

---

# Właściwości magnetyczne ultracienkich warstw na bazie Fe – obliczenia z pierwszych zasad

Joanna Katarzyna Marciniak

## Streszczenie

Jednym z kluczowych aspektów rozwoju technologii jest coraz większa miniaturyzacja obwodów elektronicznych i ich elementów. Głównym problemem tej miniaturyzacji w przypadku urządzeń do przechowywania danych jest trylemat zapisu magnetycznego. Opisuje on konflikt pomiędzy gęstością przechowywanych informacji, stabilnością termiczną komórki pamięci i możliwością zapisu. W przypadku magnetycznych dysków twardych, proponowanych jest kilka różnych podejść do rozwiązania problemu. Jednym ze sposobów zmniejszenia pola magnetycznego wymaganego do zapisu może być wykorzystanie pochylenia magnetycznej osi łatwej materiału względem pola magnetycznego wykorzystywanego do zapisu. Takie podejście – zastosowane do warstw  $L1_0$  FePt i  $L1_0$  FeNi – jest jednym z głównych wątków poruszonych w przedstawionej rozprawie doktorskiej.

W ramach niniejszej dysertacji zbadalam właściwości wymienionych ultracienkich warstw magnetycznych o strukturze  $L1_0$ , jak i kolejnego materiału na bazie Fe:  $Fe_{0.7}Co_{0.3}$ . Badania skupiały się na określeniu wpływu modyfikacji warstw na ich podstawowe właściwości magnetyczne: kierunek osi łatwej magnetyzacji, energię anizotropii magnetokrystalicznej oraz spinowe i orbitalne momenty magnetyczne. Rozważanymi modyfikacjami były zmiana grubości warstwy w strukturach  $L1_0$  i domieszkowanie atomami B, C i N w oktaedrycznych pozycjach międzywęzłowych w stopie  $Fe_{0.7}Co_{0.3}$ . Przeprowadzone przeze mnie badania miały formę obliczeń struktury elektronowej. Wykorzystałam teorię funkcjonału gęstości – głównie w implementacji zawartej w kodzie obliczeniowym full-potential local-orbital (FPLO) i z zastosowaniem potencjału korelacyjno-wymiennego w ujęciu Perdew, Burke'a i Ernzerhofa.

Podstawowe różnice pomiędzy warstwami o różnej grubości i rodzaju domieszki zostały zaobserwowane w wartościach energii anizotropii magnetokrystalicznej oraz orbitalnych momentów magnetycznych. Rodzaj powierzchni warstwy również wpływa na kierunek osi łatwej magnetyzacji. W układach (010)  $L1_0$  FePt i  $L1_0$  FeNi zaobserwowałam preferencję dla kierunku teragonalnego [001] fazy  $L1_0$ , umiejscowionego w płaszczyźnie ultracienkiej warstwy. Natomiast wykorzystanie powierzchni (111) pozwoliło na otrzymanie pochylonego kierunku namagnesowania, a zmiana grubości warstwy o powierzchni (111) dała możliwość ustalania konkretnej wartości pochylenia. Obserwowane właściwości mogą okazać się przydatne w projektowaniu pamięci komputerowych wykorzystujących pochylenie osi magnetyzacji względem magnetycznego pola przelączającego.

/podpisała: mgr inż. Joanna Marciniak/