

ΓΕΝΙΚΗ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ

Η επιστημονική μου δραστηριότητα επικεντρώνεται στην θεωρητική μελέτη των μαγνητικών και μαγνητο-οπτικών ιδιοτήτων κραμάτων των μετάλλων μετάβασης μέσω υπολογιστικών μεθόδων προσδιορισμού της ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές. Οι μέθοδοι αυτοί χρησιμοποιούνται τόσο για να εξηγηθούν πειραματικά αποτελέσματα όσο και για να προβλεφτούν καινούρια υλικά με επιθυμητές ιδιότητες. Σε μία τέτοια μέθοδο λύνονται αυτοσυνεπώς οι εξισώσεις Kohn-Sham οι οποίες περιγράφουν το κβαντικό πρόβλημα των N -ηλεκτρονίων με στόχο να υπολογιστεί η πραγματική πυκνότητα ηλεκτρονικού φορτίου και το δυναμικό του προς μελέτη υλικού. Έχω μακρά εμπειρία σε διάφορες μεθόδους ηλεκτρονικής δομής όπως : (i) η μέθοδος «Full-potential linearized muffin-tin orbitals (FPLMTO)», (ii) η μέθοδος «Full-potential screened Green's function Korringa-Kohn-Rostoker (FSKKR)», (iii) η μέθοδος «Full-potential local orbitals (FPLO)», (iv) η μέθοδος «Projected augmented waves (PAW)», και (v) η μέθοδος ψευδοδυναμικών «QUANTUM-Espresso».

Η έως τώρα ερευνά μου επικεντρώθηκε στα εξής προβλήματα:

- Αναπαραγωγή πειραματικών αποτελεσμάτων Κυκλικού Μαγνητικού Διχρωϊσμού Ακτίνων-X (ΚΜΔ) και υπολογισμοί μαγνητικής ανισοτροπίας. Τα πειράματα ΚΜΔ χρησιμοποιούνται για να προσδιορισθούν οι ατομικές μαγνητικές ροπές λεπτών υμενίων. Η επιτυχής αναπαραγωγή των πειραμάτων από την θεωρία οδηγεί στην κατανόηση της σχέσης μεταξύ του ΚΜΔ και της μαγνητικής ανισοτροπίας που προσδιορίζει την κατεύθυνση της ολικής μαγνητικής ροπής. (Δημοσιεύσεις: 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 12, 13, 17)
- Μέθοδος συντονισμού της τροχιακής μαγνητικής ροπής σε κράματα όπως το VAu_4 που οδηγεί σε μηδενική μαγνητική ανισοτροπία και σε καινούρια ούλτρα-μαλακά υλικά καθώς και μη ικανοποίηση του τρίτου κανόνα του Hund σε στερεά υλικά. (Δημοσιεύσεις: C1, 8, 9, 11, 61)
- Εύρεση κανόνα για τον υπολογισμό της ενέργειας που απαιτείται για την δημιουργία μιας επιφάνειας στα fcc παραμαγνητικά στοιχεία που απλοποιεί τα μοντέλα για την δημιουργία ναοκρυστάλλων. (Δημοσιεύσεις: 14, 18)
- Μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων κραμάτων Heusler που εμφανίζουν το φαινόμενο της "μνήμης σχήματος" και κατανόηση την μεταβολής τους κατά την μαρτενιτική μετάβαση φάσης. (Δημοσιεύσεις: 58, 60)
- Μελέτη των κυμάτων σπιν, των σταθερών ανταλλαγής και της Θερμοκρασίας Curie σε σιδηρομαγνήτες με εντοπισμένες μαγνητικές ροπές. (Δημοσίευση: 68)
- Μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων σιδηρομαγνητοηλεκτρικών κραμάτων, π.χ. BiFeO_3 και $\text{Bi}_2\text{MnFeO}_6$, που εμφανίζουν σύζευξη μεταξύ των μαγνητικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων τους και μεταβολή αυτών σε ετεροδομές. (Δημοσιεύσεις: C2, C4, 64)
- Μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων των ημι-μεταλλικών σιδηρομαγνητικών κραμάτων Heusler, όπως το NiMnSb και το Co_2MnAl καθώς και των κραμάτων τύπου CrAs ή CrSe, καθώς και πρόβλεψη καινούριων παρόμοιων υλικών. Τα υλικά αυτά παρουσιάζουν χάσμα στην ζώνη των ηλεκτρονίων σπιν-μειονότητας και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την δημιουργία ρεύματος με ηλεκτρόνια ενός μόνο σπιν που είναι σημαντικό για τις λεγόμενες "σπιντρονικές" συσκευές. Ποιο συγκεκριμένα μελέτησα τις εξής πτυχές αυτών των υλικών :
 - Προέλευση του χάσματος και συμπεριφορά της ολικής μαγνητικής ροπής τύπου Slater-Pauling (Δημοσιεύσεις: 19, 20, 21, 70, 72)
 - Τροχιακός μαγνητισμός (Δημοσιεύσεις: 25, 26)
 - Ιδιότητες επιφανειών (Δημοσιεύσεις: 15, 16, 27, 28, 56)
 - Ιδιότητες ενδοεπιφανειών με δυϊκούς ημιαγωγούς (Δημοσιεύσεις: 23, 24, 29, 56)
 - Σύνθετα κράματα Heusler (Δημοσιεύσεις: 22, 39, 47)
 - Υπολογισμός σταθερών ανταλλαγής και Θερμοκρασίας Curie (Δημοσιεύσεις: 30, 32)
 - Εμφάνιση ατελειών και αταξίας (Δημοσιεύσεις: 35, 37, 45, 59, 65)
 - Ημιμεταλλικοί Σιδηρομαγνήτες (Δημοσιεύσεις: 34, 40, 42, 49)
 - Ημιμεταλλικοί Αντισιδηρομαγνήτες (Δημοσιεύσεις: 38, 41, 49, 54, 63, 71)
 - Ατέλειες και σιδηρομαγνητισμός στα δυϊκά κράματα (Δημοσιεύσεις: 36, 46, 52, 55)
 - Ατέλειες στις διεπιφάνειες με δυϊκούς ημιαγωγούς (Δημοσίευση: 57)

- Μεταβάσεις Φάσεων (Δημοσιεύσεις: 50, 53, 67)
- "Spin-gapless" και μαγνητικοί ημιαγωγοί (Δημοσιεύσεις: 69, 72)
- Υλικά που λειτουργούν ως σπιν-φίλτρα (Δημοσίευση: 74)
- Υπολογισμός των Hubbard παραμέτρων U και J (Δημοσίευση: 73)
- sp-ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες (Δημοσιεύσεις: C3, 62, 66)
- Υλικά με ιδιαίτερο τεχνολογικό ενδιαφέρον (Δημοσίευση: 51)

Επίσης σε αυτά τα υλικά έχω δημοσιεύσει μετά από πρόσκληση και τρία εκτενή άρθρα επισκόπησης (Δημοσιεύσεις: 33, 43, 44) καθώς και ένα μικρής έκτασης άρθρο επισκόπησης σε πρακτικά συνεδρίου (Δημοσίευση: 31).

- Τέλος συμμετείχα σε δύο ανεξάρτητες εργασίες με θέμα: (i) την ανάπτυξη του φορμαλισμού για μία μέθοδο υπολογισμού ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές στον ευθύ χώρο (Δημοσίευση: 1) και (ii) τον υπολογισμό της αγωγιμότητας σε κβαντικά φρεάτια μαγνητικών ημιαγωγών (Δημοσίευση: 48).

Στη συνέχεια θα αναλύσω λεπτομερέστερα τα παραπάνω θέματα επικεντρώνοντας στα αποτελέσματα που δημοσιεύτηκαν σε άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές.

ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ

ΚΥΚΛΙΚΟΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΔΙΧΡΩΙΣΜΟΣ, ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΜΑΓΝΗΤΙΚΗΣ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΙΑΣ ΚΑΙ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΙΑ ΤΗΣ ΤΡΟΧΙΑΚΗΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΗΣ ΡΟΠΗΣ

Η ανάπτυξη της ακτινοβολίας synchrotron επέτρεψε την μελέτη υμενίων και κρυστάλλων μαγνητικών υλικών χρησιμοποιώντας κυκλικά πολωμένες ακτίνες-X. Ταυτόχρονα η ερευνητική εργασία του P. Bruno ανέδειξε την σχέση μεταξύ μαγνητικής ανισοτροπίας και ανισοτροπίας των τροχιακών μαγνητικών ροπών. Ο κυκλικός μαγνητικός διχρωισμός (ΚΜΔ) είναι η διαφορά των φασμάτων απορρόφησης δεξιά και αριστερά κυκλικά πολωμένων ακτίνων-X. Στις αρχές της δεκαετία του 90, οι Carrra και Thole έδειξαν ότι αν ολοκληρωθεί το φάσμα του μαγνητικού κυκλικού διχρωισμού για τις κορυφές L_3 και L_2 , που αντιστοιχούν σε διέγερση των $2p_{1/2}$ και $2p_{3/2}$ δέσμιων ηλεκτρονίων προς τις κενές d καταστάσεις, τότε μπορούμε κατευθείαν να έχουμε πρόσβαση στις ατομικές μαγνητικές ροπές τόσο την τροχιακή όσο και του σπιν. Μελετήσαμε τόσο τα δυϊκά κράματα των μετάλλων μετάβασης $3d$ όσο και την περίπτωση του επαγόμενου μαγνητισμού των $4d$ και $5d$. Με την μέθοδο που αναπτύξαμε υπολογίσαμε τις μαγνητικές ροπές σε συμφωνία με τα πειράματα και προβλέψαμε την σωστή κατεύθυνση αυτών. Παρότι η θεωρία υποτιμάει το ολοκληρωμένο κλάσμα L_3/L_2 η μεταβολή αυτού περιγράφει με ακρίβεια την μεταβολή των τροχιακών ροπών ανεξάρτητα από το άτομο και του τοπικού περιβάλλοντος αυτού. Οπότε οι θεωρητικοί υπολογισμοί του ΚΜΔ μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να μελετηθούν οι μαγνητικές ιδιότητες των $3d$ μετάλλων καθώς και ο επαγόμενος μαγνητισμός των $4d$ και $5d$ μετάλλων τόσο σε ενδομεταλλικά κράματα όσο και στην περίπτωση των λεπτών υμενίων.

- 2: I. Galanakis, S. Ostanin, M. Alouani, H. Dreysse, and J.M. Wills, *Ab-initio ground-state and $L_{2,3}$ x-ray magnetic circular dichroism of Mn-based Heusler alloys* Physical Review B **61**, 4093 (2000)**

Στην δημοσίευση αυτή μελετήσαμε μία σειρά από κράματα Heusler: τα ημιμεταλλικά NiMnSb, PdMnSb και PtMnSb καθώς και τα PtMnSe και PtMnTe. Αρχικά δείξαμε ότι πράγματι τα NiMnSb και PtMnSb παρουσιάζουν χάσμα στην ζώνη σπιν-μειονότητας ενώ το PdMnSb μπορεί να παρουσιάσει όταν του ασκήσουμε υδροστατική πίεση. Στη συνέχεια μελετήσαμε τις μαγνητικές ιδιότητες με ιδιαίτερη έμφαση στις επαγόμενες μαγνητικές ιδιότητες των ατόμων Pt στα τρία κράματα PtMnSe, PtMnSb και PtMnTe. Δείξαμε ότι ο ΚΜΔ είναι κατάλληλος για να εξηγήσουμε την μεταβολή στην μαγνητική ροπή λόγω τροχιακής στροφορμής των ατόμων Pt. Τέλος εφαρμόσαμε του κανόνες άθροισης των Carrra και Thole στα φάσματα ΚΜΔ και δείξαμε ότι βρίσκονται σε συμφωνία με τις μαγνητικές ροπές που υπολογίζουμε απευθείας από τη μέθοδο ηλεκτρονικής δομής που χρησιμοποιούμε.

- 4: I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreysse, *Interface magnetism in ultra-thin Fe/W(110) films from first-principles*, Physical Review B **62**, 3923 (2000)**

Μελετήσαμε την περίπτωση των υπέρλεπτων υμενίων Fe σε υπόστρωμα W(110). Δείξαμε ότι για ένα ατομικό στρώμα Fe ο άξονας εύκολης μαγνήτισης είναι παράλληλος στο υμένιο, ενώ όταν προσθέσουμε και μία δεύτερη

ατομική στρώση η μαγνητο-επιφανειακή και η μαγνητο-ελαστική ανισοτροπία αναγκάζουν τον άξονα εύκολης μαγνήτισης να περιστραφεί και να είναι κάθετος στο υμένιο. Στην περίπτωση τριών ατομικών στρωμάτων Fe, η ανισοτροπία λόγω σχήματος υπερσχύει και ο άξονας εύκολης μαγνήτισης ξαναγίνεται παράλληλος στον υμένιο. Τα αποτελέσματα αυτά εξήγησαν την παράξενη συμπεριφορά του άξονα μαγνήτισης που είχε παρατηρηθεί στα υμένια αυτά. Επιπλέον δείξαμε ότι ο ΚΜΔ είναι κατάλληλος για να μελετηθεί η επαγόμενη μαγνήτιση του υποστρώματος βολφραμίου λόγω της αλληλεπίδρασης με τα άτομα σιδήρου.

5: I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreysse, *Perpendicular magnetic anisotropy of binary alloys: A total energy calculation*, Physical Review B **62, 6475 (2000)**

Στην δημοσίευση αυτή υπολογίσαμε την μαγνητική ανισοτροπία και τις μαγνητικές ιδιότητες ενός μεγάλου πλήθους δυϊκών κραμάτων χρησιμοποιώντας δύο διαφορετικές προσεγγίσεις για το δυναμικό συσχέτισης και ανταλλαγής μεταξύ των ηλεκτρονίων. Δείξαμε ότι για τα κράματα που κρυσταλλώνουν σε τετραγωνικό πλέγμα οι δύο προσεγγίσεις δίνουν την ίδια εικόνα ως προς τις μαγνητικές ιδιότητες. Σημαντικές διαφορές προκύπτουν αναφορικά με την ενέργεια μαγνητικής ανισοτροπία κυβικών δομών όπου η τιμή αυτής είναι μία τάξη μεγέθους μικρότερη σε σχέση με τις τετραγωνικές δομές. Τέλος, δείξαμε στην περίπτωση υμενίων μεγάλου πάχους ότι η ανισοτροπία λόγω σχήματος είναι σημαντική σε σχέση με την μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία μόνο για ορισμένα δυϊκά κράματα όπως το FePd και το MnPt₃.

6: W. Grange, I. Galanakis, M. Alouani, M. Maret, J.-P. Kappler, and A. Rogalev, *Experimental and theoretical x-ray magnetic circular dichroism study of the magnetic properties of Co_{0.5}Pt_{0.5}*, Physical Review B **62, 1157 (2000)**

Στόχος της εργασίας αυτής είναι η θεωρητική επεξήγηση των πειραματικών μετρήσεων σε λεπτά υμένια CoPt που εμπεριέχονται στο πρώτο μισό της εργασίας. Επεξηγήσαμε την μεταβολή που παρατηρείτε στα πειραματικά φάσματα ΚΜΔ καθώς μεταβάλλεται η διεύθυνση πρόσπτωσης της ακτινοβολίας synchrotron συσχετίζοντας τα με την τροχιακή μαγνητική ροπή. Επιπλέον υπολογίσαμε την μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία που βρίσκεται σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα.

7: I. Galanakis, S. Ostanin, M. Alouani, H. Dreysse, and J.M. Wills, *Theoretical study of the magnetic properties and magnetic circular dichroism in the x-ray absorption spectra of the ordered Fe_{0.5}Pd_{0.5} alloy*, Physical Review B **61, 599 (2000)**

Στην δημοσίευση αυτή μελετήσαμε το δυϊκό κράμα FePd. Δείξαμε με υπολογισμούς ολικής ενέργειας συναρτήσει των παραμέτρων του τετραγωνικού πλέγματος ότι υπάρχει ένα μεγάλο εύρος παραμέτρων για τις οποίες η ολική ενέργεια ελάχιστα μεταβάλλεται εξηγώντας τα πειραματικά αποτελέσματα σε λεπτά υμένια που έδειξαν μία πλειάδα από παραμέτρους πλέγματος. Στην συνέχεια υπολογίσαμε το διάγραμμα φάσης της μαγνήτισης και δείξαμε ότι ανάλογα με τις παραμέτρους του πλέγματος ο άξονας εύκολης μαγνήτισης μπορεί να είναι είτε παράλληλος είτε κάθετος στην επιφάνεια του υμενίου και συσχετίσαμε την ενέργεια της μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας με την τροχιακή μαγνητική ροπή τόσο των ατόμων Fe όσο και των ατόμων Pd (στα τελευταία επάγονται μαγνητικές ιδιότητες λόγω της υβριδοποίησης των τροχιακών τους με τα τροχιακά των γειτονικών ατόμων Fe).

Στην δημοσίευση 3 [**I. Galanakis, S. Ostanin, M. Alouani, H. Dreysse, and H. Ebert, *Calculated x-ray magnetic circular dichroism of the ordered and disordered FePd alloy*, Computational Materials Science **17**, 455 (2000)**] επεκτείναμε την εργασία 7 και στην περίπτωση του άτακτου FePd κράματος.

Στην δημοσίευση 10 [**I. Galanakis, A. Debernardi, M. Alouani, and H. Dreysse, *Surface magnetism of 3d monolayers on a W(110) substrate probed by x-ray magnetic circular dichroism*, Surface Science **482-5**, 1030 (2001)**] επεκτείναμε την εργασία 4 και στην περίπτωση μονών ατομικών στρωμάτων μετάλλων μετάβασης διαφορετικών του Fe πάνω στο W(110) ενώ στην εργασία 13 [**A. Debernardi, I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreysse, *Magneto-optical properties of iron thin films on paramagnetic substrates*, Computational Materials Science **24**, 205 (2002)**] επεκτείναμε την μελέτη αυτή στην περίπτωση υπέρλεπτων υμενίων Fe σε υποστρώματα διαφορετικά του βολφραμίου.

Στην δημοσίευση 12 [**I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreysse, *Calculated magnetic properties of low dimensional systems: the AuCu- and AuCu₃-type ferromagnets*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **242-245**, 27 (2002)**] επεκτείναμε την εργασία 6 και σε άλλα δυϊκά κράματα των μετάλλων μετάβασης ενώ στην εργασία 17 [**I. Galanakis, M. Alouani, and H. Dreysse, *Spin-axis dependent magnetic properties of FePt and***

CoPt, Physica B **320**, 221 (2002)] επικεντρώθηκαν στην μεταβολή των μαγνητικών ιδιοτήτων των FePt και CoPt με την διεύθυνση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

ΑΝΑΣΤΡΟΦΗ ΤΗΣ ΤΡΟΧΙΑΚΗΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΗΣ ΡΟΠΗΣ ΣΕ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΚΡΑΜΑΤΑ

8: I. Galanakis, M. Alouani, P.M. Oppeneer, H. Dreysse, and O. Eriksson, *Tuning the orbital moment in transition metal compounds using ligand states*, Journal of Physics: Condensed Matter **13**, 4553 (2001)

Στην συγκεκριμένη δημοσίευση επεκτείνουμε την μελέτη μας και στα κράματα MnAu₄ και VPt₃ (το τελευταίο κράμα κρυσταλλώνει τόσο στη δομή AuCu₃ όσο και στη δομή TiAl₃). Δείξαμε ότι και για αυτά τα κράματα ισχύει η μη-ικανοποίηση του τρίτου κανόνα του Hund ως προς τις σχετικές κατευθύνσεις των μαγνητικών ροπών. Επιπλέον υπολογίσαμε για όλα τα κράματα την μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία και δείξαμε ότι η μερική αντικατάσταση των ατόμων του Au από Cu στο VAu₄ μηδενίζει την συνολική τροχιακή μαγνητική ροπή του υλικού και κατά συνέπεια μηδενίζεται και η ενέργεια της μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας δημιουργώντας ένα καινούριο ουλτρα-μαλακό μαγνητικό υλικό.

9: I. Galanakis, P. Ravindran, P.M. Oppeneer, L. Nordström, P. James, M. Alouani, H. Dreysse, and O. Eriksson, *Sign reversal of the orbital moment via ligand states*, Physical Review B **63**, 172405 (2001)

Η ανισοτροπία της τροχιακής μαγνητικής ροπής είναι καθοριστικής σημασίας δεδομένου ότι συνδέεται άμεσα με την ενέργεια μαγνητικής ανισοτροπίας που ελέγχει την διεύθυνση της συνολικής μαγνητικής ροπής. Δείξαμε στην συγκεκριμένη δημοσίευση στην περίπτωση του VAu₄, το οποίο αποτελεί ένα από τα ελάχιστα σιδηρομαγνητικά υλικά που αποτελούνται από μη-μαγνητικά στοιχεία, ότι η μεγάλη σταθερά σύζευξης μεταξύ της τροχιακής ροπής και της ροπής του σπιν του ατόμου του χρυσού επηρεάζει με δραστικό τρόπο της κατεύθυνση της τροχιακής μαγνητικής ροπής του ατόμου του βαναδίου με συνέπεια η τελευταία να είναι αντίθετη αυτής που προβλέπει ο τρίτος νόμος του Hund και αυτής που παρατηρείται στα περισσότερα κράματα.

61: V. Kapaklis, P.T. Korelis, B. Hjovarrsson, A. Vlachos, **I. Galanakis**, P. Pouloupylos, K. Ozdogan, M. Angelakeris, F. Wilhelm, and A. Rogalev, *Violation of Hund's third rule in structurally disordered ferromagnets*, Physical Review B **84**, 024411(2011)

Η μελέτη άμορφων υλικών οδηγεί σε καινούριες ιδιότητες και φαινόμενα της ύλης σε σχέση με τα κρυσταλλικά υλικά. Στη δημοσίευση αυτή παρουσιάζονται πειράματα Μαγνητικού Διχρωϊσμού τόσο σε κρυσταλλικά όσο και σε άμορφα υμένα CoZr. Στα άμορφα υμένα ο τρίτος κανόνας του Hund δεν ικανοποιείται για τις επαγόμενες μαγνητικές ροπές των ατόμων Zr. Με υπολογισμούς από πρώτες αρχές δείχνουμε ότι αυτό οφείλεται τόσο στο μικρότερο μήκος των δεσμών Co-Zr όσο και στο διαφορετικό πλήθος πρώτων γειτόνων σε σχέση με τα κρυσταλλικά υμένα.

Στις δημοσιεύσεις C1 και 11 [P.M. Oppeneer, **I. Galanakis**, P. James, O. Eriksson, and P. Ravindran, *Theory of the anisotropic magneto-optical Kerr effect in artificial FeAu and MnAu and in XAu₄ (X=V,Cr,Mn) compounds*, Journal of the Magnetic Society of Japan **23**, 21 (1999) & P.M. Oppeneer, **I. Galanakis**, A. Grechnev, and O. Eriksson, *Unusual magnetism and magnetocrystalline anisotropy of CrPt₃*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **240**, 371 (2002)] επεκτείνουμε την άρση του τρίτου νόμου του Hund και σε καινούρια κράματα και κυρίως το CrPt₃.

ΚΑΝΟΝΑΣ ΓΙΑ ΤΟΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟ ΤΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΚΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΤΩΝ ΠΑΡΑΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ F.C.C. ΜΕΤΑΛΛΩΝ

14: I. Galanakis, N. Papanikolaou, and P.H. Dederichs, *Applicability of the Broken-Bond Rule to the Surface Energy of the fcc Metals*, Surface Science **511**, 1 (2002)

Επεκτείνουμε την προηγούμενη εργασία μελετώντας και την περίπτωση των παραμαγνητικών μετάλλων μετάβασης (Pd, Pt, Rh και Ir) και των sp μετάλλων (Ca, Sr, Al και Pb) που κρυσταλλώνουν στην δομή fcc. Δείξαμε ότι η σχέση για την ενέργεια που απαιτείται για την διάνοιξη μίας επιφάνειας στα ευγενή μέταλλα ισχύει

και σε αυτή την περίπτωση με λίγο μεγαλύτερες παρεκκλίσεις για τα sp μέταλλα. Πρόσφατα η ορθότητα της σχέσης αυτής επαληθεύτηκε στην περίπτωση δημιουργίας νανο-κρυστάλλων μολύβδου.

18: I. Galanakis, G. Bihlmayer, V. Bellini, N. Papanikolaou, R. Zeller, S. Blügel, and P.H. Dederichs, *Broken-Bond Rule for the Surface Energies of Noble Metals*, Europhysics Letters **58**, 751 (2002)

Η ενέργεια που απαιτείται για την δημιουργία μίας επιφάνειας αποτελεί θεμελιώδη ιδιότητα ενός κρυστάλλου εφόσον ελέγχει τον τρόπο δημιουργίας και την μορφή των κρυστάλλων. Η ενέργεια αυτή εξαρτάται από τους δείκτες Miller της επιφάνειας. Πειραματικά είναι γνωστές μόνο μέσες τιμές αυτής και οι υπολογισμοί ηλεκτρονικής δομής είναι ο μοναδικός τρόπος προσδιορισμού τους. Χρησιμοποιώντας την μέθοδο Korringa-Kohn-Rostoker, μελετήσαμε την ενέργεια σχηματισμού επιφανειών για τα f.c.c. ευγενή μέταλλα (Cu, Ag και Au). Η εξάρτηση της επιφανειακής ενέργειας από την διεύθυνση της επιφάνειας μπορεί να περιγραφεί παίρνοντας υπόψη μόνο τους σπασμένους δεσμούς μεταξύ πρώτων γειτόνων. Άρα η ελεύθερη ενέργεια $\gamma(hkl)$ σε eV/(άτομο επιφάνειας) που χρειάζεται για την δημιουργία της επιφάνειας με δείκτη Miller (hkl) είναι απλώς το γινόμενο μεταξύ της ενέργειας για τον σχηματισμό της (111), $\gamma(111)$, και του πηλίκου των σπασμένων δεσμών μεταξύ πρώτων γειτόνων $N(hkl)$ και του $N(111)=3$.

ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΥΛΙΚΑ ΠΟΥ ΠΑΡΟΥΣΙΑΖΟΥΝ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ "ΜΝΗΜΗΣ ΣΧΗΜΑΤΟΣ"

58: I. Galanakis and E. Sasioglu, *Structural-induced antiferromagnetism in Mn-based full Heusler alloys: The case of Ni_2MnAl* , Applied Physics Letters **98**, 102514 (2011)

Συνδυάζοντας υπολογισμούς της ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές και την χρησιμοποίηση μίας πρότυπης Χαμιλτονιανής τύπου Heisenberg, δείξαμε ότι το κράμα Ni_2MnAl παρουσιάζει μία μετάβαση φάσης από την σιδηρομαγνητική στην αντισιδηρομαγνητική τάξη όταν επάγεται αταξία ανάμεσα στα άτομα Mn και Al. Η μετάβαση αυτή οφείλεται στην μείωση της απόστασης μεταξύ των ατόμων Mn σε συμφωνία με την καμπύλη Bethe-Slater. Τα αποτελέσματά μας επεξηγούν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα και δείχνουν ότι ο περιορισμός της αταξίας είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την μεγιστοποίηση της απόδοσης των μαγνητοηλεκτρονικών διατάξεων που βασίζονται σε κράματα Heusler.

60: I. Galanakis and E. Sasioglu *Variation of the magnetic properties of Ni_2MnGa Heusler alloy upon tetragonalization*, Journal of Physics D: Applied Physics **44**, 235001 (2011)

Στη δημοσίευση αυτή μελετήσαμε την επίδραση της μαρτενσιτικής μετάβασης φάσης στις σταθερές ανταλλαγής του Ni_2MnGa . Η τετραγωνοποίηση του πλέγματος που λαμβάνει χώρα στην μετάβαση στην μαρτενσιτική φάση επηρεάζει κυρίως τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων Mn. Οι μαγνητικές σταθερές ανταλλαγής, που υπολογίστηκαν, χρησιμοποιήθηκαν για την εκτίμηση της θερμοκρασία Curie που βρέθηκε να είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα. Τέλος μελετήσαμε την συμπεριφορά της μαγνήτιση με τη θερμοκρασία και βρήκαμε μία μικρή απόκλιση των θεωρητικών από τα πειραματικά δεδομένα ακριβώς στην θερμοκρασία μετάβασης.

ΚΥΜΑΤΑ SPIN ΣΕ ΥΛΙΚΑ ΜΕ ΕΝΤΟΠΙΣΜΕΝΕΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΡΟΠΕΣ

68: I. Galanakis and E. Sasioglu, *Ab-initio calculation of effective exchange interactions, spin waves and Curie temperature in $L2_1$ and $L1_2$ -type local moment ferromagnets*, Journal of Materials Science **47**, 7678 (2012)

Συνδυάζοντας υπολογισμούς της ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές και την χρησιμοποίηση μίας πρότυπης Χαμιλτονιανής τύπου Heisenberg, μελετήσαμε τις ιδιότητες των μαγνονίων στους σιδηρομαγνήτες με εντοπισμένες μαγνητικές ροπές και πιο συγκεκριμένα τα κράματα Heusler που κρυσταλλώνουν στην δομή $L2_1$ (Cu_2MnAl , Ni_2MnSn , Pd_2MnSn) και τα δυϊκά κράματα που κρυσταλλώνουν στην δομή $L1_2$ (VPt_3 , $CrPt_3$, $MnPt_3$). Σε αυτά τα υλικά τα άτομα των μετάλλων μετάβασης δεν είναι πλησιέστεροι γείτονες με αποτέλεσμα τα 3d τροχιακά τους να παρουσιάζουν ασθενή αλληλοεπικάλυψη και οι υπολογισμένες σταθερές ανταλλαγής να

συμπεριφέρονται όπως προβλέπει η θεωρία RKKY. Η μεθοδολογία που χρησιμοποιούμε προβλέπει σχέσεις διασποράς για τα κύματα σπιν σε πολύ καλή συμφωνία με τα διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα. Το ίδιο ισχύει και για τη Θερμοκρασία Curie με εξαίρεση υλικά όπως το $V\text{Pt}_3$ όπου οι υπολογισμοί ηλεκτρονικής δομής υπερεκτιμούν τις μαγνητικές ροπές των ατόμων.

ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΟΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

64: K. Koumpouras and **I. Galanakis**, *Ab-initio study of competing magnetic configurations in cubic BiFeO_3 alloys*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **323**, 2328 (2011)

Στη δημοσίευση αυτή μελετήσαμε τις ιδιότητες του μαγνητοηλεκτρικού κράματος BiFeO_3 σε κυβική δομή περοβσκίτη. Εκτός της σιδηρομαγνητικής κατάστασης υπάρχουν και τρεις δυνατές αντισιδηρομαγνητικές διατάξεις για τα άτομα του σιδήρου τα οποία είναι οι κύριοι φορείς των μαγνητικών ροπών. Οι διάφορες μαγνητικές διατάξεις αντιστοιχούν σε κοντινές τιμές της ολικής ενέργειας και για μεγάλες τιμές της πλεγματικής σταθεράς προτιμητέα είναι ο αντισιδηρομαγνητισμός τύπου G. Επιπλέον το υλικό αυτό είναι μονωτής με μία σημαντική μεταφορά φορτίου από τα άτομα Fe και Bi προς τις p-καταστάσεις των ατόμων οξυγόνου. Αν το υλικό αυτό αναπτυχθεί σε μορφή ετεροδομών η μικρότερη συμμετρία στην ενδοεπιφάνεια θα οδηγήσει σε μετακίνηση των ατόμων του οξυγόνου και στην εμφάνιση σιδηροηλεκτρικής τάξης.

C2: K. Koumpouras and **I. Galanakis**, *Magnetic configurations in cubic $\text{Bi}_2\text{MnFeO}_6$ alloys from first-principles*, Journal of Spintronics and Magnetic Nanomaterials **1**, 57 (2012)

Στη δημοσίευση αυτή επεκτείνουμε την προηγούμενη μελέτη μας στην περίπτωση που το 50% των ατόμων σιδήρου έχουν αντικατασταθεί από άτομα μαγγανίου παίρνοντας υπόψη τρεις διαφορετικές πιθανές κατανομές των ατόμων Fe και Mn. Σε όλες τις περιπτώσεις οι ηλεκτρονικές και μαγνητικές ιδιότητες είναι παρόμοιες των αρχικών BiFeO_3 και BiMnO_3 κραμάτων. Τα άτομα του οξυγόνου παίζουν έναν σημαντικό ρόλο λειτουργώντας ως ασπίδα μεταξύ των διαφορετικών ατόμων των μετάλλων μετάβασης και μεταφέροντας τις μαγνητικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων Fe και Mn.

C4: K. Koumpouras and **I. Galanakis**, *Suppression of magnetism in BiFeO_3 ultrathin epitaxial multilayers*, Journal of Spintronics and Magnetic Nanomaterials **1**, 91 (2012)

Στη δημοσίευση αυτή μελετήσαμε υπέρλεπτα πολυστρωματικά υμένα μεταξύ του BiFeO_3 και μίας σειράς υλικών με διαφορετικές ηλεκτρονικές ιδιότητες (τον ημιαγωγό InP, το απλό μέταλλο V και τον σιδηρομαγνήτη Fe). Σε όλες τις υπό μελέτη περιπτώσεις οι μαγνητικές ιδιότητες του BiFeO_3 υποβαθμίστηκαν σε μεγάλο βαθμό και σε ορισμένες περιπτώσεις το σύστημα απώλεσε εντελώς τις μαγνητικές του ιδιότητες.

HMI-MΕΤΑΛΛΙΚΑ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

Όπως ήδη ανέφερα, η ραγδαία εξέλιξη του κλάδου της μαγνητο-ηλεκτρονικής αύξησε το ενδιαφέρον στα υλικά που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συσκευές όπου πλέον το σπιν του ηλεκτρονίου και όχι το φορτίο ελέγχει την λειτουργία της συσκευής. Η πιο σημαντική τέτοια κατηγορία υλικών είναι οι λεγόμενοι ημι-μεταλλικοί σιδηρομαγνήτες όπου η μια ζώνη του σπιν είναι μεταλλική και η άλλη ημιαγωγική. Ο όρος ημι-μέταλλο (half-metal) πρωτοχρησιμοποιήθηκε το 1983 από τον de Groot που μελέτησε το NiMnSb και ανακάλυψε αυτή την συμπεριφορά. Το NiMnSb ανήκει στην οικογένεια των λεγόμενων ημι-κραμάτων Heusler και η ύπαρξη χάσματος στη ζώνη των σπιν μειονότητας επιβεβαιώθηκε πειραματικά το 1990. Επίσης η ύπαρξη χάσματος πιθανολογήθηκε και για τα λεγόμενα πλήρη κράματα Heusler όπως το Co_2MnGe .

➤ Προέλευση του χάσματος και συμπεριφορά της ολικής μαγνητικής ροπής τύπου Slater-Pauling

19: **I. Galanakis**, P.H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Origin and Properties of the Gap in the Half-Ferromagnetic Heusler Alloys*, Physical Review B **66**, 134428 (2002)

Αρχικά μελετήσαμε τα λεγόμενα ημι-κράματα Heusler όπως το NiMnSb. Επιβεβαιώσαμε την ύπαρξη χάσματος σε αυτά τα υλικά και δείξαμε ότι το χάσμα στη ζώνη σπιν-μειονότητας προέρχεται από την υβριδοποίηση μεταξύ των ατόμων των μετάλλων μετάβασης τα οποία δημιουργούν δέσμια και αντιδέσμια τροχιακά. Τα *sp* άτομα σε αυτά τα υλικά παίζουν ένα σημαντικό ρόλο εφόσον παρέχουν ηλεκτρονικές ζώνες τύπου *s* και *p* χαμηλά σε ενέργεια που φιλοξενούν *d* ηλεκτρόνια των μετάλλων μετάβασης. Η ολική μαγνητική ροπή *M* (σε μαγνητόνες Bohr) για αυτά τα υλικά είναι ανάλογη του συνολικού αριθμού ηλεκτρονίων *Z* και δίνεται από τις σχέσεις $M=Z-18$. Καθώς αυξάνουμε το πλήθος των ηλεκτρονίων σθένους εντός της μοναδιαίας κυψελίδας το επίπεδο Φερμί παραμένει εντός του χάσματος των ηλεκτρονίων σπιν-μειονότητας και τα επιπλέον ηλεκτρόνια γεμίζουν αποκλειστικά καταστάσεις σπιν-πλειονότητας, ανοίγοντας τον δρόμο για την δημιουργία καινούριων κραμάτων με προκαθορισμένες μαγνητικές ιδιότητες. Αυτή η συμπεριφορά της μαγνητικής ροπής είναι γνωστή από τα δυϊκά κράματα ως συμπεριφορά Slater-Pauling.

20: I. Galanakis, P.H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Slater-Pauling Behavior and Origin of the Half-Metallicity of the Full-Heusler Alloys*, Physical Review B **66**, 174429 (2002)

Επεκτείνουμε την μελέτη μας και στα πλήρη κράματα Heusler όπως το Co₂MnGe. Και τα κράματα αυτά παρουσιάζουν ημιμεταλλική συμπεριφορά. Η ύπαρξη καταστάσεων εντοπισμένων αποκλειστικά στα άτομα του κοβαλτίου οδηγεί σε έναν τροποποιημένο νόμο για την μαγνητική ροπή σε σχέση με τα προηγούμενα κράματα που τώρα δίνεται από την σχέση $M=Z-24$, όπου *M* η συνολική μαγνητική ροπή κατά σπιν σε μαγνητόνες Bohr και *Z* το πλήθος των ηλεκτρονίων σθένους ανά μοναδιαία κυψελίδα. Χρησιμοποιώντας την σχέση αυτή, προβλέψαμε αρκετά καινούρια κράματα που θα ήταν εν δυνάμει ημι-μεταλλικά και τα οποία στη συνέχεια κατασκευάστηκαν πειραματικά.

21: I. Galanakis and Ph. Mavropoulos, *Zinc-Blende compounds of transition elements with N, P, As, Sb, S, Se and Te as half-metallic systems*, Physical Review B **67**, 104417 (2003)

Μία άλλη κατηγορία σιδηρομαγνητικών μεταλλικών κραμάτων συγγενών των Heusler που παρουσιάζουν ημιμεταλλική συμπεριφορά είναι αυτά μεταξύ των μετάλλων μετάβασης V, Cr, Mn με τα *sp* στοιχεία N, P, As, Sb, S, Se, Te. Τα κράματα αυτά κρυσταλλώνουν στην δομή σφαλερίτη των δυϊκών ημιαγωγών GaAs και ZnSe σε μορφή λεπτών υμενίων πάνω σε κατάλληλα υποστρώματα (σε μορφή κρυστάλλου η δομή τους είναι διαφορετική). Ήδη έχουν κατασκευαστεί πειραματικά υμένα από CrAs, CrSb, και MnAs πάνω σε υπόστρωμα GaAs. Δείξαμε ότι όλα αυτά τα υλικά είναι ημι-μέταλλα για μία μεγάλη γκάμα πλεγματικών σταθερών και η μαγνητική ροπή ακολουθεί μία σχέση Slater-Pauling της μορφής $M=Z-8$, ενώ το χάσμα οφείλεται στην υβριδοποίηση μεταξύ των *d*-τροχιακών των μετάλλων μετάβασης και των *p* τροχιακών των *sp* ατόμων.

70: S. Skaftouros, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and **I. Galanakis**, *Generalized Slater-Pauling rule for the inverse Heusler compounds*, Physical Review B **87**, 024420 (2013)

Σε συνέχεια της εργασίας 21 μελετήσαμε τη εμφάνιση συμπεριφοράς τύπου Slater-Pauling στα λεγόμενα "ανάστροφα" κράματα Heusler. Αυτά έχουν τον χημικό τύπο X₂YZ, όπου (X=Sc, Ti, V, Cr ή Mn), (Z=Al, Si ή As) και το Y μεταβάλλεται από το Ti στο Zn. Τα περισσότερα εξ' αυτών είναι ημιμεταλλικοί μαγνήτες. Υπάρχουν τρεις διαφορετικές μορφές του κανόνα Slater-Pauling ανάλογα με τον χημικό τύπο των ατόμων που συνθέτουν το κράμα. Η εμφάνιση αυτών των κανόνων μπορεί να κατανοηθεί αν μελετηθεί η υβριδοποίηση των *d*-τροχιακών των ατόμων των μετάλλων μετάβασης.

72: K. Ozdogan, E. Sasioglu, and **I. Galanakis**, *Slater-Pauling behavior in LiMgPdSn-type multifunctional quaternary Heusler materials: Half-metallicity, spin-gapless and magnetic semiconductors*, Journal of Applied Physics **113**, 193903 (2013)

Στην εργασία αυτή μελετήσαμε 60 κράματα Heusler τύπου LiMgPdSn. Όλα τα υπό μελέτη κράματα ακολουθούσαν κανόνες τύπου Slater-Pauling εμφανίζοντας μία πλειάδα μαγνητικών συμπεριφορών. Μεταξύ των υπό μελέτη κραμάτων 41 βρέθηκαν να είναι ημι-μεταλλικά, 8 "spin-gapless" ημιαγωγοί και 9 σύνθετες ημιαγωγοί. Τα κράματα CoVTiAl και CrVTiAl βρέθηκε ότι είναι, αντίστοιχα, σιδηρομαγνητικός και αντισιδηρομαγνητικός ημιαγωγός με μεγάλα ενεργειακά χάσματα και στις δύο κατευθύνσεις του σπιν. Όλα τα κράματα που μελετήθηκαν αναμένονται να έχουν μεγάλες θερμοκρασίες Curie καθιστώντας τα κατάλληλα για σπιντρονικές/μαγνητοηλεκτρονικές εφαρμογές.

➤ Τροχιακός μαγνητισμός

26: I. Galanakis, *Orbital magnetism in the half-metallic Heusler alloys*, *Physical Review B* **71**, 012413 (2005)

Υπολόγισα χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό Dirac τις τροχιακές μαγνητικές ροπές των ημιμεταλλικών κραμάτων Heusler. Οι ροπές αυτές είναι μία τάξη μεγέθους μικρότερες από ότι οι μαγνητικές ροπές λόγω σπιν. Η μεταβολή τους ανάμεσα στα διάφορα υλικά εξηγήθηκε σε όρους φαινομένων υβριδοποίησης και ισχύς της σύζευξης σπιν-τροχιάς. Τέλος οι υπολογισμένες ροπές συγκρίθηκαν με αυτές που προέρχονται από πειράματα μαγνητικού διχρωϊσμού σε λεπτά υμένα και εξηγήσαμε τις διαφορές που προκύπτουν από διαφορετικές πειραματικές εργασίες σε αυτά τα υλικά.

Στην δημοσίευση 25 [Ph. Maniopoulos, **I. Galanakis**, V. Popescu, and P.H.Dederichs, *The influence of spin-orbit coupling on the band gap of Heusler alloys*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, S5759 (2004)] μελετήσαμε την επίδραση της σύζευξης σπιν-τροχιάς σε διάφορα ημι-μεταλλικά κράματα και δείξαμε ότι είναι σημαντική μόνο όταν το υλικό περιέχει βαριά στοιχεία όπως το Bi.

➤ Ιδιότητες επιφανειών

15: I. Galanakis, *Surface Half-Metallicity of CrAs in the Zinc-Blende Structure*, *Physical Review B* **66**, 012406 (2002)

Στη δημοσίευση αυτή μελέτησα το CrAs σε δομή σφαλερίτη και για τις πλεγματικές σταθερές των δυϊκών ημιαγωγών GaAs, AlAs και InAs. Έδειξα ότι και για τις τρεις αυτές πλεγματικές σταθερές το CrAs παρουσιάζει ημιμεταλλική συμπεριφορά και στη συνέχεια μελέτησα τις (001) επιφάνειες. Έδειξα ότι η επιφάνεια που τελειώνει σε ένα ατομικό στρώμα As χάνει την ημιμεταλλικότητα της λόγω επιφανειακών καταστάσεων που επάγονται εντός του χάσματος. Αντίθετα όταν το τελευταίο επιφανειακό στρώμα αποτελείται από άτομα Cr, η ημιμεταλλικότητα διατηρείται γιατί τα επιφανειακά άτομα Cr φιλοξενούν το επιπλέον φορτίο από τους σπασμένους δεσμούς στις κενές καταστάσεις σπιν-πλειοψηφείας.

16: I. Galanakis, *Surface Properties of the Half- and Full-Heusler Alloys*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 6329 (2002)

Μελέτησα τις (001) επιφάνειες των ημι-κραμάτων Heusler NiMnSb, CoMnSb και PtMnSb καθώς και των πλήρες κραμάτων Heusler Co₂MnGe, Co₂MnSi και Co₂CrAl. Σε όλες τις περιπτώσεις επιφανειακές καταστάσεις εντός του χάσματος λόγω των σπασμένων δεσμών στην επιφάνεια κατέστρεψαν την ημιμεταλλικότητα. Σημαντική πόλωση κατά σπιν στο επίπεδο Φέρμι παρατηρήθηκε καταρχάς στην περίπτωση του NiMnSb όταν το επιφανειακό στρώμα αποτελούταν από άτομα Mn και Sb σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα σε λεπτά υμένα αυτού του υλικού. Επιπλέον στην περίπτωση του Co₂CrAl όταν το επιφανειακό στρώμα αποτελούταν από άτομα Cr και Al, η υψηλή πυκνότητα καταστάσεων σπιν-πλειονότητας στο επίπεδο Φέρμι που παρουσιάζουν τα άτομα Cr οδηγεί σε μία πόλωση κατά σπιν των ηλεκτρονίων στο επίπεδο Φέρμι που προσεγγίζει το 84%.

27: I. Galanakis, *Electronic and magnetic properties of the (111) surfaces of NiMnSb*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **288**, 411 (2005)

Μελέτησα τις (111) επιφάνειες του NiMnSb και έδειξα ότι για όλους τους δυνατούς τερματισμούς υπάρχει μία επιφανειακή κατάσταση εντός του χάσματος που επιμένει για πολλά ατομικά στρώματα κάτω από την επιφάνεια σε αντίθεση με τις (001) επιφάνειες που οι επιφανειακές καταστάσεις ήταν εντοπισμένες μόνο για τα ατομικά στρώματα κοντά στην επιφάνεια. Άρα σε όλες τις περιπτώσεις χάνεται η ημιμεταλλικότητα του τέλειου κρυστάλλου. Όπως αναμενόταν οι μαγνητικές ροπές των ατόμων στην επιφάνεια είναι αρκετά αυξημένες σε σχέση με τα άτομα στον τέλειο κρύσταλλο.

28: M. Lezaic, **I. Galanakis**, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Structural and magnetic properties of the (001) and (111) surfaces of the half-metal NiMnSb*, Journal of Physics: Condensed Matter **17**, 3121 (2005)

Στην δημοσίευση αυτή επεκτείναμε τις προηγούμενες μελέτες μας παίρνοντας υπόψη και την αναδόμηση της επιφάνειας όταν αυτή δημιουργείται. Εν γένει η αναδόμηση της επιφάνειας δεν επιφέρει μεγάλες αλλαγές στις μαγνητικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες των επιφανειών με εξαίρεση ορισμένες (111) επιφάνειες όπου αποκαθιστά σημαντικό μέρος της πόλωσης κατά σπιν των ηλεκτρονίων στο επίπεδο Φέρμι που χάθηκε όταν δημιουργήθηκε η επιφάνεια.

Στην δημοσίευση 56 [**I. Galanakis**, *Effect of surfaces and interfaces on the electronic, magnetic and gap-related properties of the half-metal Co_2MnSn* , Journal of Computational and Theoretical Nanoscience **7**, 474 (2010)] επεκτείναμε την εργασία 17 και στις (001) επιφάνειες του Co_2MnSn .

➤ Ιδιότητες ενδοεπιφανειών με δυϊκούς ημιαγωγούς

23: Ph. Mavropoulos, **I. Galanakis**, and P.H.Dederichs, *Multilayers of Zinc-Blende Half-Metals with Semiconductors*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 4261 (2004)

Παρουσιάζουμε υπολογισμούς για πολυστρώματα ανάμεσα στα CrAs και CrSb και σε διάφορους III-V και II-VI ημιαγωγούς. Εξετάσαμε τόσο τις τέλειες όσο και τις τετραγωνοποιημένες δομές και δείξαμε ότι η ημιμεταλλικότητα μπορεί να διατηρηθεί στην ενδοεπιφάνεια. Περιγράψαμε έναν μηχανισμό που λαμβάνει χώρα στην ενδοεπιφάνεια με τους ημιαγωγούς ο οποίος οδηγεί σε μη-ακέραιες τιμές της μαγνητικής ροπής διατηρώντας την ημιμεταλλικότητα και αποδείξαμε έναν απλό τύπο για να την υπολογίσουμε.

24: **I. Galanakis**, *Towards half-metallic interfaces: the $\text{Co}_2\text{CrAl/InP}$ contacts*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 8007 (2004)

Στην δημοσίευση αυτή μελέτησα τις ενδοεπιφάνειες ανάμεσα στο Co_2CrAl και τον ημιαγωγό InP. Έδειξα ότι όταν στην ενδοεπιφάνεια το ημιμέταλλο συμμετέχει με ένα ατομικό στρώμα που αποτελείται από άτομα Cr, η πόλωση κατά σπιν μπορεί να ξεπεράσει το 80% λόγω της πολύ μεγάλης μαγνητικής ροπής των ατόμων χρωμίου. Όταν στην ενδοεπιφάνεια βρίσκονται άτομα Co, υπάρχουν ενδοεπιφανειακές επαγόμενες καταστάσεις που βρίσκονται όμως εντοπισμένες μόνο στα ατομικά στρώματα πολύ κοντά στην ενδοεπιφάνεια.

29: **I. Galanakis**, M. Lezaic, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Interface properties of the NiMnSb/InP and NiMnSb/GaAs contacts*, Physical Review B **71**, 214431 (2005)

Στην μελέτη αυτή επικεντρωθήκαμε στις ενδοεπιφάνειες μεταξύ του NiMnSb και των ημιαγωγών InP και GaAs χρησιμοποιώντας δύο διαφορετικές μεθόδους ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές. Παρότι στην περίπτωση των επαφών NiMnSb/InP(001) η ημιμεταλλικότητα χάνεται, είναι δυνατόν να διατηρήσουμε μία μεγάλη πόλωση κατά σπιν αν η ενδοεπιφάνεια αποτελείται από στρώματα Ni και P. Στην περίπτωση των ενδοεπιφανειών με το GaAs η μεγαλύτερη υβριδοποίηση μεταξύ των d-τροχιακών του Ni και των p-τροχιακών του As σε σχέση με την επαφή Ni-P καταστρέφει την πόλωση. Οι (111) ενδοεπιφάνειες παρουσιάζουν έντονες ενδοεπιφανειακές καταστάσεις, αλλά υπάρχουν περιπτώσεις που η πόλωση φτάνει και το 74%.

Στην δημοσίευση 56 [**I. Galanakis**, *Effect of surfaces and interfaces on the electronic, magnetic and gap-related properties of the half-metal Co_2MnSn* , Journal of Computational and Theoretical Nanoscience **7**, 474 (2010)] επεκτείναμε την εργασία 16 και στις ενδοεπιφάνειες του Co_2MnSn με τον ημιαγωγό InAs και το μη-μαγνητικό μέταλλο V, οι οποίες βρέθηκε να μην είναι ημιμεταλλικές.

➤ Σύνθετα κράματα Heusler

22: **I. Galanakis**, *Appearance of Half-Metallicity in the Quaternary Heusler Alloys*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 3089 (2004)

Σε αυτή την αρχική δημοσίευση μελέτησα τις μαγνητικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες για διάφορες οικογένειες πλήρες-κράματων Heusler όπου μία πλεγματική θέση καταλαμβάνεται με τυχαίο τρόπο από

άτομα δύο διαφορετικών χημικών στοιχείων, π.χ. $\text{Co}_2[\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x]\text{Al}$, $\text{Co}_2\text{Mn}[\text{Al}_{1-x}\text{Sn}_x]$ και $[\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x]_2\text{MnAl}$. Έδειξα ότι όλα τα ενδιάμεσα κράματα παρουσιάζουν την ημιμεταλλική συμπεριφορά και ακολουθούν την σχέση Slater-Pauling $M=Z-24$ ανεξαρτήτως της προέλευσης των έξτρα ηλεκτρονίων και συνεπώς η ολική μαγνητική ροπή παρουσιάζει γραμμική συμπεριφορά με την συγκέντρωση των διαφόρων χημικών στοιχείων.

39: K. Ozdogan, B. Aktas, **I. Galanakis** and E. Sasioglu, *Influence of mixing the low-valent transition metal atoms ($Y, Y^* = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}$) on the properties of the quaternary $\text{Co}_2[\text{Y}_{1-x}\text{Y}^*_x]\text{Z}$ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) Heusler compounds*, Journal of Applied Physics **101**, 073910 (2007)

Στην δημοσίευση αυτή επικεντρωθήκαμε στα κράματα τύπου $\text{Co}_2[\text{Y}_{1-x}\text{Y}^*_x]\text{Z}$ όπου τα Y και Y^* ήταν ένα από τα μέταλλα μετάβασης Cr, Mn ή Fe και Z μία σειρά από sp άτομα. Δείξαμε ότι για εφαρμογές στην μαγνητοηλεκτρονική τα πιο κατάλληλα κράματα είναι αυτά που ανήκουν στην οικογένεια $\text{Co}_2[\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x]\text{Z}$ με $x > 0.5$ ανεξαρτήτως του πιο είναι το sp άτομο γιατί συνδυάζουν την ημιμεταλλική συμπεριφορά με χάσματα στην ζώνη σπιν-μειονότητας μεγάλου ενεργειακού εύρους και υψηλή πυκνότητα καταστάσεων για τα ηλεκτρόνια με σπιν-πλειονότητας στο επίπεδο Φέρμι. Η παρουσία ατόμων Fe σημαντικά μειώνει την τελευταία ιδιότητα και σε συνδυασμό με ορισμένα στοιχεία όπως το Si φθάνει ακόμα και στο να καταστρέψει την ημιμεταλλικότητα.

47: K. Ozdogan, E. Sasioglu and **I. Galanakis**, *Engineering the electronic, magnetic and gap-related properties of the quinary half-metallic Heusler alloys*, Journal of Applied Physics **103**, 023503 (2008)

Επεκτείνουμε την παραπάνω μελέτη και στην περίπτωση κραμάτων του τύπου $\text{Co}_2[\text{Y}_{1-x}\text{Y}^*_x][\text{Z}_{1-y}\text{Z}^*_y]$. Χρησιμοποιήσαμε διάφορες προσεγγίσεις για να πάρουμε υπόψη την δυνατότητα κατάληψης πλεγματικών θέσεων από δύο άτομα και δείξαμε ότι μπορούμε να μεταβάλουμε με συνεχή τρόπο βασικές ιδιότητες αυτών των υλικών, όπως το πλάτος του χάσματος, η θέση του επιπέδου Φέρμι και η πυκνότητα καταστάσεων για τα ηλεκτρόνια με σπιν-πλειονότητας σε αυτό και συνεπώς να κατασκευάσουμε υλικά με προκαθορισμένες ιδιότητες. Τέλος, οι υπολογισμοί μας υποδεικνύουν ότι πιο κατάλληλα για εφαρμογές είναι τα υλικά πλούσια σε Cr και Si γιατί εκτός των πλεονεκτημάτων που αναφέραμε στην προηγούμενη δημοσίευση, το επίπεδο Φέρμι είναι ακριβώς στο κέντρο του χάσματος μειώνοντας τις πιθανές επιπτώσεις από την ύπαρξη ατελειών στο πλέγμα.

➤ Υπολογισμός σταθερών ανταλλαγής και Θερμοκρασίας Curie

30: E.Sasioglu, **I.Galanakis**, L.M. Sandratskii, and P. Bruno, *Stability of ferromagnetism in the half-metallic pnictides and similar compounds: A first-principles study*, Journal of Physics: Condensed Matter **17**, 3915 (2005)

Χρησιμοποιώντας υπολογισμούς ηλεκτρονικής δομής και την προσέγγιση «παγωμένων μαγνόνιων» υπολογίσαμε τις σταθερές ανταλλαγής για διάφορα δυϊκά ημιμεταλλικά κράματα και στην συνέχεια εκτιμήσαμε την θερμοκρασία Curie βασιζόμενοι τόσο στην προσέγγιση μέσου πεδίου όσο και στην προσέγγιση τυχαίας φάσης. Τα CrAs, MnSi και MnGe παρουσιάζουν ιδιαίτερα σταθερή σιδηρομαγνητική συμπεριφορά με θερμοκρασίες Curie κοντά στους 1000 K. Σε αντίθεση, τα CrSe και MnAs δείχνουν μία σαφή τάση για αντισιδηρομαγνητική διάταξη των μαγνητικών τους ροπών στην οποία χάνεται ο ημιμεταλλικός χαρακτήρας τους.

32: E.Sasioglu, L.M. Sandratskii, P. Bruno, and **I. Galanakis**, *Exchange interactions and temperature dependence of the magnetization in half--metallic Heusler alloys*, Physical Review B **72**, 184415 (2005)

Επεκτείνουμε την μελέτη μας και στα ημιμεταλλικά κράματα τύπου Heusler. Στα ημι-Heusler κράματα όπως το NiMnSb η κυρίαρχη αλληλεπίδραση που σταθεροποιεί την σιδηρομαγνητική συμπεριφορά είναι αυτή μεταξύ των ατόμων Mn. Στην περίπτωση των πλήρες κραμάτων Heusler όπως το Co_2MnGe η εικόνα είναι διαφορετική και κυριαρχούν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων Mn και των γειτονικών τους Co καθώς και μεταξύ των ατόμων Co σε μη-ισοδύναμες πλεγματικές θέσεις. Οι θερμοκρασίες Curie που υπολογίσαμε είναι σε καλή συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα και άρα οι μέθοδοι που χρησιμοποιούμε είναι εφαρμόσιμες σε καινούρια υλικά που δεν υπάρχουν πειραματικά αποτελέσματα. Μελετήσαμε την επίδραση της παραμέτρου του πλέγματος στις ιδιότητες που προαναφέραμε και τέλος

ερευνήσαμε την συμπεριφορά της μαγνήτισης με την θερμοκρασία και πως αυτή φθίνει πλησιάζοντας την θερμοκρασία Curie.

➤ Εμφάνιση ατελειών και αταξίας

35: I. Galanakis, K. Ozdogan, B. Aktas, and E. Sasioglu, *Effect of doping and disorder on the half-metallicity of full Heusler alloys*, Applied Physics Letters **89, 042502 (2006)**

Μελετήσαμε τις επιπτώσεις των ατελειών στα κράματα Co_2MnSi , Co_2MnGe και Co_2MnSn . Ο εμπλουτισμός των κραμάτων αυτών σε μικρή έκταση με άτομα Fe ή Cr στη θέση των ατόμων Mn διατηρεί την ημιμεταλλικότητα. Το ίδιο συμβαίνει και όταν θεωρήσουμε την περίπτωση της αταξίας μεταξύ του υποπλέγματος Mn και του υποπλέγματος του sp ατόμου. Συνεπώς για αυτά τα κράματα η ημιμεταλλικότητα μένει ανέπαφη από την ύπαρξη ατελειών.

37: K. Ozdogan, E. Sasioglu, B. Aktas, and I. Galanakis, *Doping and disorder in the Co_2MnAl and Co_2MnGa half-metallic Heusler alloys*, Physical Review B **74, 172412 (2006)**

Επεκτείναμε την μελέτη μας και στην περίπτωση των κραμάτων Co_2MnAl και Co_2MnGa . Ο εμπλουτισμός του Co_2MnAl σε μικρή έκταση με άτομα Fe ή Cr στη θέση των ατόμων Mn διατηρεί την ημιμεταλλικότητα ενώ στην περίπτωση του Co_2MnGa η ημιμεταλλικότητα δεν διατηρείται πλέον. Σε αντίθεση με τα υλικά στην προηγούμενη δημοσίευση, η αταξία μεταξύ του υποπλέγματος Mn και του υποπλέγματος του sp ατόμου οδηγεί σε απώλεια της ημιμεταλλικότητας.

45: K. Ozdogan, E. Sasioglu and I. Galanakis, *Vacancies induced minority-spin states in half-metallic Heusler alloys*, Physica Status Solidi – Rapid Research Letters **1, 184-186 (2007)**

Μελετήσαμε την επίπτωση της ύπαρξης ατελειών κενού στα πλήρη κράματα Heusler που περιέχουν Co: Co_2CrAl , Co_2CrSi , Co_2MnAl και Co_2MnSi . Όταν οι ατέλειες αυτές εμφανίζονται σε πλεγματικές θέσεις που καταλαμβάνουν τα άτομα Co η ημιμεταλλικότητα χάνεται. Αντίθετα όταν εμφανίζονται οι ατέλειες κενού σε θέσεις Cr(Mn) ή Al(Si) η ημιμεταλλικότητα διατηρείται. Άρα όταν δημιουργούμε λεπτά υμένια αυτών των υλικών πρέπει να εμποδίσουμε την δημιουργία ατελειών κενού για να διατηρήσουμε την ημιμεταλλικότητα των υμενίων.

59: I. Galanakis and E. Sasioglu, *Stability of ferromagnetism against doping in half-metallic alloys*, Journal of Applied Physics **109, 113912 (2011)**

Βασιζόμενοι στο μοντέλο των άκαμπτων ζωνών μελετήσαμε το φαινόμενο του εμπλουτισμού στα ημιμεταλλικά κράματα NiMnSb και CoMnSb και συγκρίναμε την συμπεριφορά των σταθερών ανταλλαγής με την περίπτωση των ημιμεταλλικών κραμάτων CrAs και CrSe σε δομή σφαλερίτη. Δείξαμε ότι και για τα τέσσερα αυτά κράματα η θεώρηση μόνο των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων Cr και Mn είναι αρκετή για να εξηγήσει την συμπεριφορά της Θερμοκρασίας Curie. Επιπλέον ο ανταγωνισμός μεταξύ της σιδηρομαγνητικής αλληλεπίδρασης τύπου RKKY και της αντισιδηρομαγνητικής αλληλεπίδρασης υπερανταλλαγής εξαρτάται από τις λεπτομέρειες της πυκνότητας καταστάσεων κοντά στο ενεργειακό χάσμα των ηλεκτρονίων με σπιν-μειονότητας και συνεπώς εξαρτάται από το υπό μελέτη κράμα.

65: K. Ozdogan and I. Galanakis, *Effect of order on the half-metallic gap in Heusler compounds*, Journal of Applied Physics (Communication) **110, 076101 (2011)**

Με την βοήθεια υπολογισμών από πρώτες αρχές μελετήσαμε την επίδραση της τάξης στην ημιμεταλλικότητα των κραμάτων Co_2MnAl και Co_2MnSi . Αντίθετα με την δημιουργία ατελειών Co, οποιοσδήποτε βαθμός αταξίας που προέρχεται από τα Mn-Al(Si) άτομα δεν επηρεάζει τον ημιμεταλλικό χαρακτήρα των κραμάτων και οι ολικές τους μαγνητικές ροπές εξακολουθούν να υπακούουν τον νόμο των Slater-Pauling. Στις δομές, όπου τα άτομα κοβαλτίου είναι πρώτοι γείτονες, εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στη ζώνη των ηλεκτρονίων με σπιν-πλειοψηφίας και στο επίπεδο Fermi διατηρείται μία υψηλή τιμή της πόλωσης κατά σπιν των ηλεκτρονίων. Τα αποτελέσματά μας συμφωνούν με υπάρχοντα πειραματικά αποτελέσματα [M Kogachi et al, J. Alloys Compds **475**, 273 (2009)].

➤ Ημιμεταλλικοί Σιδηριμαγνήτες

34: K. Ozdogan, I. Galanakis, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Search for half-metallic ferrimagnetism in V-based Heusler alloys Mn_2VZ ($Z=Al, Ga, In, Si, Ge, Sn$)*, Journal of Physics: Condensed Matter **18**, 2905 (2006)

Σε αυτή την δημοσίευση μελετήσαμε τα κράματα τύπου Mn_2VZ , όπου το Z είναι ένα από τα Al, Ga, In, Si, Ge και Sn. Στα κράματα αυτά οι μαγνητικές ροπές των ατόμων Mn είναι αντιπαράλληλες με αυτές των ατόμων V. Μία μικρή επέκταση της πλεγματικής σταθεράς μετακινεί το επίπεδο Φέρμι εντός του χάσματος οδηγώντας στην δημιουργία ημιμεταλλικών σιδηριμαγνητών που έχουν το πλεονέκτημα σε σχέση με τους αντίστοιχους σιδηρομαγνήτες να παρουσιάζουν μικρότερη ολική μαγνητική ροπή και συνεπώς να δημιουργούν μικρότερα εξωτερικά πεδία με αποτέλεσμα την μικρότερη απώλεια ενέργειας σε πραγματικές συσκευές. Η αταξία μικρής έκτασης ανάμεσα στα υποπλέγματα V και Z οδηγεί σε περιορισμένης έκτασης καταστάσεις εντός του ενεργειακού χάσματος διατηρώντας ένα υψηλό ποσοστό πόλωσης κατά σπιν στην ενέργεια Φέρμι.

40: K. Ozdogan, I. Galanakis, E. Sasioglu and B. Aktas, *Defects-induced ferrimagnetism in the half-metallic Co_2CrAl and Co_2CrSi compounds*, Physica Status Solidi – Rapid Research Letters **1**, 95-97 (2007)

42: K. Ozdogan, I. Galanakis, E. Sasioglu and B. Aktas, *Defects-driven appearance of half-metallic ferrimagnetism in Co-Mn--based Heusler alloys*, Solid State Communications **142**, 492(2007)

Στα δύο αυτά άρθρα μελετήσαμε έναν εναλλακτικό τρόπο για να οδηγηθούμε στην δημιουργία ημιμεταλλικών σιδηριμαγνητών βασιζόμενοι στην δημιουργία ατελειών στους ημιμεταλλικούς σιδηρομαγνήτες. Θεωρήσαμε τα κράματα Co_2CrAl και Co_2CrSi στην δημοσίευση 40 και τα κράματα Co_2MnAl και Co_2MnSi στην δημοσίευση 42, που είναι γνωστά ημιμεταλλικά σιδηρομαγνητικά υλικά. Στη συνέχεια δείξαμε ότι η δημιουργία ατελειών Cr ή Mn στις πλεγματικές θέσεις που αντιστοιχούν στα άτομα Co στον τέλειο κρύσταλλο οδηγεί σε σιδηριμαγνητισμό δεδομένου ότι οι ατέλειες έχουν μαγνητικές ροπές αντιπαράλληλες σε αυτές των ατόμων Co και των ατόμων Cr ή Mn στον τέλειο κρύσταλλο. Επιπλέον η μελέτη των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων έδειξε ότι το ενεργειακό χάσμα στην ηλεκτρονική ζώνη σπιν-μειονότητας διατηρείται και συνεπώς οι ατέλειες αυτές δεν καταστρέφουν την ημιμεταλλικότητα ενώ ταυτόχρονα επάγουν τον επιθυμητό για τις εφαρμογές σιδηριμαγνητικό χαρακτήρα.

Στην δημοσίευση 49 [I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Ferrimagnetism and antiferromagnetism in half-metallic Heusler alloys*, Physica Status Solidi (a) **205**, 1036 (2008)] επεκτείναμε την μελέτη και στην περίπτωση ατελειών με μέταλλα μετάβασης διαφορετικού χημικού χαρακτήρα από αυτά που περιέχει το τέλειο ημιμεταλλικό κράμα (π.χ. ατέλειες Cr στο Co_2MnSi) και δείξαμε ότι πάλι έχουμε την δημιουργία ημιμεταλλικών σιδηριμαγνητών.

➤ Ημιμεταλλικοί Αντισιδηρομαγνήτες

38: I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Doping of Mn_2VAl and Mn_2VSi Heusler alloys as a route to half-metallic antiferromagnetism*, Physical Review B **75**, 092407 (2007)

Για πραγματικές εφαρμογές η ιδανική περίπτωση θα ήταν οι λεγόμενοι ημιμεταλλικοί αντισιδηρομαγνήτες οι οποίοι ουσιαστικά είναι σιδηριμαγνήτες όπου όμως η ολική μαγνητική ροπή είναι μηδέν. Αυτά τα υλικά θα δημιουργούν μηδενικά εξωτερικά μαγνητικά πεδία οδηγώντας σε μηδενικές απώλειες σε εφαρμογές. Ξεκινώντας από τους σιδηριμαγνήτες Mn_2VAl και Mn_2VSi που μελετήσαμε στην δημοσίευση 35, δείξαμε ότι οι ατέλειες Co σε πλεγματικές θέσεις Mn έχουν μαγνητική ροπή παράλληλη των ατόμων V και αντιπαράλληλη των ατόμων Mn. Όταν το ποσοστό των ατελειών είναι τέτοιο ώστε να έχουμε κατά μέσο όρο 24 ηλεκτρόνια στην μοναδιαία κυψελίδα τότε η ολική μαγνητική ροπή μηδενίζεται και φθάνουμε στην επιθυμητή ημιμεταλλική αντισιδηρομαγνητική ιδιότητα. Αν εισάγουμε ατέλειες Fe αντί Co τότε ο μαγνητισμός χάνεται. Τα υλικά που μελετήσαμε είναι αρκετά πιθανόν να δημιουργηθούν πειραματικά δεδομένου ότι λεπτά υμένα τόσο του Mn_2VAl όσο και του Co_2VAl έχουν ήδη αναπτυχθεί με επιτυχία.

41: I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Ab-initio design of half-metallic fully-compensated ferrimagnets: The case of Cr_2MnZ ($Z= P, As, Sb, Bi$)*, Physical Review B **75**, 172405 (2007)

Μελετήσαμε τα κράματα Cr_2MnZ με $Z= P, As, Sb, Bi$ που αντιστοιχούν σε 24 ηλεκτρόνια σθένους ανά μοναδιαία κυψελίδα. Τα κράματα αυτά είναι μαγνητικά με τις μαγνητικές ροπές των ατόμων Cr να είναι αντιπαράλληλες στις ροπές των ατόμων Mn. Επιπλέον σε συμφωνία με τον νόμο Slater-Pauling τα κράματα αυτά παρουσιάζουν την μηδενική ολική μαγνητική ροπή που απαιτείται για την ημιμεταλλικότητα όπως επιβεβαιώνεται από την μελέτη των ηλεκτρονικών τους ιδιοτήτων. Το κράμα Cr_2MnSb παρουσιάζει θερμοκρασία Curie πάνω από την θερμοκρασία δωματίου και συνεπώς είναι πιο κατάλληλο για εφαρμογές.

54: K. Ozdogan and I. Galanakis, *First-principles electronic and magnetic properties of the half-metallic antiferromagnet Cr_2MnSb* , Journal of Magnetism and Magnetic Materials (Letter to the Editor) 321, L34 (2009)

Συνεχίσαμε την μελέτη του ημιμεταλλικού αντισιδηρομαγνήτη Cr_2MnSb . Πήραμε υπόψη μας όλους τους δυνατούς τύπους της $L2_1$ δομής (την $CuHg_2Ti$ και την $AlCu_2Mn$ δομή) όπου η βασική διαφορά τους είναι ότι τα άτομα Mn έχουν ανταλλάξει υπόπλεγμα με το ένα από τα δύο υποπλέγματα των ατόμων Cr. Βρήκαμε το φασικό διάγραμμα της μαγνήτισης και δείξαμε ότι παρουσιάζουν αντισιδηρομαγνητισμό για όλο το εύρος πλεγματικών σταθερών που μελετήθηκαν. Επιπλέον για ένα μεγάλο εύρος πλεγματικών σταθερών ο αντισιδηρομαγνητισμός συνδυάζεται και με την ημιμεταλλικότητα κάνοντας το υλικό αυτό κατάλληλο για χρησιμοποίηση σε μελλοντικές σπιντρονικές εφαρμογές.

63: I. Galanakis and E. Sasioglu, *High T_C half-metallic fully-compensated ferrimagnetic Heusler compounds*, Applied Physics Letters **99**, 052509 (2011)

Με τη βοήθεια εκτενών υπολογισμών από πρώτες αρχές προτείνουμε ότι το κράμα Heusler Cr_2CoGa πληρεί τις προϋποθέσεις που απαιτούνται για να επιτευχθεί ημιμεταλλική αντιδηρομαγνητική συμπεριφορά επειδή : (i) έχει πρόσφατα παρασκευασθεί σε μορφή λεπτών υμενίων [T. Graf et al., Z. Anorg. Allg. Chem. **635**, 976 (2009)], (ii) η ημιμεταλλική δομή XA είναι ενεργειακά προτιμητέα σε σχέση με την $L2_1$, που δεν παρουσιάζει ημιμεταλλικότητα, για ένα μεγάλο εύρος πλεγματικών σταθερών, (iii) παρουσιάζει μεγάλο σε εύρος ημιμεταλλικό ενεργειακό χάσμα και το επίπεδο Fermi βρίσκεται στο μέσο του με συνέπεια να παρουσιάζει υψηλό βαθμό πόλωσης κατά σπιν επίσης για μεγάλο εύρος πλεγματικών σταθερών, και τέλος (iv) η θερμοκρασία Curie είναι εξαιρετικά υψηλή με τιμή περί τους 1520 K.

71: S. Tirpanci, E. Sasioglu, and I. Galanakis, *Design of half-metallic Heusler-based superlattices with vanishing net magnetization*, Journal of Applied Physics **113**, 043912 (2013)

Προτείνουμε την δημιουργία υπερκρυστάλλων που αποτελούνται από πολυστρώματα κραμάτων Heusler με αντίθετες μαγνητικές ροπές κατά σπιν. Χρησιμοποιώντας ως παράδειγμα τα κράματα Mn_2TiGe (Mn_2VGa) και Co_2TiGe (Co_2VGa), που έχουν μαγνητικές ροπές -2 και $+2 \mu_B$ αντίστοιχα, δείχνουμε ότι οι υπερκρυστάλλοι που δημιουργούν διατηρούν την ημι-μεταλλικότητα των αρχικών κραμάτων ενώ ταυτόχρονα παρουσιάζουν μηδενική μαγνήτιση. Τέτοιου είδους υλικά μπορούν να βρουν ευρεία εφαρμογή στην σπιντρονική/μαγνητοηλεκτρονική.

Στην δημοσίευση 49 [I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Ferrimagnetism and antiferromagnetism in half-metallic Heusler alloys*, Physica Status Solidi (a) **205**, 1036 (2008)] επεκτείναμε την εργασία 41 και στην περίπτωση των Cr_2FeZ κραάτων με 24 ηλεκτρόνια τα οποία όμως διατηρούν την ημιμεταλλικότητα τους για ένα πολύ περιορισμένο εύρος πλεγματικών σταθερών.

➤ Ατέλειες και σιδηρομαγνητισμός στα δυϊκά κράματα

36: I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Defects in CrAs and related compounds as a route to half-metallic ferrimagnetism*, Physical Review B Rapid Communications **74**, 140408(R) (2006)

Δείξαμε ότι στα υλικά τύπου CrAs στην δομή σφαλερίτη, όταν δημιουργούμε ατέλειες Cr σε πλεγματικές θέσεις As, οι ατέλειες έχουν μαγνητική ροπή αντιπαράλληλη σε αυτή των ατόμων Cr στις πλεγματικές θέσεις του τέλειου κρυστάλλου. Επιπλέον η μελέτη των ηλεκτρονικών τους ιδιοτήτων έδειξε ότι

το χάσμα διατηρείται κατά την δημιουργία των ατελειών οδηγώντας στην ημιμεταλλική σιδηριμαγνητική ιδιότητα. Σε αντίθεση με τις ατέλειες Cr, οι ατέλειες As και οι ατομικές αντιμεταθέσεις καταστρέφουν την ημιμεταλλικότητα.

46: K. Ozdogan, I. Galanakis, B. Aktas and E. Sasioglu, *Role of the presence of transition-metal atoms at the antisites in CrAs, CrSe and VAs zinc-blende compounds*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320**, 197-203 (2008)

Συνεχίσαμε την προηγούμενη μελέτη θεωρώντας και την περίπτωση ατελειών μετάλλων μετάβασης διαφορετικού χημικού τύπου από αυτό που συμμετέχει στο τέλειο κρύσταλλο. Στην περίπτωση του CrAs και CrSe οι ατέλειες Mn σε θέσεις As διατηρούν την ημιμεταλλικότητα ενώ οδηγούν και σε σιδηριμαγνητική συμπεριφορά και οι ηλεκτρονικές τους ιδιότητες είναι παρόμοιες με αυτές των ατελειών Cr στα ίδια υλικά που μελετήθηκαν στην προηγούμενη δημοσίευση. Στην περίπτωση του VAs οι ατέλειες Cr και Mn αφήνουν ανέπαφο το χάσμα σε αντίθεση με τις ατέλειες V που επάγουν καταστάσεις εντός του χάσματος λόγω της μικρότερης αλληλεπίδρασης ανταλλαγής των τελευταίων.

52: I. Galanakis and S. G. Pouliasis, *Role of defects on the electronic and magnetic properties of CrAs, CrSe and CrSb zinc-blende compounds*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **321**, 1084 (2009)

Στην δημοσίευση αυτή παρουσιάζουμε μία εκτενή μελέτη όλων των δυνατών ατελειών και ατομικών αντιμεταθέσεων στα ημιμεταλλικά κράματα CrAs, CrSb και CrSe σε δομή σφαλερίτη. Παρότι τα τέλεια κράματα παρουσιάζουν ένα αρκετά μεγάλο ενεργειακό χάσμα το σύνολο σχεδόν των ατελειών, με εξαίρεση τις ατέλειες κενού σε θέσεις Cr και sp-ατόμου και τις ατέλειες Cr σε θέσεις sp-ατόμου, επάγουν καταστάσεις εντός του χάσματος. Το επίπεδο Φέρμι μπορεί να βρίσκεται καρφισωμένο εντός αυτών των καταστάσεων ανάλογα με την πλεγματική σταθερά και την ηλεκτροαρνητικότητα του sp-ατόμου και συνεπώς να οδηγήσει στην καταστροφή της ημιμεταλλικότητας. Παρότι οι καταστάσεις των ατελειών είναι εντοπισμένες στα άτομα της ατέλειας, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους μπορούν να οδηγήσουν σε πλατειές ενεργειακές ζώνες που να καταστρέψουν εντελώς το ενεργειακό χάσμα στην ηλεκτρονική ζώνη με σπιν-μειονότητα.

55: K. Ozdogan, E. Sasioglu and I. Galanakis, *Half-metallic ferrimagnetism in the $[Sc_{1-x}V_x]C$ and $[Sc_{1-x}V_x]Si$ alloys adopting the zinc-blende and wurtzite structures from first-principles*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **322**, 46 (2010)

Στην δημοσίευση αυτή παρουσιάζουμε μία εκτενή μελέτη των ιδιοτήτων των κραμάτων $[Sc_{1-x}V_x]C$ και $[Sc_{1-x}V_x]Si$. Τα τέλεια κράματα κρυσταλλώνουν στην δομή τύπου NaCl στην οποία είναι μη-μαγνητικά. Όταν όμως αναπτυχθούν σε δομές σφαλερίτη και βουρτζίτη σε μορφή λεπτών υμενίων παρουσιάζουν μαγνητικές ιδιότητες. Δείξαμε με υπολογισμούς από πρώτες αρχές ότι για ενδιάμεσες συγκεντρώσεις ατόμων V και Sc τα υλικά αυτά είναι σιδηριμαγνήτες με την μαγνητική ροπή να μεταβάλλεται ανάμεσα στο $-1 \mu_B$ και $+1 \mu_B$ σε συμφωνία με τον νόμο Slater-Pauling για αυτά τα υλικά και συνεπώς παρουσιάζουν και ημιμεταλλική συμπεριφορά. Για ίση συγκέντρωση V και Sc το υλικό με τον άνθρακα είναι ημιαγωγός ενώ αυτό που περιέχει πυρίτιο είναι ημιμεταλλικός αντισιδηρομαγνήτης. Η συμπεριφορά αυτή εξηγείται από τα διαγράμματα πυκνότητας ηλεκτρονικών καταστάσεων που υπολογίσαμε.

➤ Ατέλειες στις διεπιφάνειες με δυϊκούς ημιαγωγούς

57: I. Galanakis and I. Lekkas, *Effect of interfacial defects on the electronic and magnetic properties of epitaxial CrAs/InAs and CrAs/CdSe half-metallic multilayers*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **322**, 2471 (2010)

Επεκτείνουμε τη δημοσίευση 52 στην περίπτωση ατελειών στις διεπιφάνειες μεταξύ του ημιμεταλλικού σιδηρομαγνητικού κράματος CrAs και των δυϊκών ημιαγωγών InAs και CdSe σε δομή σφαλερίτη. Το σύνολο των δυνατών ατελειών δεν επηρεάζει την ημιμεταλλικότητα των τέλειων διεπιφανειών και τα υπό μελέτη πολυστρώματα CrAs/InAs και CrAs/CdSe παραμένουν τέλειοι ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες. Μόνη εξαίρεση αποτελεί η εμφάνιση ατελειών κενού σε θέσεις ατόμων Cr ή In(Cd) που οδηγεί σε μετατόπιση των ενεργειακών ζωνών σε υψηλότερες ενέργειες και το επίπεδο Φέρμι τέμνει τις καταστάσεις σπιν-μειονηφίας. Οι ατέλειες αυτές είναι τύπου Schottky με υψηλή ενέργεια σχηματισμού και μικρή συγκέντρωση και συνεπώς τα πολυστρώματα παραμένουν κατάλληλα για εφαρμογές.

➤ Μεταβάσεις Φάσεων

50: I. Galanakis, E. Sasioglu, and K. Ozdogan, *Magnetic phase transition in half-metallic CoMnSb and NiMnSb semi-Heusler alloys upon Cu doping: First-principles calculations*, Physical Review B **77**, 214417 (2008)

Μελετήσαμε την μετάβαση φάσης στα CoMnSb και NiMnSb όταν αντικαθιστούμε τα άτομα Co και Ni με άτομα Cu. Για μικρές συγκεντρώσεις Cu υπερισχύει η σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida. Για μεγαλύτερες συγκεντρώσεις Cu γίνεται σημαντική η αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής οδηγώντας σε μία μετάβαση φάσης από την σιδηρομαγνητική κατάσταση στην αντισιδηρομαγνητική. Το κρίσιμο σημείο για την αλλαγή φάσης εξαρτάται από την σχετική θέση του επιπέδου Φέρμι εντός τους χάσματος. Τα αποτελέσματα της εργασίας αυτής είναι σε εξαιρετική συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα για την αλλαγή φάσης σε υμένια αυτών των υλικών.

53: K. Ozdogan, I. Galanakis and E. Sasioglu, *Tuning the magnetic properties of half-metallic semi-Heusler alloys by sp-electron substitution: The case of AuMnSn_{1-x}Sb_x quaternary alloys*, Journal of Physics D: Applied Physics **42**, 085003 (2009)

Στην δημοσίευση αυτή επεκτείνουμε την προηγούμενη μελέτη στην περίπτωση των κραμάτων τύπου AuMnSn_{1-x}Sb_x. Το AuMnSn έχει τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων σθένους στην μοναδιαία κυψελίδα με το NiMnSb και το AuMnSb με το CuMnSb. Ο εμπλουτισμός του AuMnSn με Sb έχει ακριβώς το ίδιο αποτέλεσμα με τον εμπλουτισμό του NiMnSb με Cu οδηγώντας σε μία μετάβαση από την σιδηρομαγνητική στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση. Υπολογισμοί όπου πήραμε υπόψη τα φαινόμενα συσχέτισης ανάμεσα στα ηλεκτρόνια δεν άλλαξαν τα αποτελέσματα μας. Τα αποτελέσματα μας είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

67: I. Galanakis, K. Ozdogan and E. Sasioglu, *Half-metallic antiferromagnetism in CrSe (0 ≤ x ≤ 1): A first-principles study*, Physical Review B **86**, 134427 (2012)

Στην δημοσίευση αυτή μελετήσαμε την μετάβαση φάσης από το ημιμεταλλικό αντισιδηρομαγνητικό κράμα Cr₂Se στο επίσης ημιμεταλλικό αντισιδηρομαγνητή Cr₃Se. Η ημιμεταλλικότητα διατηρείται σε όλο το εύρος της μετάβασης και μία γενικευμένη μορφή του κανόνα Slater-Pauling ισχύει για την ολική μαγνητική ροπή του κράματος. Στην περίπτωση του Cr₃Se παρατηρήσαμε την λεγόμενη μεταμαγνητική συμπεριφορά δεδομένου ότι εντός της μοναδιαίας κυψελίδας συνυπάρχουν τόσο εντοπισμένες όσο και απεντοπισμένες μαγνητικές ροπές ατόμων Cr. Η αντισιδηρομαγνητική σύζευξη των μαγνητικών ροπών των γειτονικών ατόμων Cr σταθεροποιεί την σιδηρομαγνητική συμπεριφορά των κραμάτων Cr-Se και οδηγεί σε υψηλές τιμές της θερμοκρασίας Curie, κατάλληλες για εφαρμογές στην σπιντρονική.

➤ "Spin-gapless" ημιαγωγοί

69: S. Skaftouros, K. Ozdogan, E. Sasioglu and I. Galanakis, *Search for spin-gapless semiconductors: The case of inverse Heusler compounds*, Applied Physics Letters **102**, 022404 (2013)

Στην δημοσίευση αυτή ψάξαμε ανάμεσα στα "ανάστροφα" κράματα Heusler, και ανακαλύψαμε ότι έξι τέτοια κράματα ανήκουν στην κατηγορία των λεγόμενων "spin-gapless" ημιαγωγών. Η εμφάνιση της ιδιότητας αυτής δεν μπορεί να προβλεφτεί από κάποιον γενικό κανόνα και εξαρτάται από το ίδιο το υλικό. Τα υλικά που μελετήθηκαν επιδεικνύουν ενεργειακό χάσμα για τα ηλεκτρόνια με σπίν μειονότητας ενώ στην άλλη ηλεκτρονική ζώνη των σπιν-πλειονότητας οι ζώνες σθένους και αγωγιμότητας ακουμπούν η μία την άλλη και είναι υπεύθυνες για την δημιουργία φορέων 100% πολωμένων κατά σπιν. Επιπλέον τα υλικά αυτά έχουν υψηλές θερμοκρασίες Curie και είναι κατάλληλα για τεχνολογικές εφαρμογές.

➤ Υλικά που λειτουργούν ως σπιν-φίλτρα

74: I. Galanakis, K. Ozdogan, and E. Sasioglu, *A proposal for an alternative class of spin filter materials: Hybridization-induced high- T_C ferromagnetic semiconductors $CoVXAl$ ($X = Ti, Zr, Hf$)*, Applied Physics Letters **103**, 142404 (2013)

Στην δημοσίευση αυτή προτείνουμε μία εναλλακτική κατηγορία υλικών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως φίλτρα του σπιν (spin-filter materials, SFM) βασιζόμενοι στα κράματα Heusler $CoVXAl$, όπου το X είναι ένα από τα Ti, Hf ή Zr . Η ισχυρή υβριδοποίηση των p-d τροχιακών οδηγεί στην δημιουργία ενός σιδηρομαγνητικού ενεργειακού χάσματος και στις δύο σπιν-ηλεκτρονικές ζώνες με θερμοκρασία Curie πολύ μεγαλύτερη της θερμοκρασίας δωματίου και με αρκετά μεγάλη τιμή της ενέργειας διαχωρισμού ανταλλαγής (ΔE_{ex}). Επιπλέον και τα τρία κράματα είναι τόσο θερμοδυναμικά όσο και μαγνητικά σταθερά. Ο συνδυασμός των προαναφερόμενων χαρακτηριστικών καθιστά τα υλικά αυτά κατάλληλα για να βρουν εφαρμογές ως φίλτρα του σπιν σε σπιντρονικές συσκευές.

➤ Υπολογισμός των Hubbard παραμέτρων U και J

73: E. Sasioglu, I. Galanakis, C. Friedrich, and S. Blugel, *Ab-initio calculation of the effective on site Coulomb interaction parameters U and J for half-metallic magnets*, Physical Review B **88**, 134402 (2013)

Τα φαινόμενα συσχετισμού των ηλεκτρονίων παίζουν σημαντικό ρόλο στις ηλεκτρονικές ιδιότητες των ημι-μεταλλικών σιδηρομαγνητικών υλικών, δεδομένου ότι επάγουν καταστάσεις γύρω από το επίπεδο Φέρμι μειώνοντας έτσι την απόδοση των σπιντρονικών διατάξεων που βασίζονται σε αυτά. Χρησιμοποιώντας την "constrained Random Phase approximation (cRPA)" υπολογίσαμε την ισχύ των αλληλεπιδράσεων Coulomb μεταξύ εντοπισμένων στην ίδια πλεγματική θέση ηλεκτρονίων για μία πληθώρα ημι-μεταλλικών σιδηρομαγνητικών υλικών: α) τους sp σιδηρομαγνήτες στη δομή χλωριούχου νατρίου, β) τα 3d δυϊκά κράματα των μετάλλων μετάβασης στη δομή σφαλερίτη, και γ) τα ημιμεταλλικά σιδηρομαγνητικά και σιδηρομαγνητικά κράμα Heusler. Εν γένει για τα υλικά υπό μελέτη, το πλάτος των ζωνών των συσχετισμένων $d(p)$ ηλεκτρονίων είναι μικρότερο από ότι η Hubbard παράμετρος, U , και τα κράματα αυτά ανήκουν στην κατηγορία των ασθενώς συσχετισμένων υλικών.

➤ sp-ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες

62: A. Laref, E. Sasioglu and I. Galanakis, *Exchange interactions, spin waves, and Curie temperature in zincblende half-metallic sp-ferromagnets: The case of CaZ ($Z=N, P, As, Sb$)*, Journal of Physics: Condensed Matter **23**, 296001 (2011)

Χρησιμοποιώντας υπολογισμούς από πρώτες αρχές και την προσέγγιση των παγωμένων μαγνωνίων υπολογίσαμε τις σταθερές ανταλλαγής και τη διασπορά των κυμάτων σπιν στους ημιμεταλλικούς σιδηρομαγνήτες II-V (CaZ , $Z=N, P, As, Sb$) με δομή σφαλερίτη. Οι υπολογισμένες σταθερές ανταλλαγής χρησιμοποιήθηκαν στη συνέχεια για να εκτιμηθεί η τιμή της Θερμοκρασίας Curie εντός της προσέγγισης τυχαίας φάσης. Το μεγάλο χάσμα του Stoner σε αυτά τα υλικά οδηγεί στην δημιουργία καλά ορισμένων κυμάτων του σπιν σε όλη τη πρώτη ζώνη Brillouin. Η Θερμοκρασία Curie για το ημιμεταλλικό CaN είναι σημαντικά υψηλότερη από την θερμοκρασία δωματίου σε σχέση με τα υπόλοιπα υλικά και συνεπώς το CaN είναι πολλά υποσχόμενο υλικό για μελλοντικές σπιντρονικές συσκευές.

66: K. Ozdogan, E. Sasioglu and I. Galanakis, *Robustness and stability of half-metallic ferromagnetism in alkaline-earth metal mononitrides against doping and deformations*, Journal of Applied Physics **111**, 113918 (2012)

Στη δημοσίευση αυτή μελετήσαμε τις μαγνητικές ιδιότητες των κραμάτων CaN και SrN που κρυσταλλώνουν στην κυβική δομή τύπου $NaCl$. Οι υπολογισμοί μας υποδεικνύουν ότι τα υλικά αυτά είναι ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες με ολική μαγνητική ροπή $1 \mu_B$ ανά μοναδιαία κυψελίδα. Η Θερμοκρασία Curie είναι $480 K$ για το CaN και $415 K$ για το SrN υπερβαίνοντας την θερμοκρασία δωματίου. Εμπλουτισμός των κραμάτων αυτών με οπές ή ηλεκτρόνια επηρεάζει ελάχιστα τις ηλεκτρονικές και μαγνητικές τους ιδιότητες. Τέλος δείξαμε ότι ο ημιμεταλλικός χαρακτήρας αυτών των υλικών δεν

επιρεάζεται από τετραγωνικές παραμορφώσεις, όπως αυτές που συνήθως λαμβάνουν χώρα όταν αυτά τα υλικά αναπτύσσονται σε μορφή λεπτών υμενίων. Συνεπώς τα κράματα αυτά είναι πολλά υποσχόμενο υλικό για μελλοντικές σπιντρονικές συσκευές.

C3: K. Ozdogan and **I. Galanakis**, *First-principles computed electronic and magnetic properties of zincblende alkaline-earth pnictides*, Journal of Advanced Physics **1**, 69 (2012)

Επεκτείνουμε την προηγούμενη εργασία στο σύνολο των δυϊκών κραμάτων XY με X= Mg, Ca, Sr και Y= N, P, As, Sb που κρυσταλλώνουν στην κυβική δομή σφαλερίτη. Τα κράματα που περιέχουν Ca ή Sr παρουσιάζουν στο σύνολο τους ημιμεταλλική σιδηρομαγνητική συμπεριφορά. Ανάμεσα στα κράματα με βάση το Mg, μόνο στην περίπτωση του MgN ευνοείται η εμφάνιση μαγνητικής τάξης ενώ τα υπόλοιπα κράματα είναι μη-μαγνητικά λόγω της ασθενούς p-d υβριδοποίησης. Μελετήσαμε την επίδραση στις ηλεκτρονικές και μαγνητικές ιδιότητες των υλικών αυτών διάφορων τύπων παραμορφώσεων (υδροστατική πίεση – τετραγωνοποίηση του πλέγματος). Σε όλες τις περιπτώσεις η παραμόρφωση άφησε αναλλοίωτα τα βασικά ηλεκτρονικά και μαγνητικά χαρακτηριστικά αυτών των υλικών.

➤ Υλικά με ιδιαίτερο τεχνολογικό ενδιαφέρον

51: **I. Galanakis**, **K. Ozdogan**, and **E. Sasioglu**, *Ab-initio electronic and magnetic properties of half-metallic NiCrSi and NiMnSi Heusler alloys: The role of defects and interfaces*, Journal of Applied Physics **104**, 083916 (2008)

Στην δημοσίευση αυτή μελετήσαμε δύο καινούρια κράματα Heusler: τα NiCrSi και NiMnSi. Δείξαμε ότι και τα δύο παρουσιάζουν ημιμεταλλική συμπεριφορά με μεγάλους εύρους χάσμα στην ζώνη σπιν-μειονότητας. Η ημιμεταλλικότητα παραμένει ακόμα και αν συμπιέσουμε ή επεκτείνουμε την πλεγματική σταθερά στην κατεύθυνση ανάπτυξης λεπτών υμενίων κατά 5%. Ο σιδηρομαγνητισμός επιδεικνύει ιδιαίτερη σταθερότητα για αυτά τα υλικά και η θερμοκρασία Curie ξεπερνά τους 1000 K. Οι ενδοεπιφάνειες με τους δυϊκούς ημιαγωγούς δεν είναι ημιμεταλλικές αλλά σε πολλές περιπτώσεις η πόλωση κατά σπιν των ηλεκτρονίων στο επίπεδο Φέρμι ξεπερνά το 90% κάνοντας τα κατάλληλα για εφαρμογές μαγνητοηλεκτρονικής. Τέλος μελετήσαμε τις ατέλειες σε αυτά τα υλικά και δείξαμε ότι όταν αυτές αφορούν τα άτομα Cr(Mn) και Si η ημιμεταλλικότητα διατηρείται σε αντίθεση με τις ατέλειες που εμπλέκουν άτομα Ni. Αυτή η συμπεριφορά εξηγήθηκε χρησιμοποιώντας επιχειρήματα βασισμένα στην συμμετρία του κρυστάλλου.