MnAs Nanocluster

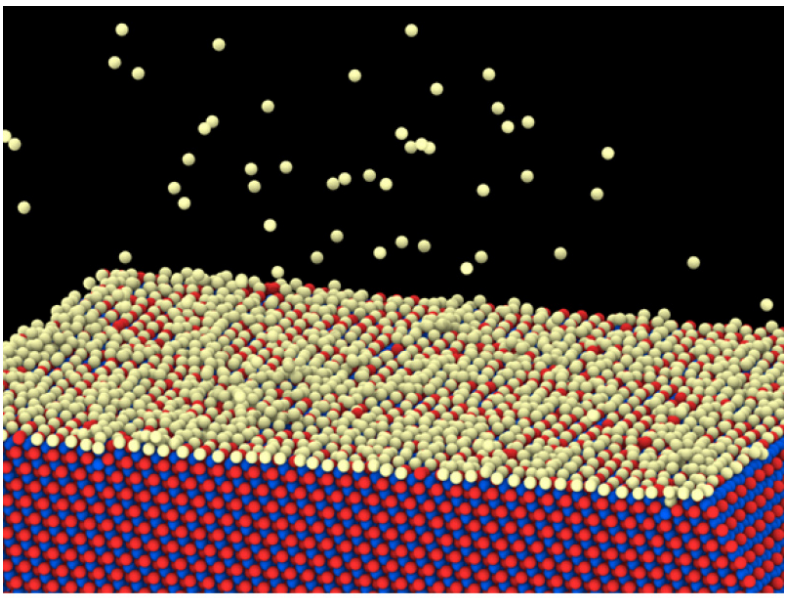

Abb. 1: Darstellung eines Simolationszeitpunktes: Gold Atome (gelb) „wachsen“ auf Manganarsenid (blau-rot).

Introduction

Das Hauptaugenmerk unseres Forschungsprojektes ist die Simulation des Wachstums von Gold Atomen (Au) auf eine vorgegebene Unterlage (Substrat), bestehend aus der Materialverbindung Manganarsenid (MnAs). In Abb. 1 ist dieser Wachstumsprozess zu einem bestimmten Simulationszeitpunkt als Resultat festgehalten. Der Hintergrund des Projektes ist die Untersuchung des Riesenmagnetowiderstandes (englisch, giantmagnetoresistance, GMR), [1] der z. B. für die magnetische Speicherung von Daten in heutigen Festplatten ausgenutzt wird. Prinzipiell wird jedes Speicherbit einer solchen Festplatte durch ein System aus magnetischer, nichtmagnetischer und magnetischer Schicht verwirklicht. So eine Situation trifft auch auf MnAs und Gold zu, da MnAs magnetisch und Au nicht-magnetisch ist. Das Neue an diesem Materialsystem ist, dass MnAs im Experiment in Form von so genannten nano-strukturierten Cluster hergestellt wird. Das sind kleine „Inseln“ bzw. „Gruppierungen“ von Atomen, die in verschiedenen Geometrien auf einem Substrat aufgebracht werden. Das Schichtsystem des GMRs stellen dann zwei MnAsCluster dar, welche mit Gold verbunden werden.

Methods

Researchers
Dr. Andreas Rühl

Project Term
2015 - 2015

Project Areas
Chemical Solid State and Surface Research, Optics, Quantum Optics and Physics of Atoms, Molecules and Plasmas

Clusters
Skylla Cluster Gießen

Software
LAMMPS, VASP

Institute
I. Physikalisches Institut

University
Justus Liebig University Giessen

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

Unsere Forschung befasst sich ganz konkret mit der Frage, wie die exakte Struktur der Gold Atome auf dem MnAs-Substrat aufgebaut ist. Diese Struktur ist unbekannt und wird für weitere Untersuchungen des GMRs benötigt. Hierfür wird die Molekulardynamik verwendet. Eine Methode, bei der die Atome als klassische Teilchen aufgefasst werden, um aus den Kräften zwischen diesen Atomen zu einem späteren Zeitpunkt die neuen Positionen zu bestimmen. Für die Bestimmung dieser Kräfte wird ein Modell genutzt, welches an Kräfte aus quantenmechanischen Rechnungen angepasst wird. Auf diese Weise umgeht man den hohen Zeitaufwand der quantenmechanischen Rechnung. Insgesamt werden alle 3 Fälle, Berechnung der quantenmechanischen Ergebnisse, Anpassung des Modells an diese Ergebnisse sowie die eigentliche Simulation auf den Hochleistungsrechnern ausgeführt.

Results

Das Ergebnis der Simulation zeigt, dass sich zunächst eine 1-atomige Goldschicht auf dem Substrat bildet, anschließend „Inseln“ entstehen, welche im Zuge der Simulation wieder zusammenwachsen. Mit dem Wissen der Goldstruktur sind nun Rechnungen des elektrischen Transportes durch das Schichtsystem möglich um den GMR zu untersuchen und mit dem Experiment zu vergleichen. Zusätzlich können mit dem gewonnenen Modell für die Beschreibung des Materialsystems die Oberflächenstrukturen der MnAs-Nanocluster untersucht werden, welche für die experimentelle Herstellung der Cluster von Relevanz sind.

Reference

[1] P. Grünberg et al. (1986), Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers, Phys. Rev. Lett. 57, 2442. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.2442

Last Update: 2022-07-14 23:23