

телей заряда. В настоящей работе изучено влияние замещения железа кремнием на кислородную нестехиометрию и транспортные свойства феррита стронция.

Синтез сложных оксидов $\text{SrFe}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($x=0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.3$) выполнен твердофазным методом. Согласно данным рентгеновской дифракции, образцы с $x < 0.3$ являются однофазными и имеют структуру кубического перовскита (пр. гр. $Pm\bar{3}m$), в то время как в оксиде состава $\text{SrFe}_{0.7}\text{Si}_{0.3}\text{O}_{3-\delta}$ наблюдается примесь силиката стронция. Измерения содержания кислорода и электропроводности оксидов выполнены при 800–950 °С в интервале парциальных давлений кислорода от 10^{-19} до 0.5 атм. Анализ экспериментальных результатов позволил разделить парциальные вклады ионов кислорода, электронов и дырок в проводимость, определить соответствующие энергии активации, рассчитать концентрации и подвижности носителей заряда. Установлено, что ионная проводимость уменьшается с повышением содержания кремния при неизменной энергии активации, величина которой (~ 0.7 эВ) характерна для ионного транспорта в перовскитах. Такое поведение может быть обусловлено уменьшением концентрации подвижных вакансий кислорода вследствие их блокирования кремнием. Показано, что электронная проводимость, в отличие от ионной, слабо зависит от содержания кремния. Низкие значения подвижности электронных дырок ($\sim 0.05 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$) и ее слабая активационная зависимость (~ 0.02 эВ) указывают на поляронный механизм переноса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 13-03-00931)

ВЛИЯНИЕ ВНУТРИАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНУЮ ПРОВОДИМОСТЬ Co/Pt(111)

Медведева Д.С.^{*}, Искаков С.Н.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: medvedeva.ds@gmail.com

INFLUENCE OF INTERATOMIC INTERACTION ON DIFFERENTIAL CONDUCTANCE OF Co/Pt(111)

Medvedeva D.S.^{*}, Iskakov S.N.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

We calculated indirect excitations that contribute to the differential conductance of the Co adatom on the Pt(111) surface. The Anderson impurity model was used with an additional tip orbital. Obtained results have good agreement with experimental data.

Описание вклада каждой орбитали в дифференциальную проводимость становится более полным и достаточным для описания экспериментальных данных при учете орбитальной поляризации. На основе эксперимента [1], в котором определялась намагниченность одиночного атома кобальта на немагнитной металлической подложке, был произведен расчет дифференциальной проводимости. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В данной работе была рассмотрена система Pt подложка – атом Co – щуп с одной внешней орбиталью. Наибольший вклад в общую проводимость осуществляется из перехода щуп-примесь-подложка, так как основная гибридизация между примесным атомом и щупом происходит вдоль оси z . Для более точного описания системы были рассмотрены прямые и не прямые возбуждения. Была произведена оценка изменения свойств системы в зависимости от относительного положения элементов системы. Прямые возбуждения были хорошо изучены в работе [2], не прямые возбуждения, совершающиеся с разных орбиталей примеси, возможны, благодаря внутриатомному взаимодействию, влияние которого на не прямые процессы было рассмотрено в данной работе.

Результаты моделирования показали, что гибридизация с орбиталью щупа влияет на положение (сдвиг) пика относительно уровня Ферми и на его амплитуду. Вклад не прямой проводимости определен из взаимодействия щупа и примесной орбитали. Интенсивность данного вклада определяется гибридизацией с орбиталями подложки. Чтобы изучить роль кулоновского межорбитального и обменного взаимодействий, были проведены расчёты с различными значениями внутриузельного кулоновского и межорбитального обменного взаимодействий. Было показано, что величина J_n главным образом определяет интенсивность общей проводимости, которая почти исчезает в случае слабой гибридизации, а кулоновское взаимодействие влияет на ширину зоны между минимумами. Для орбиталей $xz(yz)$, обладающих сильной гибридизацией с подложкой, вышеописанное влияние усиливается.

1. Focko Meier, Lihui Zhou, Jens Wiebe, Roland Wiesendanger, Science, 320, 82,(2008).
2. V.V. Mazurenko, S.N. Isakov, M.V. Valentyuk, A.N. Rudenko and A.I. Lichtenshtein, Phys. Rev. B, 84, 193407, (2011).