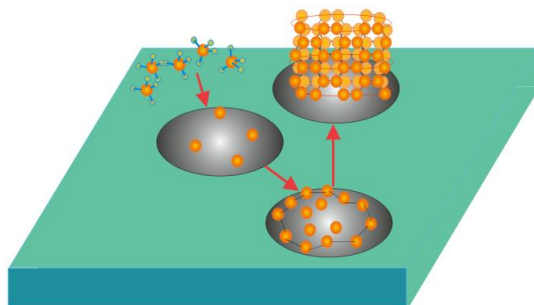


Magnētiskās FePt nanodaļiņas kā katalizators oglekļa nanocauruļu sintēzei

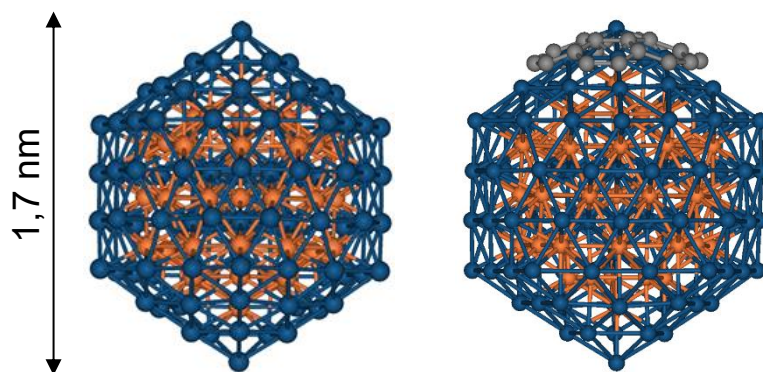
Aleksandrs Platoneņko

Dzelzs-platīna (FePt) sakausējumi jau ilgu laiku tiek pētīti kā perspektīvs materiāls datoru atmiņu ierīcēm un magnētiem. Ferromagnētiskās FePt nanodaļiņas ar $L1_0$ magnētisko struktūru ir perspektīvs materiāls magnētisko atmiņu tehnoloģiju jomā, jo tām ir augsta magnētiskā koercivitāte, kā arī magnetokristāliskā anizotropija, un šīs īpašības saglabājas arī nanodaļiņām.



Ilustrācija 2 Oglekļa atomu absorbcija uz nanodaļiņu virsmas un nanocaurules augšana

Šajā projektā mēs noteicam, kura FePt nanodaļiņu struktūra ir termodinamiski stabilāka un kura var tikt izmantota kā katalizators nanocauruļu augšanai. Izmantojot magnētiskās nanodaļiņas par katalizatoru ir arī iespējams ietekmēt nanocauruļu augšanu ar magnētisko lauku, tāda veida iegūstot nanocaurules ar izvēlēto hiralitāti. Pēc aprēķinu rezultātiem stabilāka nanodaļiņas struktūra ir “onion-like” tipa slāņainā struktūra, kuras virsma ir pārklātā ar Pt atomiem. Šī struktūra arī tika novērota eksperimentāli, tika pierādīts ka šīm nanodaļiņām ir labas magnētiskās īpašības un piemīt ķīmiskā stabilitāte.



Ilustrācija 1 $Fe_{43}Pt_{104}$ nanodaļiņa un nanodaļiņa ar adsorbēto oglekļa nanocaurules aizmetņi

Aprēķinot oglekļa atomu adsorbcijas enerģijas uz nanodaļiņas virsmas ir iespējams novērtēt oglekļa atomu mobilitāti un turpmāko nanocaurules aizmetņa veidošanas iespējas. Nanocauruļu augšanas simulācija dos iespēju labāk izpētīt interfeisa „nanodaļiņa-nanocaurule” īpašības, kas ir būtiski nanoelektronikas ierīcēm.

