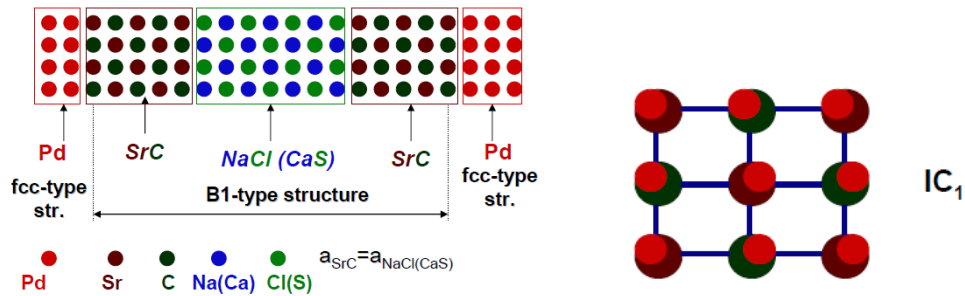


Fig.3.1

Proprietățile magnetice și electronice ale heterostructurii 2Pd/5SrC/9NaCl/5SrC/3Pd(001) sunt redată în Fig. 3.2. La interfețele SrC/NaCl(CaS)(001) apare doar un mic transfer de sarcină. Ca atare momentele magnetice pe atomii de Sr și C sunt doar ușor diminuate comparativ cu cele corespunzătoare probei masive. Polarizările de spin induse, pe pozițiile interfaciale Cl(S) și Na(Cl), sunt relativ mici.

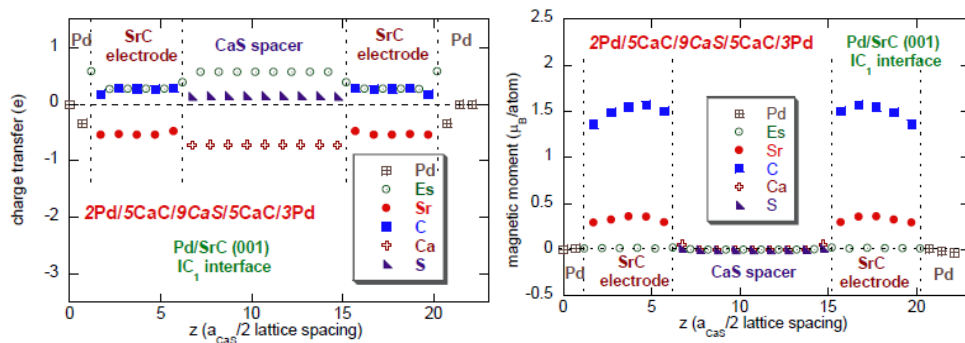


Fig.3.2

Cuplajul de schimb în cazul joncțiunilor pe bază de NaCl este feromagnetic, în timp ce pentru CaS este antiferomagnetic. Atât pentru structurile SrC/NaCl/SrCl(001) precum și SrC/CaS/SrC(001) cuplajele de schimb sunt relativ mici și scad exponențial cu grosimea barierei așa am evidențiat în sistemul multistrat având configurația 2Pd/5SrC/nNaCl/CaS/5SrC/3Pd – Fig.3.3.

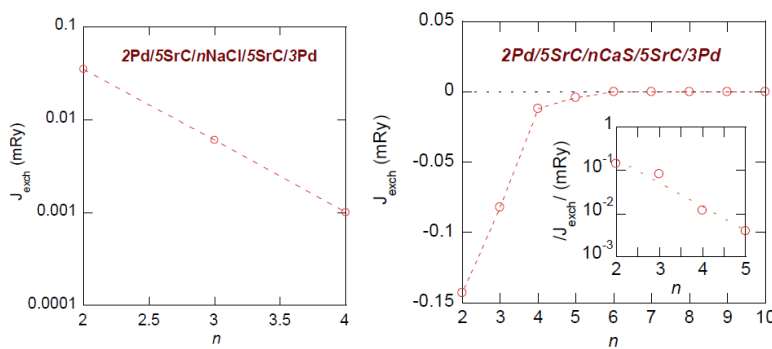


Fig.3.3

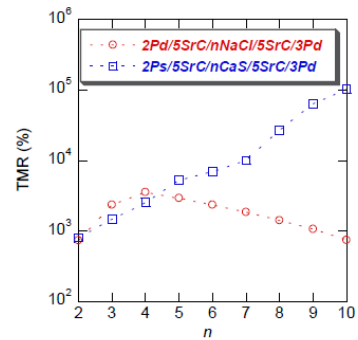


Fig.3.4

Un element caracteristic în procesul de transport în sistemele studiate îl constituie faptul că în joncțiunile magnetice pe bază de CaS, magnetorezistența crește exponențial cu grosimea barierei – Fig.3.4. În același timp, pentru bariera de NaCl, magnetorezistențele prin tunelare au o valoare maximă pentru $n = 4$ straturi și anume de $4 \cdot 10^3$ %.

Rezultatele științifice obținute, asupra acestui sistem, au fost prezentate la conferința "Fifth Seeheim Conference on Magnetism" Frankfurt, Germany, 29.09 – 3.10.2013 în lucrarea:

"Magnetic and spin dependent transport properties of SrC/NaCl/(CaS)/SrC (001) tunnel junctions", P. Vlaic, E. Burzo

In cadrul proiectului am studiat deasemenea comportarea sub presiune a compușilor YCo_5 și $GdCo_5$ având aplicații în tehnică. Aceste studii au fost concretizate prin publicarea rezultatelor științifice în lucrarea:

"Pressure effects on crystal structures and magnetic properties of RCO_5 ($R = Y$ or Gd) compounds"
E.Burzo, P. Vlaic, AIP Conf. Proc. 1564, 96 (2013)

Faza unică 2014

Obiective prevăzute în planul de realizare pentru anul 2014:

- 1. Joncțiuni tunel de tip Fe/AgCl/Fe(001)**
- 2. Proprietăți fizice ale joncțiunilor tunel de tip CaC/X/CaC(001) cu X = LiCl.**

Obiectivele de mai sus, prevăzute în planul de realizare pentru anul 2014, au fost realizate. În plus, în cadrul obiectivului 3, al proiectului prevăzut pentru anul 2015, "Perovskite duble pe baza CaLaFeMo" a fost deja publicată o lucrare în revista J.Alloys Compounds (IF = 2.734). Totodată sau prezentat 3 lecții invitate la Conferințe Internaționale, două urmând să apară în AIP Conference Proc. (USA), toate acestea indexate ISI.

1. Joncțiuni tunel de tip Fe/AgCl/Fe(001)

Structura joncțiunilor Fe/AgCl/Fe(001) implică prezența electrozilor de fier având structura cvc și respectiv o structură de tip B1 pentru AgCl. Pentru interfața Fe/AgCl(001) am considerat relația epitaxială Fe(001) [100]||[100]AgCl[001].

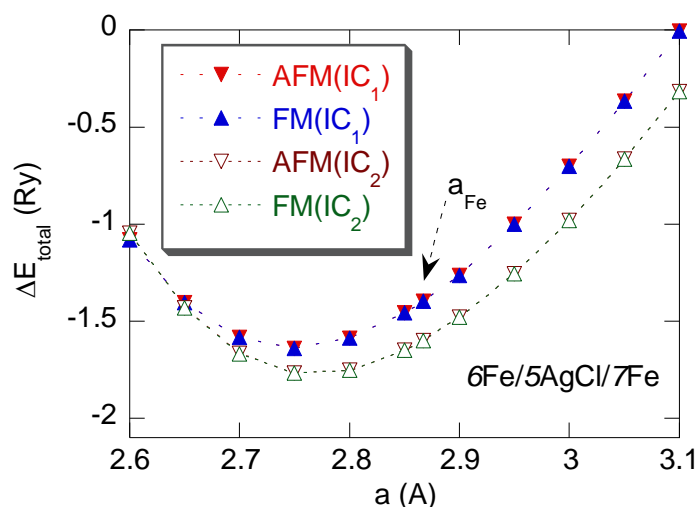


Fig.1.1

Am analizat două tipuri de interfețe: IC_1 în care atomii de fier sunt situați deasupra pozițiilor ocupate de Ag și Cl și respectiv IC_2 în care atomii de fier sunt situați deasupra spațiilor libere dintre ionii de Ag și Cl. Calculele self consistente evidențiază stabilitatea ambelor heterostructuri de tip Fe/AgCl/Fe(100), după cum se observa în cazul configurației 6Fe/5AgCl/7Fe(001) – Fig.1.1. Distanța spațială de echilibru este de 2.75 Å, independentă de configurația interfacială sau starea magnetică. Valoarea de mai sus este mai mică cu 4 % comparativ cu constanta de rețea a fierului metalic.

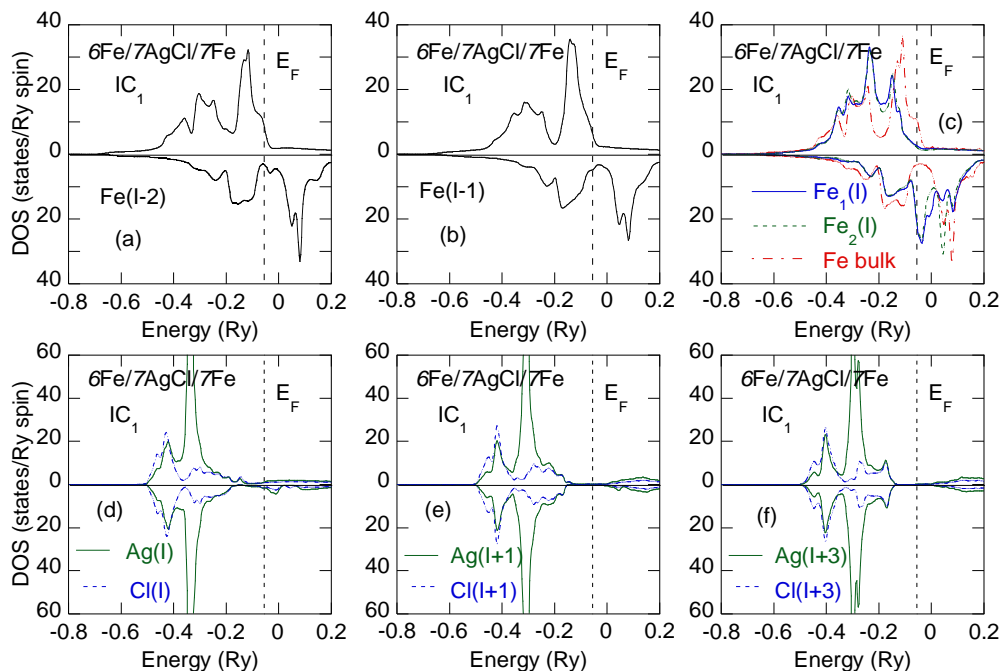


Fig.1.2

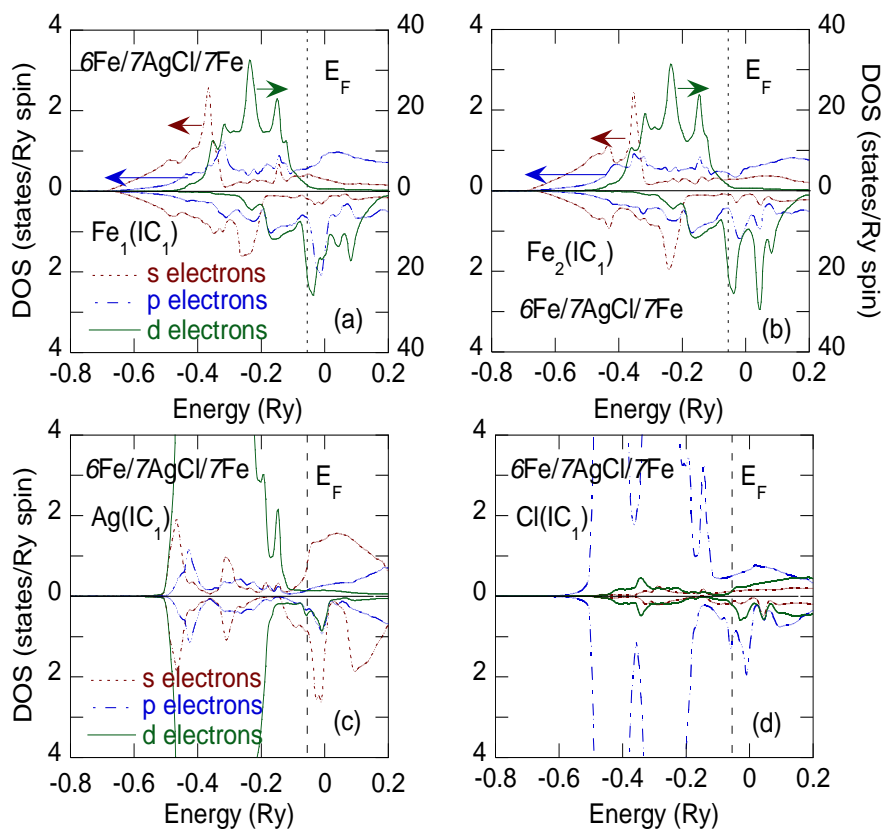


Fig.1.3

Densitățile de stări pentru heterostructurile 6Fe/7AgCl/7Fe având configurația IC₁ sunt redată în Fig.1.2, iar în Fig.1.3 se prezintă densitățile de stări pentru atomii de Fe, Ag și Cl interfaciali în configurația IC₂. Ca urmare a interacțiunilor dintre straturile interfaciale de Fe și AgCl, pot fi evidențiate stări ale fierului având un ”gap” indus (MIGS) – Fig.1.2d. Stările induse apar atât la ionii de Ag precum și Cl, făcând astfel practic metalice interfețele de tip Fe/AgCl(001).

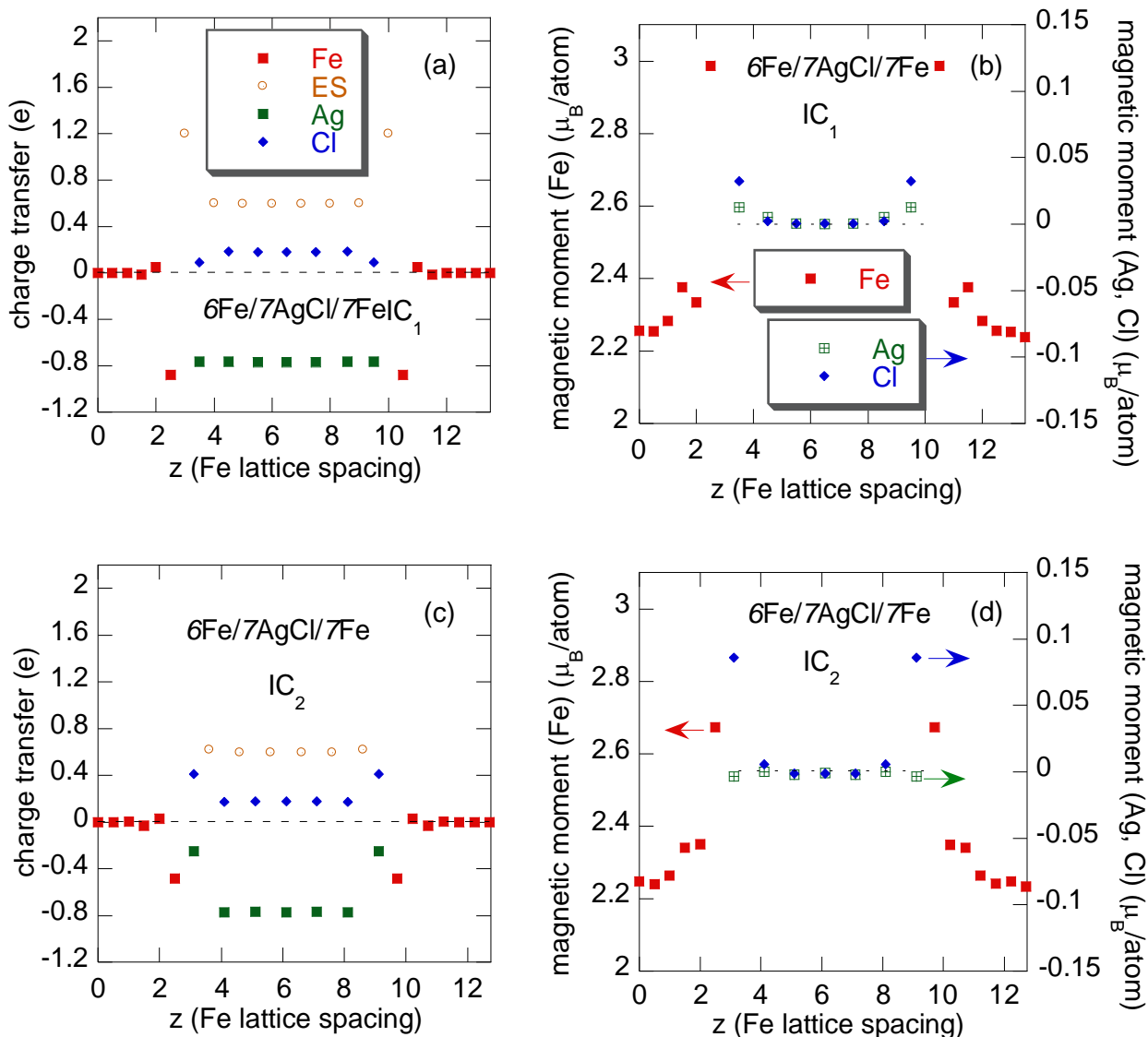


Fig.1.4

Transferul de sarcină pe fiecare strat, comparativ cu atomul neutru precum și profilele magnetizărilor heterostructurile 6Fe/7AgCl/7Fe(001), având geometri interfaciale de tip IC₁ și respectiv IC₂, sunt redată în Fig.1.4. Ca urmare a faptului ca nivelul Fermi al fierului este localizat la fundul benzii de conducție a AgCl, apare un transfer de sarcină și astfel se formează stări MIGS în ”gapul” de bandă a barierei de AgCl

Momentele magnetice ale fierului la interfață, în configurația IC₁, sunt amplificate comparativ cu valoarea determinată în Fe masiv. Creșteri mai mici ale momentului fierului pot fi observate în configurația IC₂. În această situație există un grad mai mare de hibridizare a benzii 3d a fierului.

În cazul ambelor interfețe cuplajul de schimb oscilează în lungul barierei între stările feromagnetice (FM) și antiferomagnetice (AFM) – Fig.1.5.. Se evidențiază două regimuri de oscilații. Primul este caracteristic pentru barierele având un număr de straturi $m = 3$ pentru configurația IC_1 și $m = 5$ pentru IC_2 . Pentru bariere mai largi, cuplajele de schimb prezintă oscilații amortizate.

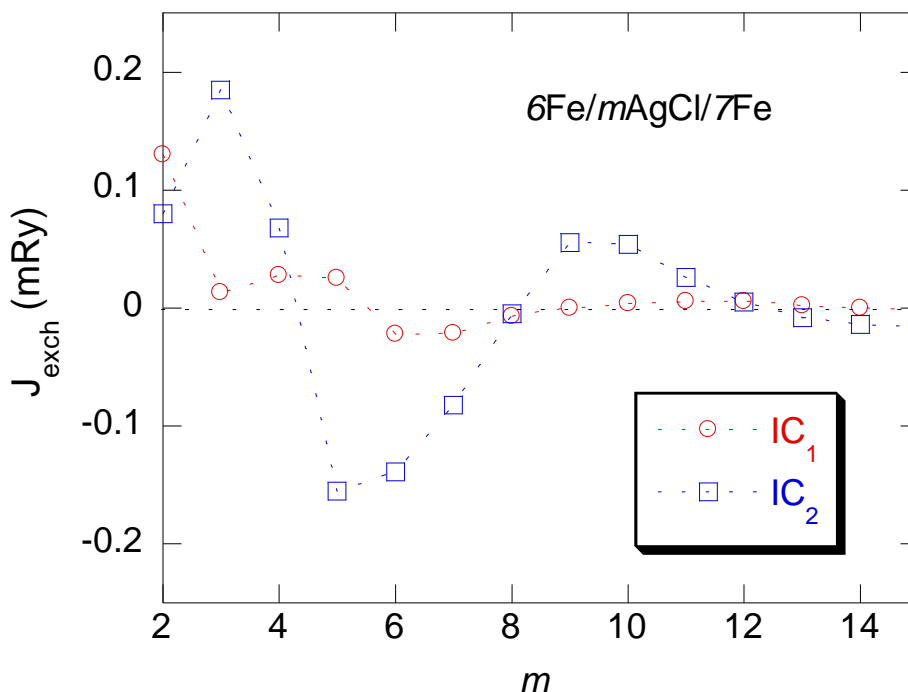


Fig.1.5

Am studiat proprietățile de transport ale heterojuncțiunilor. Astfel în Fig.1.6 redăm conductanțele rezolvate în spin și magnetorezistențele prin tunelare (TMR) pentru heterojuncțiunile de tip 6Fe/mAgCl/7Fe(001). Contribuțiile cele mai mari ale conductanțelor FM se datoresc electronilor cu spin majoritari pentru ambele configurații (IC_1 , IC_2). Conductanțele FM, în regiunea asimptotică, sunt puțin sensibile la structura interfeței, în timp ce conductanțele FM și AFM în benzi cu spin minoritar depind de interfața, în particular în cazul configurației IC_2 . Magnetorezistența prin tunelare, cea mai mare, poate fi evidențiată pentru configurația IC_1 . Valorile TMR cresc cu lărgimea barierei, având o schimbare de pantă la $m = 6$. Pentru $m = 15$, pot fi evidențiate valori TMR de până la 3100 %. În cazul configurației interfaciale IC_2 , se observă oscilații de rază mare de acțiune, TMR fiind în jur de 150 %. Transmisia în lungul unei joncțiuni planare este determinată de structura de bandă a barierei. Pentru ambele heterostructuri, în regiunea asimptotică, conductanța FM corespunzătoare spinilor majoritari, scade exponențial, confirmând prezența unui mecanism de tunelare în lungul barierei de AgCl. Conductanțele FM și AFM în banda cu spini minoritari, descreșc de asemenea, comportarea acestora fiind sensibilă la forma interfeței.

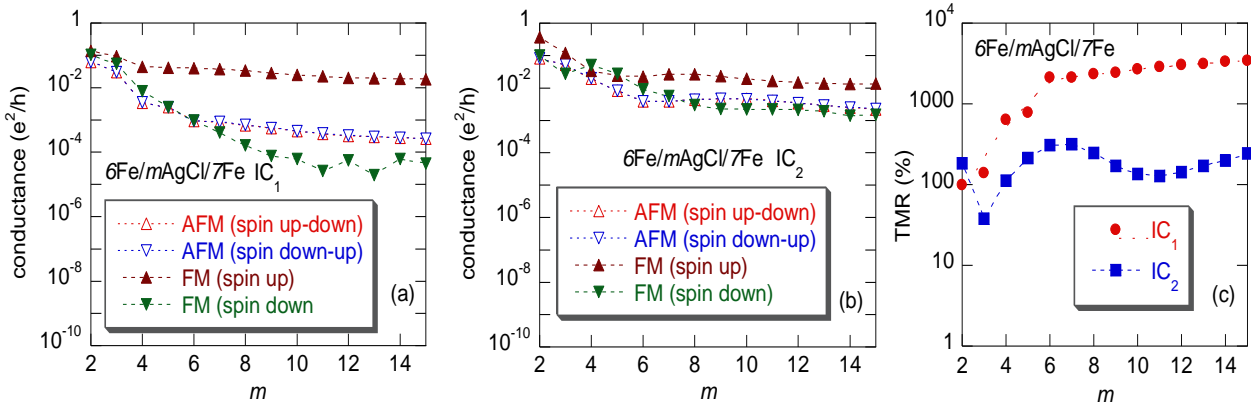


Fig.1.6

Barierile de AgCl par să fie filtre de spin Δ_1 . S-a evidențiat o tunelare directă puternică a stărilor evanescente Δ_1 în lungul barierei. Parametrul de descreștere este mai mic comparativ cu cel caracteristic barierei de MgO și NaCl. Conductanțele FM și AFM ale spinilor minoritari sunt dominate de picuri cu vârfuri ascuțite (spike-like) provenind de la stările rezonante ale spinilor minoritari ai fierului la interfață și sunt sensibile la tipul de interfață.

Interdifuzia argintului la interfețele Fe/AgCl(001) este favorizată energetic. Nu au fost evidențiate straturi "moarte" magnetic ca urmare a interdifuziei atât a Ag sau Cl. Interdifuzia interfacială afectează proprietățile magnetorezistive ale joncțiunilor, în particular a celor cu interfața de tip IC_1 .

Ca urmare a unei mici diferențe dintre parametrii rețelelor cristaline ale Fe și AgCl precum și a efectelor puternice de filtru de spin Δ_1 în lungul barierei de AgCl, heterostructurile Fe/AgCl(001) prezintă interes pentru aplicații în spintronică. Folosirea în tehnică a acestora implică un control al interdifuziei interfaciale și stabilizarea interfețelor Fe/AgCl(001). Substituția Na prin Ag la interfețele de tip Fe/NaCl(001) asigură oportunități pentru a modifica transportul spin-polarizat în lungul joncțiunilor Fe/(Ag,Na)Cl/Fe(001), de la un mecanism implicând tunelare rezonantă la cel caracteristic tunelării directe.

Rezultatele științifice prezentate în rezumat mai sus sunt incluse în lucrarea

"Oscillatory exchange coupling and strong direct tunneling in AgCl based heterojunctions,,

P.Vlaic, E.Burzo, K.Carva,

Journal of Alloys and Compounds, in evaluare

2. Proprietăți fizice ale joncțiunilor tunel de tip CaC/X/CaC(001) CuX = LiCl și MgS

S-a calculat pentru început structura electronică a compusului prezumat CaC. Dependența energiei totale de parametrii de rețea este redată în Fig.2.1 pentru două tipuri de structuri B1 și respectiv B3. Starea fundamentală, având energia minimă corespunde structuri de tip B1. Parametrul de rețea la

echilibru este de 5.20 Å. Compusul este aproape half-metalic, momentul magnetic de spin fiind de 1.82 μ_B /f.u.

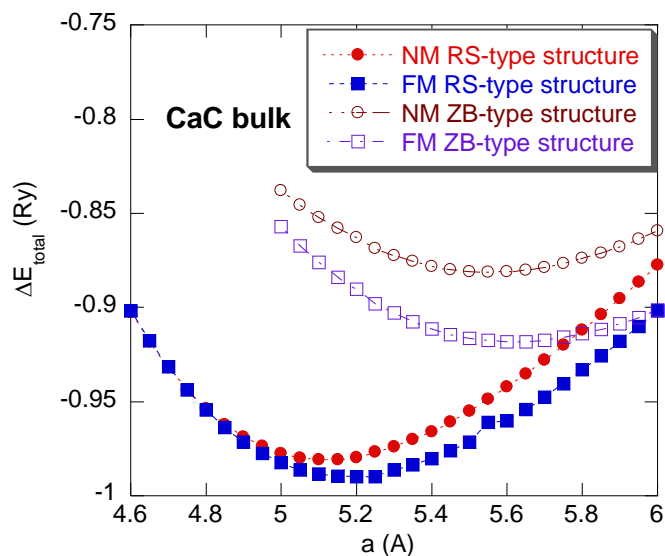


Fig.2.1

Am studiat proprietățile electronice ale heterostructurilor CaC/LiCl/CaC(001) și CaC/MgS/CaC(001). Configurația heterostructurilor este / (semi-infinit)Ca(001) / 2Cu(001) / nCaC(001) / mLiCl(MgS)(001)/nCaC(001) / 3Cu(001) (semi-infinit) / - Fig.2.2a. Relațiile epitaxiale sunt CaC [100] || [100] LiCl(MgS); Cu [110] || CaC [100].

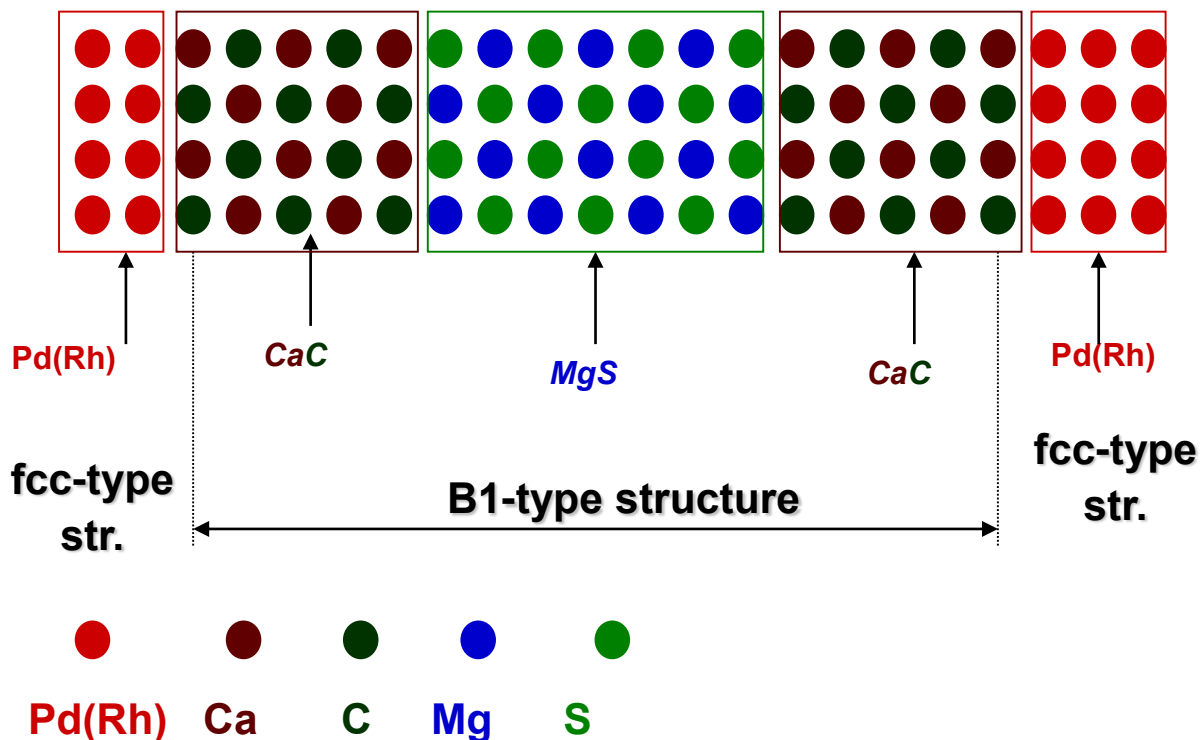


Fig.2.2a

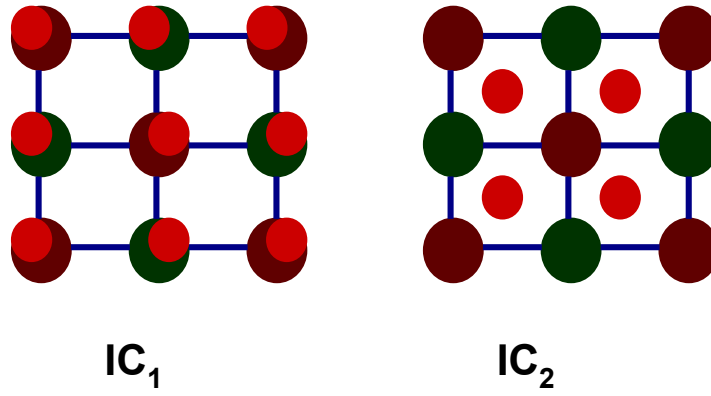


Fig.2.2b

Parametrii de rețea în heterojuncțiuni sunt:

$$a_{CaC} = a_{MgS}; a_{CaC} = a_{Cu}\sqrt{2}$$

Au fost studiate două configurații – Fig.2.2b:

IC_1 în care atomii de Cu sunt situații deasupra pozițiilor ocupate de Ca și C.

IC_2 în care atomi de Cu sunt poziționați în fața spațiilor goale dintre pozițiile Ca și C.

În Fig.2.3a și 2.3b se prezintă evoluția momentelor magnetice pentru sistemele $2Cu/5CaC/7AB/5CaC/3Cu(001)$ cu $AB = LiCl$ sau MgS , pentru ambele configurații, IC_1 și respectiv IC_2 . La distanțe mai mari de interfață straturile de CaC se comportă similar cu proba masivă. La interfețele $CaC/LiCl(MgS)(001)$ momentele magnetice ale C și Ca sunt ușor diminuate comparativ cu valorile caracteristice materialului masiv. Sunt induse polarizări, relativ mici, pe pozițiile interfaciale Li(Mg) sau Ca(S).

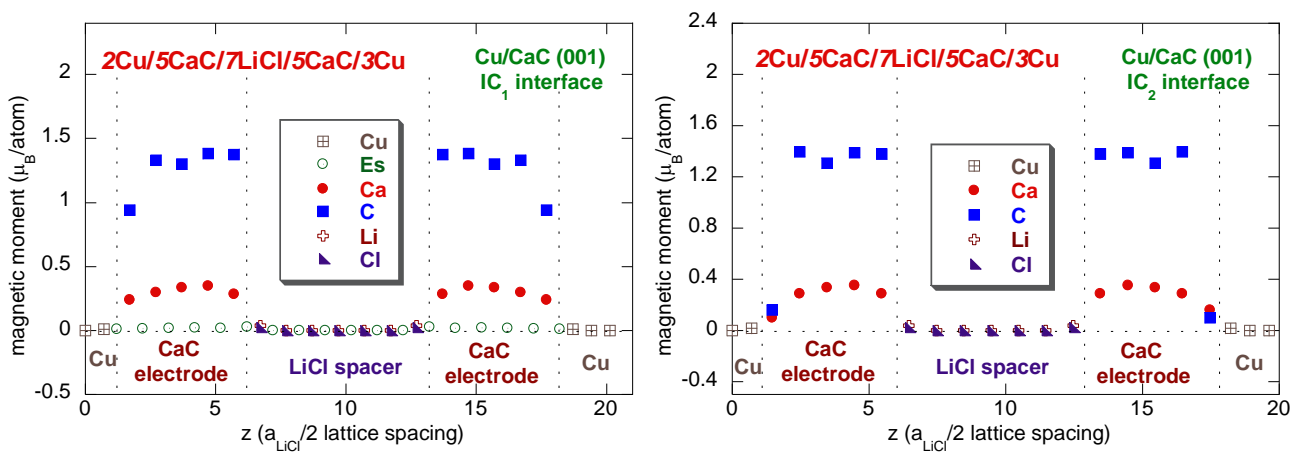


Fig.2.3a

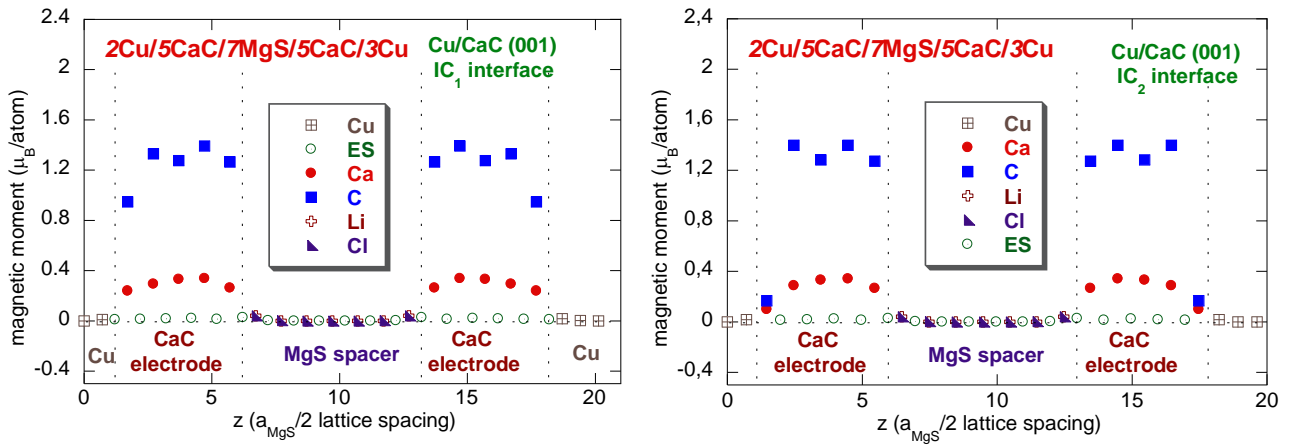


Fig.2.3b

Cuplajele de schimb, în funcție de grosimea barierei, pentru heterostructurile $2\text{Cu}/5\text{CaC}/m\text{LiCl}(\text{MgS})/5\text{CaC}/3\text{Cu}(001)$ având geometrii interfaciale de tip IC_1 și respectiv IC_2 sunt redată în Fig.2.4. Cuplajele de schimb sunt feromagnetice, amplitudinea acestora scăzând exponențial cu lățimea barierei.

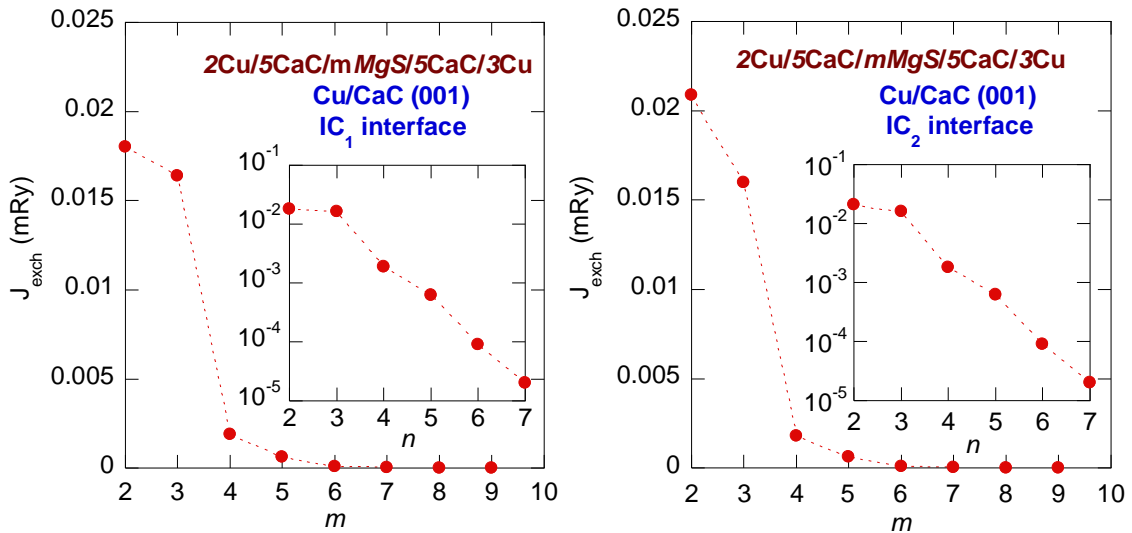


Fig.2.4

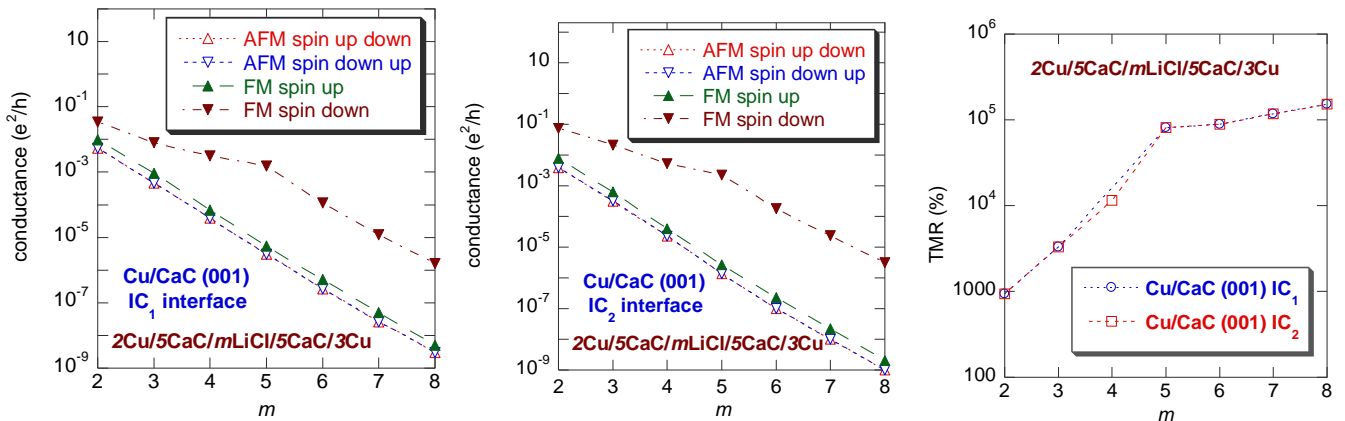


Fig.2.5

S-au analizat proprietățile de transport dependente de spin. Conductanțele depind de tipul barierei și scad exponențial cu grosimea barierei – Fig.2.5. În starea feromagnetică a joncțiunilor, contribuțiile majore la conductibilitate sunt date de electroni cu spini minoritari. Valori ridicate ale magnetorezistențelor TMR, de ordinul 10^4 - 10^5 , sunt prezise în cazul heterostructurilor 2Cu/5CaC/mLiCl/5CaC/3Cu pentru grosimi ale barierei $m \geq 5$.

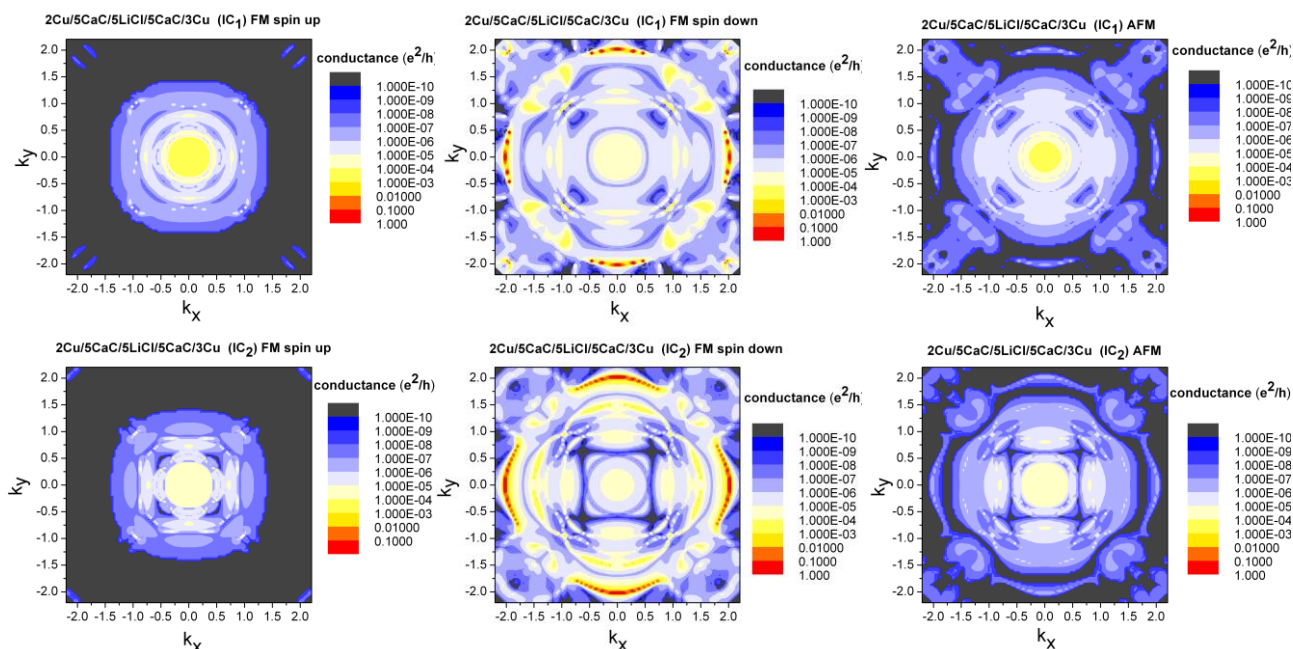


Fig.2.6

Am studiat de asemenea conductanțele rezolvate $k_{||}$, în stările FM și AFM în heterojoncțiunile 2Cu/5CaC/5LiCl(MgS)/3Cu(001). Datele obținute în cazul barierei de LiCl sunt redată în Fig.2.6. Sunt prezente stări rezonante la interfața CaS/barieră. Astfel tunelarea rezonantă are un rol major în proprietățile de transport polarizate în spin, în cazul heterojoncțiunilor studiate.

Rezultatele obținute au fost prezentate la 14 TIM Conference of Physics, Timișoara, 20.11-22.11. 2014

„Electronic structure and spin polarized transport characteristics of CaC/LiCl(MgS)/CaC(001) heterojunctions”

P.Vlaic, E.Burzo

AIP Conference Proceeding (ISI paper) acceptata pentru publicare. Apare în anul 2015.

3. Perovskite duble pe baza de CaLaFeMo

Perovskitele duble $\text{Ca}_{15}\text{La}_{0.5}\text{FeMo}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ cu $x \leq 0.3$ au fost preparate prin reacție în stare solidă. Studiul prin raze X evidențiază prezența unei structuri de tip monoclinic având grupul spațial $P2_1/n$. Analiza spectrelor de raze X evidențiază faptul că gradul de ordonare, exprimat prin procentul de atomi care ocupă poziții regulate în rețea, crește de la 58 % ($x = 0$) la 77 % ($x = 0,1$) și 91 % ($x = 0,3$).

Fracțiunea din compoziție care prezintă o valență variabilă poate fi descrisă prin formula $\text{Fe}_u^{3+}\text{Fe}_{1-u}^{2+}\text{Mo}_v^{5+}\text{Mo}_{1-v}^{6+}$. Plecând de la compozițiile exacte ale probelor determinate prin SEM, am stabilit, în acord cu legea compensării sarcinilor, următoarele relații dintre conținutul de ioni având valențe variabile: $u = v + 0.64$ ($x = 0$), $u = v + 0.473$ ($x = 0.1$) și $u = v + 0.348$ ($x = 0.3$).

Studiul prin difracție de neutroni a evidențiat prezența unei ordonări ferimagnetice, momentele magnetice medi ale atomilor de Fe și Mo situați în pozițiile B și respectiv B' sunt orientate antiparalel. Izotermele de magnetizare obținute la 4 K sunt în acord cu o ordonare de tip ferimagnetic – Fig.3.1. Magnetizările la saturație cresc pe măsură ce conținutul de W este mai mare. Analiză dependențelor de temperatură ale magnetizărilor probelor răcite în câmp nul și respectiv într-un câmp magnetic de 1 kOe evidențiază ireversibilități moderate la temperaturi $T < 200$ K – Fig.3.2. Aceste rezultate sugerează prezența unei contribuții, la magnetizare, de tip "cluster glass", suprapusă peste o comportare esențial ferimagnetică.

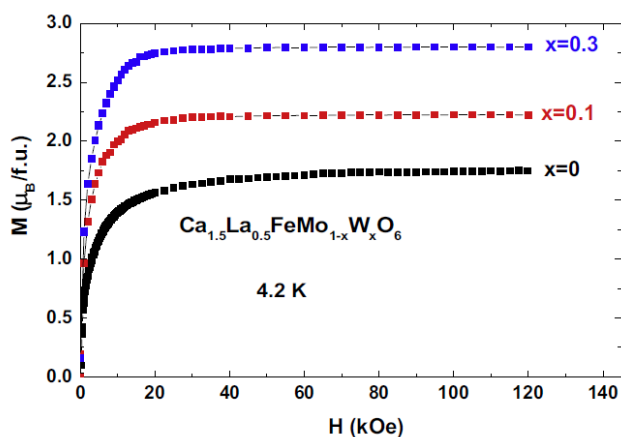


Fig.3.1

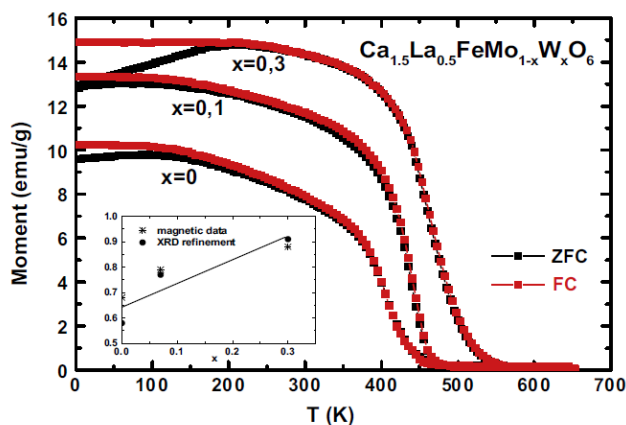


Fig.3.2

Dependențele de temperatură ale susceptibilităților magnetice pot fi descrise printr-o relație de tip Néel, caracteristică ordonării ferimagnetice – Fig.3.3

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} + TC^{-1} - \sigma(T - \theta) \quad (1)$$

Am notat prin C constanta Curie iar parametrii χ_0 , σ și θ depind de coeficienții câmpului molecular care descriu interacțiunile de schimb în interiorul și respectiv între subrețelele magnetice.

Constantele Curie scad ușor pe măsură ce Mo este substituit treptat prin W. Aceasta comportare poate fi corelată cu modificarea stărilor de valență ale ionilor de fier și respectiv molibden. Considerând constatele Curie ale ionilor Fe^{2+} , Fe^{3+} și Mo^{5+} ca fiind date de cele ale ionilor liberi, am determinat o a doua relație între parametrii u și v .

$$C = uC_{\text{Fe}^{3+}} + (1 - u)C_{\text{Fe}^{2+}} + vC_{\text{Mo}^{5+}} \quad (2)$$

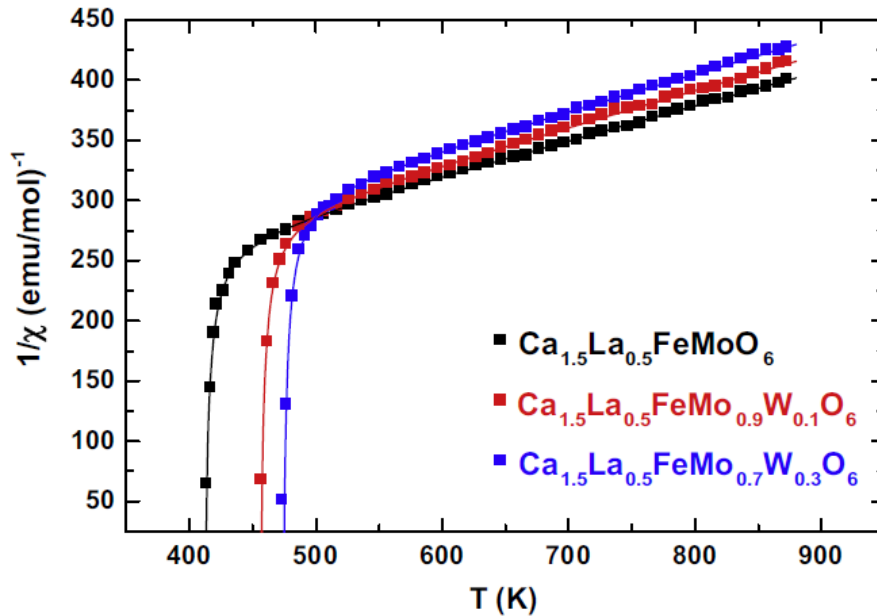


Fig.3.3

Pe această cale am estimat numărul de ioni de Fe și Mo aflat în diferite stări de valență, în funcție de compoziție. Astfel în compusul $\text{Ca}_{1.5}\text{La}_{0.5}\text{FeMoO}_6$ avem 0.70Fe^{2+} și 0.68Mo^{5+} ioni pe formula unitate. Pe măsură ce crește conținutul de W de la 0 la 0.3, numărul de ioni Fe^{2+} crește prin 10 % iar cei de Mo^{5+} scade prin 19 %.

Admițând un model cu două subrețele magnetice am determinat interacțiunile de schimb în interiorul și respectiv între subrețelele magnetice.

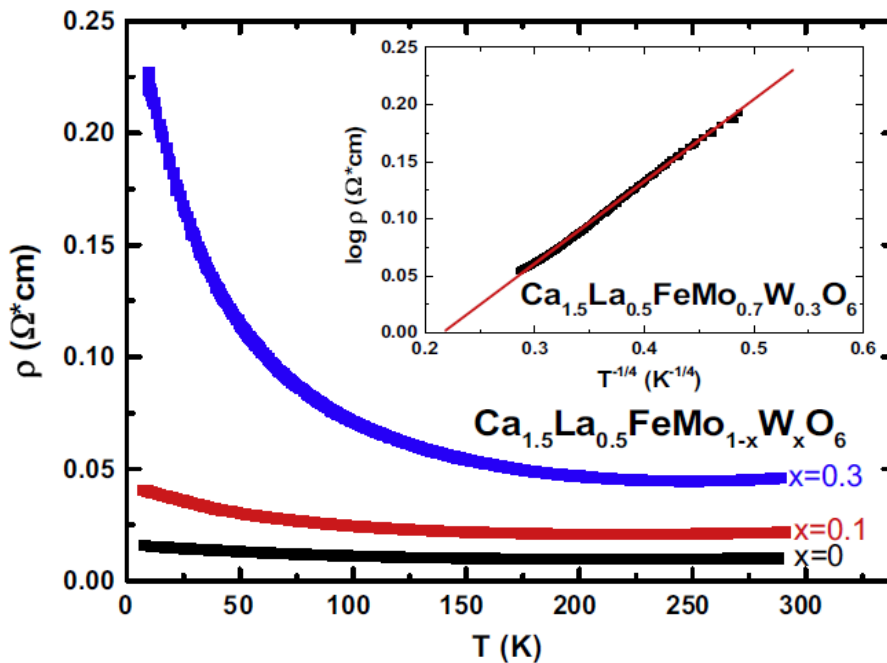


Fig.3.4

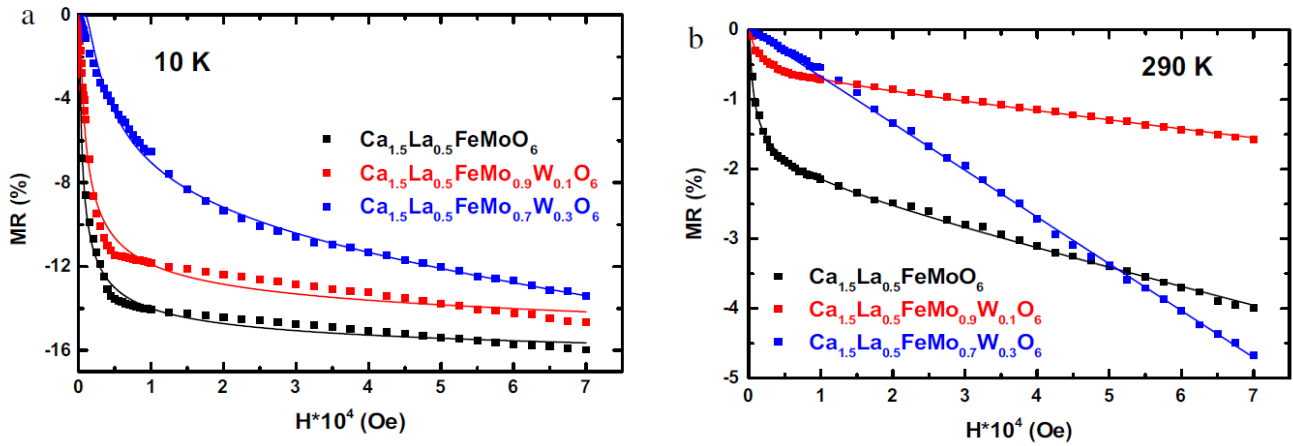


Fig.3.5

Dependențele de temperatură ale rezistivităților ρ sunt redată în Fig.3.4. Rezistivitățile scad odată cu creșterea temperaturi până la valori $T = 204 \text{ K} - 249 \text{ K}$, unde se observă o tranziție de tip semiconductor-metal. Rezistivitățile, la $T = 10 \text{ K}$, cresc odată cu conținutul de wolfram. Comportarea rezistivă poate fi descrisă fizic prin considerarea unor distribuții de domenii metalice și respectiv semiconductoare. Creșterea conținutului de ioni W^{6+} sau Mo^{6+} conduce la creșterea conținutului fazei semiconductoare comparativ cu cea a regiunilor având un caracter metalic. Pentru compusul cu $x = 0.3$, dependența de temperatură în intervalul $18 \text{ K} \leq T \leq 160 \text{ K}$ urmează o lege în $T^{-1/4}$, prezisă de mecanismul VRH. Am studiat în detaliu dependența de câmpul extern și temperatură a magnetorezistențelor. Unele exemple sunt redată în Fig.3.5. Datele au fost analizate considerând prezența unui mecanism de tunelare între granule precum și contribuțiile din interiorul granulelor. Modelul propus descrie corect datele experimentale, așa cum se observă din Fig.3.5.

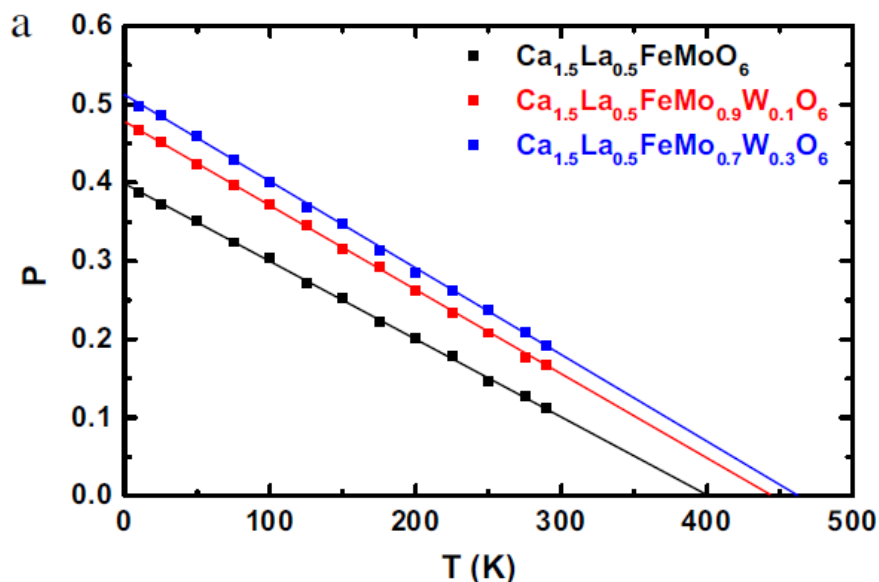


Fig.3.6

Polarizarea de spin, P , la 10 K , crește de la 0.4 ($x = 0$) la 0.5 ($x = 0.3$). Polarizare de spin descrește liniar cu temperatura, cu aceeași pantă, pentru toate compozițiile și anume $1 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Extrapolarea la valorile $P = 0$, conduce la temperaturi apropiate sau identice cu punctele Curie.

Sistemul de perovskite menționat mai sus a fost programat a fi studiat și apoi finalizat în cursul anului 2015. Dat fiind faptul că am putut realiza unele studii asupra acestui sistem în partea a doua a anului 2014, rezultatele au fost trimise spre publicare și acceptate rapid spre publicare. Lucrarea apare în anul 2015 și a fost publicată în avans în *J. Alloys Compounds*.

”Magnetic and transport properties of $Ca_{1.5}La_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO_6$ perovskites,,

E.Burzo, I.Balasz, M.Valeanu, D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, A.V.Rutkauskas, B.N.Savenko
Journal of Alloys and Compounds 621, 71 (2015), IF = 2.734

Studiul magnetorezistivităților, în sistemul CaLaFeMoW au fost prezentate 7th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, Chișinău 2014.

”Magnetoresistive properties of $La_{1.5}Ca_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO_6$ double perovskites,,

E.Burzo, I.Balasz, M.Valeanu and D.P.Kozlenko

7th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics, Chișinău (Poster presentation) 16.09-19.09.2014, Lucrarea ABM 11B, p.104. INIS indexed.

4. Proprietățile magnetice ale compușilor de tip pământ-rar-cobalt (fier)

Compușii pământurilor-rare (R) cu metale de tranziție 3d (M = Fe, Co) prezintă proprietăți magnetice interesante precum anizotropie mare și magnetostricțiune sau magnetorezistență gigant. În particular această ultimă proprietate este de interes prin aplicațiile sale în spintronică. Ca atare am studiat proprietățile magnetice ale acestor sisteme, în particular tranzițiile magnetic-nemagnetic ca efect al presiunii precum și al câmpurilor externe sau de schimb.

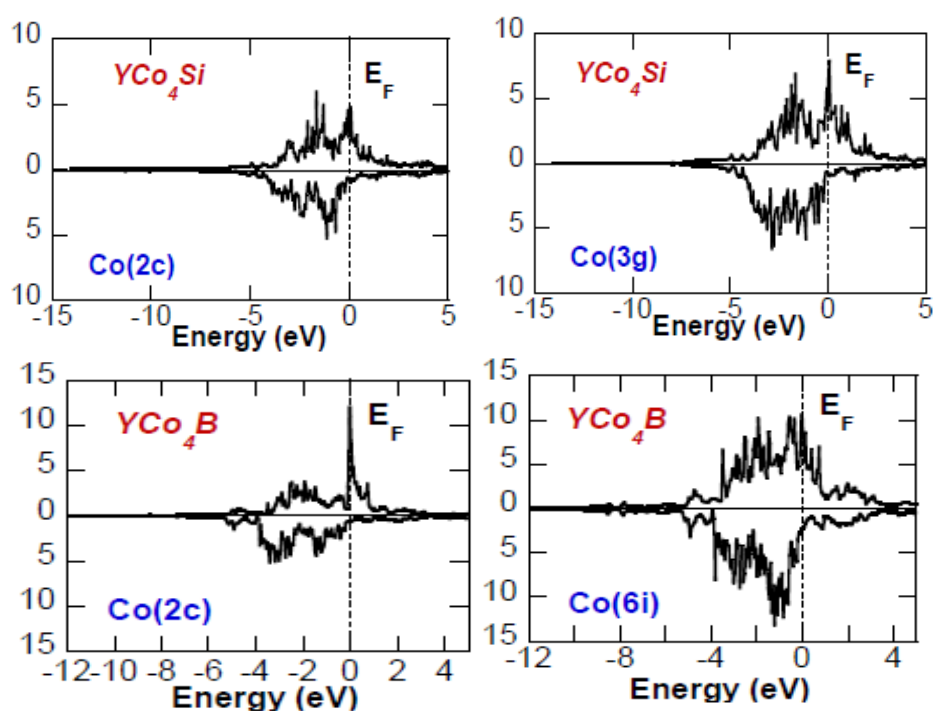


Fig.4.1

Spre exemplu, în Fig.4.1, prezentăm densitățile de stări parțiale și totale ale atomilor Co2c și Co3g în YCo₄Si și ale atomilor Co2c și Co6i în YCo₄B, în stare fundamentală și la presiunea mediului ambient. Substituția parțială a Co prin Si determină o scădere semnificativă a momentelor magnetice ale atomilor Co2c, comparativ cu valoarea determinată în compusul YCo₅. Se evidențiază o scădere liniară a momentelor cobaltului în ambele poziții, cu aceeași pantă, pe măsură ce volumul relativ scade, ca efect al presiunii. La un volum relativ $v/v_0 = 0.92$ apare o tranziție magnetică de la starea cu spin-înalt (HS) la cea cu spin mic (LS) – Fig.4.2. Răspunsul momentelor magnetice ale cobaltului în pozițiile 2c și 6i în YCo₄B este oarecum diferit – Fig.4.3. Pentru un volum redus $v/v_0 = 0.90$, momentul cobaltului în poziția 6i se anulează, în timp ce pentru atomi 2c scade până la valoare $M_{Co} = 0,16 \mu_B$ și devine nul doar pentru un volum redus $v/v_0 = 0.85$. Studiul și a altor sisteme precum Y₃Co₁₁B₄ sau Y₂Co₇B₃, la care momentele magnetice ale atomilor de cobalt sunt mici, evidențiază o tranziție directă de la starea magnetică la cea nemagnetică. Astfel, în funcție de valorile momentelor magnetice ale cobaltului pot apare tranziții directe sau în etape de la starea magnetică la cea nemagnetică.

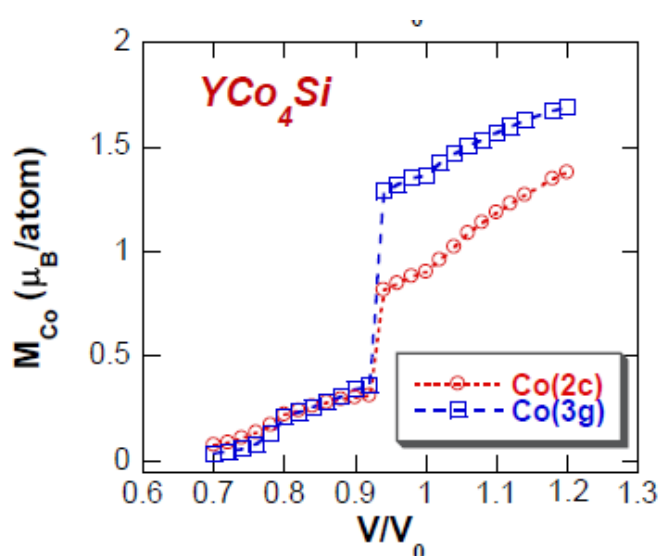


Fig.4.2

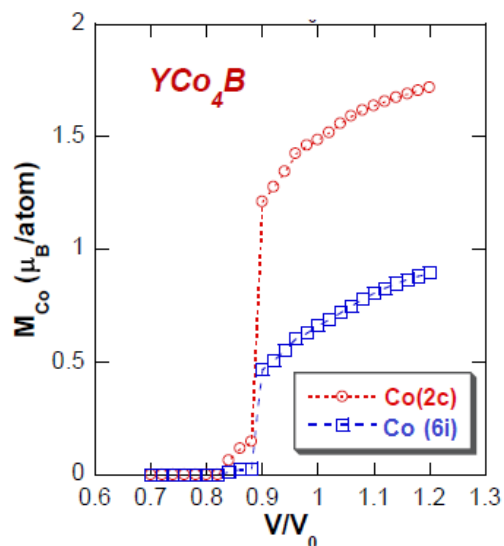


Fig.4.3

Analiza efectelor de tip magneto-volumic, în compușii R-Co sau R-Fe, în corelație cu variațiile de volum permite obținerea de informații, în particular, asupra gradului de localizare a momentelor magnetice ale metalelor de tranziție 3d. Date utile pot fi obținute din evoluția parametrului $\Gamma = d \ln T_C / d \ln v$. În cazul unui moment localizat, dependența parametrului Γ de temperatura Curie poate fi descris prin relația:

$$\Gamma = a - bT_C \quad (1)$$

în timp ce pentru un model itinerant al magnetismului acesta este de forma

$$\Gamma = A + BT_C^{-2} \quad (2)$$

Ambele tipuri de dependențe pot fi evidențiate în compușii de tip R-Fe și respectiv R-Co – Figs.4.4 și 4.5. Astfel în toate sistemele studiate există o corelație între volumul probelor și temperaturile

Curie ale acestora, deși mecanismele implicate sunt diferite în compuşii R-Fe și respectiv R-Co. Astfel atomii de Fe în compuşii $R_2Fe_{17}C(H)_y$ ocupă patru tipuri de poziții în rețeaua cristalină, distanțele dintre atomii de fier fiind diferite. Interacțiunile de schimb implicând atomi de fier situați la distanțe $d \leq 2.45 \text{ \AA}$ sunt negative, în timp ce acelea asociate cu atomii de fier situați la distanțe mai mari sunt pozitive. Interacțiunile negative nu sunt satisfăcute, cele pozitive dominând. Acest fapt conduce la scăderea temperaturilor Curie. Odată cu creșterea volumului, prin introducerea în rețea a atomilor interstițiali, intensitatea interacțiunilor negative scade și în final acestea se anulează. Acest fapt determină o creșterea a temperaturilor Curie.

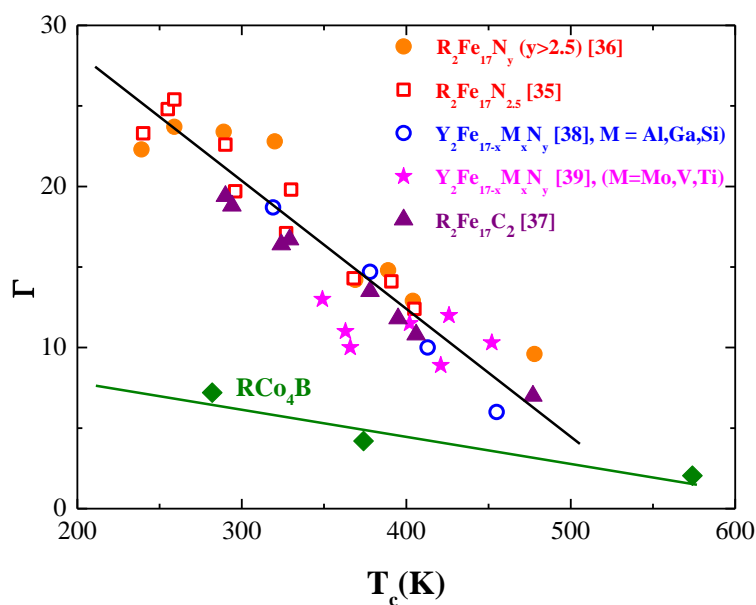


Fig.4.4

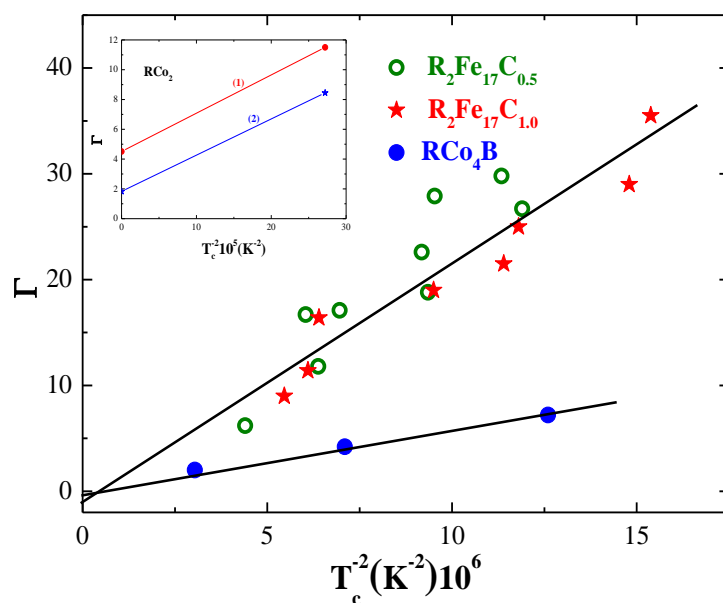


Fig.4.5

Ca urmare a creșterii volumului, benzile 3d devin mai înguste și astfel momentele magnetice ale fierului prezintă un grad mai mare de localizare. Ca atare, prin creșterea numărului de atomi interstițiali, respectiv a volumului, dependența valorilor Γ de temperaturile Curie se modifică de la o relație cu T_C^{-2} la una în T_C .

Momentele magnetice ale cobaltului, spre deosebire de cele ale fierului sunt afectate de presiune, acestea scăzând odată cu creșterea presiunii sau diminuarea volumului relativ. Ca atare interacțiunile de schimb se diminuează similar cu valorile temperaturilor Curie. Astfel în compușii R-Co, efectele de volum pot fi corelate în principal cu variații ale momentelor cobaltului, reflectate în diminuarea temperaturilor Curie.

Am studiat tranzițiile de tip ne-magnetic la starea magnetică în compușii R-Co. Pentru un câmp critic extern sau de schimb, la un sistem care prezintă o susceptibilitate magnetică amplificată prin schimb apare o tranziție bruscă de la starea nemagnetică la cea magnetică, ca urmare a despicerii prin schimb a benzii 3d. La câmpuri mai ridicate decât cel critic, momentele magnetice ale cobaltului sau nichelului depind liniar de câmpul de schimb. Despicarea prin schimb a benzilor 3d este proporțională cu momentul magnetic după cum se vede în – Fig.4.6 în cazul compușilor RNi_4B . Datele experimentale corelate cu analiza structurilor de bandă sunt discutate în modelul momentului indus.

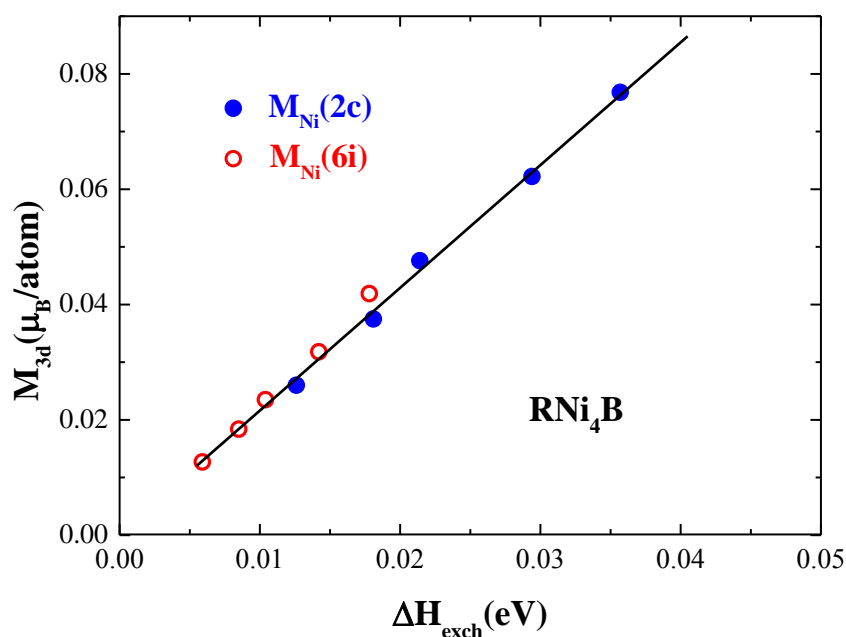


Fig.4.6

Interacțiunile de schimb dintre atomi R și M în compușii R-M au fost analizate în modelul 4f-5d-3d, și au loc prin intermediul polarizării benzilor R5d. Polarizările benzilor R5d sunt determinate atât de interacțiunile de schimb 4f-5d precum și de cele de rază mică de acțiune 5d-3d. Banda R5d are o mare extindere spațială, și anume de 5.33 Å. În funcție de temperatură, distanțele dintre atomii R și M se modifică puțin, comparativ cu extinderea benzii R5d, sugerând că interacțiunile de schimb 5d-3d sunt

puțin modificate. Astfel, chiar în cazul compușilor care prezintă o susceptibilitate magnetică amplificată prin schimb, precum LuCo_2 , la temperatura $T = 100 \text{ K}$, se menține cuplajul 5d-3d. Într-un câmp de 57.2 kOe , momentul magnetic al cobaltului este de $0.016 \mu_B$ iar polarizare benzilor 5d este de $-0.007 \mu_B$.

Rezultatele cercetărilor efectuate asupra compușilor pământurilor rare cu metale de tranziție 3d au fost prezentate în cadrul unor lecții invitate la următoarele conferințe:

1. *Pressure effects on the magnetic behavior of cobalt in rare-earth compounds*

E.Burzo, P.Vlaic, D.P.Kozlenko

Balkan Workshop on Applied Physics, 4.06-6.06. 2014 Constanta (Invited lecture). Romanian Journal of Physics 60, 1-2 (2015). IF = 0.75

2. *Magnetic properties and electronic structures of rare-earth transition metal compounds*

E.Burzo

7th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics, 16.09-19.09. 2014 Chișinău (Invited lecture). Indexed INIS.

3. *Exchange enhanced paramagnetism of rare-earth(yttrium)-transition metal compounds*

E.Burzo

TIM14 Physics Conference, 20.11-22.11.2014, Timisoara (Invited lecture).

AIP Conf. Proc. Apare în anul 2015.

Lucrări apărute în cadrul grantului în perioada 2013- 2014, acceptate spre publicare sau prezentate la conferințe internaționale:

1. *Structural, electronic, magnetic and spin dependent transport properties of Fe/CaS/Fe(001) heterostructures*

P. Vlaic, E.Burzo, K. Carva,

J. Appl.Phys. 113, 053715 (2013) IF = 2.185

2. *Pressure effects on crystal structures and magnetic properties of RCo_5 ($R = Y$ or Gd) compounds*

E.Burzo, P. Vlaic,

AIP Conf. Proc. 1564, 96 (2013) ISI journal

3. *Impact of Fe/NaCl(001) interface structure on electronic, magnetic and spin polarized transport of Fe/NaCl/Fe(001) heterojunctions: An-ab initio study*

P.Vlaic, E.Burzo, K.Carva

J. Alloys Comp. 598, 41 (2014) IF = 2.734

4. *Magnetic and transport properties of $\text{Ca}_{1.5}\text{La}_{0.5}\text{FeMo}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ perovskites*

E.Burzo, I.Balasz, M.Valeanu, D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, A.V.Rutkavkas, B.N.Savenko

J.Alloys. Comp. 621, 71 (2015) IF = 2.734

5. *Oscillatory exchange coupling and strong direct tunneling in AgCl based heterojunctions*

P.Vlaic, E.Burzo, K.Carva

J.Alloys Comp. (in evaluate)

6. *Pressure effects on the magnetic behaviour of cobalt in rare-earth compounds*

E.Burzo, P.Vlaic, D.P.Kozlenko

Rom. J.Phys. 60, 1-2 (2015)

IF = 0.745

7. *Magnetic and spin dependent transport properties of SrC/NaCl/(CaS)/SrC (001) tunnel junctions*

P. Vlaic, E. Burzo

"Fifth Seeheim Conference on Magnetism" Frankfurt, Germany, 29.09 –3.10.2013

8. *Electronic structure and spin polarized transport characteristics of CaC/LiCl(MgS)/CaC(001) heterojunctions*

P.Vlaic, E.Burzo

TIM-14 Phys. Conference, 20.11-22.11.2014 (Oral presentation), apare în AIP Conf. Proc., 2015 (ISI paper).

9. *Magnetoresistive properties of $La_{1.5}Ca_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO_6$ double perovskites*

E.Burzo, I.Balasz, M.Valeanu, D.P.Kozlenko

7th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics, Chişinău, lucrarea ABM 11B p.104 (Poster presentation)

Lucarea este indexata INIS

11/25/2014 Magnetoresistive properties of La_{1.5}Ca_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO₆..INIS

INIS COLLECTION SEARCH Advanced Search

Standard Search My Selection Search History

Search the INIS Collection

RN:45104894

Limit to results with full text

Search other resources

NUCLEUS

INSPIRE-HEP

About INIS Collection

INIS Collection
contains
360,000
full texts and
3,728,000
bibliographic records

Updates

In 2014
more than
105,000
bibliographic records and
38,000
full texts have been added

Copyright © 2010-2014
International Atomic Energy

Results 1 - 1 of about 1. Search took: 0.03 seconds. Sort by: date | relevance

All results

Magnetoresistive properties of $La_{1.5}Ca_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO_6$ double perovskites
by Burzo, E.; Balasz, I. (Faculty of Physics, Babes-Bolyai Univ., 400084 Cluj-Napoca (Romania)); Valeanu, M. (National Inst.of Material Physics, POBox MG-07, Bucharest (Romania)); Kozlenko, D.P. (JINR, 141980 Dubna Moscow Reg., Dubna (Joint Institute for Nuclear Research (JINR)))
from 7. International conference on materials science and condensed matter physics. Abstracts

Page 1. 104 ABM 11P MAGNETORESISTIVE PROPERTIES OF
 $La_{1.5}Ca_{0.5}FeMo_{1-x}W_xO_6$ DOUBLE PEROVSKITES E ...

Subject [MATERIALS SCIENCE \(S36\)](#)

Source/Report Academy of sciences of Moldova, Chisinau (Moldova, Republic of); Inst. of applied physics, Chisinau (Moldova, Republic of); Ghitu inst. of electronic engineering and nanotechnologies (Moldova, Republic of); Moldova state univ., Chisinau (Moldova, Republic of); Technical univ. of Moldova, Chisinau (Moldova, Republic of); 361 p; Sep 2014; p. 104; 7. International conference on materials science and condensed matter physics. Abstracts; Chisinau (Moldova, Republic of); 16-19 Sep 2014; [INIS-MD--018](#)

Record Type Miscellaneous

Country/Org. [Moldova, Republic of](#)

DEC [ALKALINE EARTH METAL COMPOUNDS, ELECTRIC CONDUCTIVITY, ELECTRICAL PROPERTIES, MINERALS, PHYSICAL PROPERTIES, RARE EARTH COMPOUNDS, REFRACTORY METAL COMPOUNDS, TRANSITION ELEMENT COMPOUNDS](#)

DEI [CALCIUM COMPOUNDS, ELECTRIC CONDUCTIVITY, ELECTRICAL PROPERTIES, IRON COMPOUNDS, LANTHANUM COMPOUNDS, MAGNETIZATION, MAGNETORESISTANCE, MINERALS, MOLYBDENUM COMPOUNDS, PEROVSKITES, TEMPERATURE DEPENDENCE](#)

Language English

Ref. Number [45104894](#)

Rel. Record [45104852](#)

Publ. Year [2014](#)

INIS Volume [45](#)

INIS Issue [46](#)

Agency (IAEA). All rights reserved. v4.4.0.20141105

10. *Magnetic properties and electronic structures of rare-earth transition metal compounds*

E.Burzo

Invited lecture at the 7th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics, Chişinău, p.39. (Invited lecture)

Lucarea este indexata INIS

11/25/2014 Magnetic properties and electronic structures of r...INIS

INIS COLLECTION SEARCH Advanced Search

Standard Search My Selection Search History

Search the INIS Collection

RN:45104860 Search Save Query Subscribe Email

Limit to results with full text

Search other resources

NUCLEUS

INSPIRE-HEP

About INIS Collection

INIS Collection contains 360,000 full texts and 3,728,000 bibliographic records

Updates

In 2014 more than 105,000 bibliographic records and 38,000 full texts have been added

Results 1 - 1 of about 1. Search took: 0.01 seconds. Sort by: date | relevance

All results

Magnetic properties and electronic structures of rare-earth-transition metal compounds

by Burzo, E. (Faculty of Physics, Babes-Bolyai Univ., 400084 Cluj-Napoca (Moldova, Republic of)), E-mail: emil.burzo@phys.ubbcluj.ro

from 7. International conference on materials science and condensed matter physics. Abstracts

Page 1. 39 MAGNETIC PROPERTIES AND ELECTRONIC STRUCTURES OF RARE-EARTH- TRANSITION METAL COMPOUNDS ...

Subject MATERIALS SCIENCE (536)

Source/Report Academy of sciences of Moldova, Chisinau (Moldova, Republic of); Inst. of applied physics, Chisinau (Moldova, Republic of); Ghitu inst. of electronic engineering and nanotechnologies (Moldova, Republic of); Moldova state univ., Chisinau (Moldova, Republic of); Technical univ. of Moldova, Chisinau (Moldova, Republic of); 361 p; Sep 2014; p. 39; 7. International conference on materials science and condensed matter physics. Abstracts; Chisinau (Moldova, Republic of); 16-19 Sep 2014; INIS-MD--018

Record Type Miscellaneous

Country/Org. Moldova, Republic of

DEC ELEMENTS, MAGNETISM, METALS, PHYSICAL PROPERTIES

DEI ELECTRONIC STRUCTURE, FERROMAGNETISM, MAGNETIC MOMENTS, MAGNETIC PROPERTIES, PHYSICAL PROPERTIES, RARE EARTHS, TRANSITION ELEMENTS

Language English

Ref. Number 45104860

Rel. Record 45104852

Publ. Year 2014

INIS Volume 45

INIS Issue 46

Copyright © 2010-2014 International Atomic Energy Agency (IAEA). All rights reserved. v4.4.0.20141105

11. *Exchange enhanced paramagnetism of rare-earth (yttrium)- transition metal compounds*

E.Burzo

TIM-14 Phys. Conference, 20.11-22.11.2014 (Invited lecture), apare în AIP Conf. Proc., 2015 (ISI paper).

*

*

*

Menționăm că unele lucrări de mai sus au fost deja citate in literatura de specialitate iar cea publicată in J. Appl. Phys. 113, 053715 (2013) a fost considerată ”hot paper”.

Director proiect,

Acad. Prof. dr. Emil Burzo