

УДК 538.955

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ Fe/Pt/Fe С УЧЕТОМ РЕЛАКСАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ

© 2023 г. М. Ю. Макеев¹, *, М. В. Мамонова¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Омский государственный университет имени Ф.М. Достоевского”, Омск, Россия

*E-mail: mihamaki603@gmail.com

Поступила в редакцию 22.05.2023 г.

После доработки 19.06.2023 г.

Принята к публикации 28.07.2023 г.

Численно изучено влияние поверхностной релаксации, а именно равновесного изменения межплоскостного расстояния, на значения магнитных и энергетических характеристик системы Fe/Pt/Fe. Исследован вклад спин-орбитального взаимодействия на величину энергии магнитной анизотропии в зависимости от толщины ферромагнитной пленки.

DOI: 10.31857/S0367676523702757, EDN: FPNWLH

ВВЕДЕНИЕ

Теория функционала спиновой плотности (SDFT) — это достаточно точный подход к статической электронной проблеме многих тел для равновесного электронного газа, который широко используется в огромном количестве исследований для описания различных свойств основного состояния, как магнитных, так и немагнитных твердых тел.

Одним из свойств, рассматриваемых в данной работе, является магнитокристаллическая анизотропия, т.е. стремление системы ориентировать свою намагниченность преимущественно в одном направлении по отношению к кристаллической решетке.

Такое свойство является одним из важнейших свойств магнитных материалов, а также привлекательно для технологического применения в приборостроении и информационных технологиях, а также в области спинтроники. Однако магнитокристаллическая анизотропия представляет интерес и для фундаментальной физики.

Ab initio расчеты энергии магнитной анизотропии $E_{\text{МА}}$ представляют особую сложность. Во-первых, существуют большие технические трудности, так как получение $E_{\text{МА}}$ означает, что нужно с большой точностью вычислить разность значений полной энергии для разных ориентаций намагниченности. Во-вторых, на расчетное значение $E_{\text{МА}}$ могут влиять факторы, которые трудно контролировать, в том числе многочастичные эффекты, выходящие за рамки приближения локальной плотности (LDA) [1–3].

Последовательно чередующиеся проводящие слои ферромагнитных и немагнитных материалов многослойной структуры Fe/Pt/Fe позволяют добиться эффектов гигантского магнитосопротивления. Магнитные свойства ферромагнитных пленок Fe и поведение обменно-связанных структур на их основе интенсивно исследуются.

Исследование релаксации показывает, что наличие неоднородной картины межатомных расстояний вызывает заметное изменение величины $E_{\text{МА}}$ и также, может являться причиной переориентации намагниченности в атомах. Работы других авторов подтверждают данное суждение. В работе [3] исследовалась роль релаксации на $E_{\text{МА}}$ для кластеров с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой переходных металлов. В [4] изучали влияние релаксации на $E_{\text{МА}}$ для проволоки Co на краю ступеньки Pt(111). В обеих работах наблюдается улучшение количественного описания $E_{\text{МА}}$ при учете поверхностной релаксации.

Исследование пленки Fe на поверхности различных немагнитных металлов, в том числе и Pt вызывает большой интерес и у экспериментаторов, ведь чтобы исследовать основные структурные свойства и их связь с магнитными свойствами, полезно использовать эпитаксиальную пленку, поскольку кристаллографическая ориентация может контролироваться ориентацией подложки. Так в работах [4–8] на монокристаллических подложках были приготовлены эпитаксиальные пленки FePt. Исследование показало, что и толщина пленки, и выбор материала подложки, и ориентация поверхностной грани может оказывать влияние на преобладающий тип $E_{\text{МА}}$. В

работе [9] изучали пленку Fe на Au, в зависимости от толщины пленки, для грани (100), с помощью формализма Кона–Корринги–Ростокера (ККР). Так, например, для толщин пленок в монослой и два атомных слоя преобладает перпендикулярная анизотропия, при больших толщинах анизотропия становится плоскостной. Так же, на тип преобладающей анизотропии оказывает влияние и подложка, на которой располагается пленка. Исследования в работе [10] показали, что для пленки Fe на W(110) всегда преобладает плоскостная анизотропия, в то время как на Cr(110) для малых толщин пленки наблюдается анизотропия типа “легкая” ось, а свыше трех монослоев, преобладает плоскостная анизотропия. Расчеты, основанные на подходе функции Грина, полностью релятивистского метода ККР с приближением локальной плотности и идеализированной геометрии, воспроизводящей объемную структуру подложки, для монослоя Fe на поверхности Pt(111) показали преобладание плоскостной анизотропии [11].

В работе [1] для грани (100), с помощью теоретического подхода *ab-initio* изучалось влияние поверхностной релаксации на значение энергии магнитной анизотропии. Результаты показали, что поверхностная релаксация может оказать влияние не только на значение $E_{\text{МА}}$, но и на преобладающий тип анизотропии. Так, для системы Fe/Pt в случае без релаксации наблюдается плоскостная анизотропия, в тоже время, при учете релаксации преобладает перпендикулярная анизотропия.

Мы сосредоточились на исследовании влияния поверхностной релаксации на значение энергетической и магнитной составляющей с помощью формализма SDFT и расчета самосогласованной зонной структуры. Под поверхностной релаксацией, мы имеем ввиду изменение межплоскостного расстояния атомов. Форма и объем ячейки остаются неизменными.

Также было исследовано влияние толщины ферромагнитной пленки на значение энергии магнитной анизотропии. Изучен вклад спин-орбитального взаимодействия в значение энергии магнитной анизотропии. Были изучены все поверхностные грани с низким значением индекса Миллера.

В нашей работе уже исследовались эффекты анизотропии без учета релаксации [12]. Была показана зависимость $E_{\text{МА}}$ от толщины подложки и пленки. Также, был рассчитан параметр анизотропии, для дальнейшего применения в расчетах методом Монте-Карло [13]. В данной работе стояла задача углубиться в исследование эффектов анизотропии для трехслойной системы Fe/Pt/Fe, а также изучить воздействие поверхностной релаксации на эти эффекты.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Ab initio расчеты проводились с использованием теории функционала спиновой плотности, реализованной с помощью пакета VASP [14] с применением метода проекционных присоединенных волн (PAW) с Пердью–Берка–Эрнзерхофа (PBE) версией обобщенного градиентного приближения (GGA). Величина параметров сходимости выбиралась нами на основе наших исследований, представленных в работе [15].

Работа сфокусирована на исследовании влияния релаксации на значение энергии магнитной анизотропии $E_{\text{МА}}$ и значение магнитных моментов атомов при изменении толщины ферромагнитной пленки Fe, с фиксированной толщиной подложки Pt. Влияние толщины подложки на значение $E_{\text{МА}}$ уже изучалось нами в работе [12]. В данной работе, акцент делался на изменении толщины пленки от 1 монослоя до 7 атомных слоев, в то время как толщина подложки была фиксированной и составляла 3 атомных слоя. Были исследованы все поверхностные грани с низкими индексами Миллера. Для сохранения инверсионной симметрии ферромагнитная пленка располагалась с двух сторон. Величина постоянной решетки была получена нами ранее в результате расчетов с проведением полной оптимизации кристаллической структуры и составила 3.87125(3) Å [15].

Энергия магнитной анизотропии рассчитывалась как разность двух значений полной энергии системы с направлениями магнитных моментов перпендикулярно и параллельно плоскости $\Delta E_{\text{МА}} = E_{\perp} - E_{\parallel}$. При значении $\Delta E_{\text{МА}} > 0$ преобладает ориентация магнитных моментов параллельно плоскости, что соответствует плоскостной анизотропии. При $\Delta E_{\text{МА}} < 0$ энергетически более выгодна ориентация магнитных моментов перпендикулярно плоскости, что соответствует анизотропии типа “легкая” ось.

Для пленки Fe использовалась ГЦК структура подложки Pt. Использование в наших расчетах при задании суперъячейки одного атома в слое не позволяет отследить реконструкционный переход пленки Fe из структуры ГЦК в объемно-центрированную кубическую структуру (ОЦК) при больших толщинах пленки. Безусловно, при изучении $E_{\text{МА}}$ необходимо учитывать структурные аспекты. Необходимы расчеты, предполагающие одновременное, неограниченное изменение геометрии кристаллической структуры. Чтобы провести подобные расчеты, необходимо использовать несколько атомов в слое, однако использование даже одного атома в слое в случае неколлинеарных магнитных расчетов предполагает огромные вычислительные затраты. Например, уже для монослойной пленки, вычисления с учетом спин-орбитального взаимодействия, требуют 2.5 Гб памяти, приходящейся на ядро и 34 ч расчетов [15].

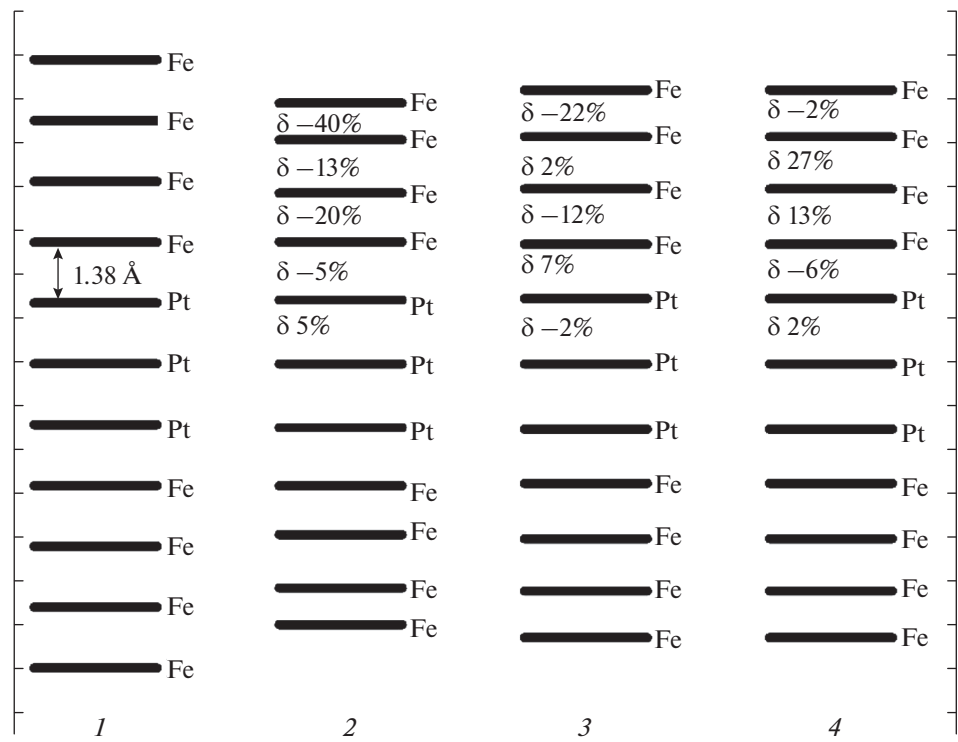


Рис. 1. Влияние поверхностной релаксации на положение атомных плоскостей в системе Fe/Pt/Fe; δ — параметр релаксации. Начальное положение атомов (1); релаксация немагнитной системы (2); релаксация магнитной системы с направлением вектора намагниченности в плоскости (3); релаксация магнитной системы с направлением вектора намагниченности перпендикулярно плоскости (4).

Учет релаксации проводился следующим образом. Сначала проводилась поверхностная релаксация немагнитной системы. То есть происходило изменение только позиций атомов. Размер и форма ячейки оставались неизменными. Затем, используя полученную отрелаксированную, немагнитную систему, было рассмотрено два случая. В первом случае проводились расчеты магнитной системы без учета релаксации с сохранением объема, формы ячейки и координат атомов. Во втором случае произведены расчеты магнитной системы с учетом поверхностной релаксации, то есть учитывалось изменение положений атомов.

На рис. 1 представлены расчеты влияния поверхностной релаксации на положение атомов в

системе. Вычислен параметр поверхностной релаксации δ представляющий собой относительное изменение межплоскостного расстояния в процентах. Видно, что межплоскостное расстояние после релаксации между атомами Fe меньше, чем между атомами Pt. Наибольшее сжатие произошло у атома, находящегося на поверхности. Направление магнитного момента оказывает существенное влияние на параметр релаксации, меняя не только значение, но и характер смещения.

Результаты расчетов значения полной энергии, приходящейся на атом, в зависимости от толщины ферромагнитной пленки железа представлены в табл. 1. Мы видим, что релаксация оказывает незначительное влияние на значение приведенной

Таблица 1. Рассчитанные значения энергии, приходящейся на атом, с учетом релаксации и без, для граней (100), (110), (111)

	(100)		(110)		(111)	
	E , мэВ/ат.	E , мэВ/ат. С релакс.	E , мэВ/ат.	E , мэВ/ат. С релакс.	E , мэВ/ат.	E , мэВ/ат. С релакс.
Fe ₁	–6.782	–6.817	–6.804	–6.830	–6.833	–6.860
Fe ₂	–7.163	–7.207	–7.025	–7.060	–7.208	–7.218
Fe ₃	–7.344	–7.446	–7.275	–7.329	–7.270	–7.405
Fe ₄	–7.498	–7.586	–7.388	–7.446	–7.495	–7.520
Fe ₅	–7.611	–7.685	–7.462	–7.685	–7.584	–7.599

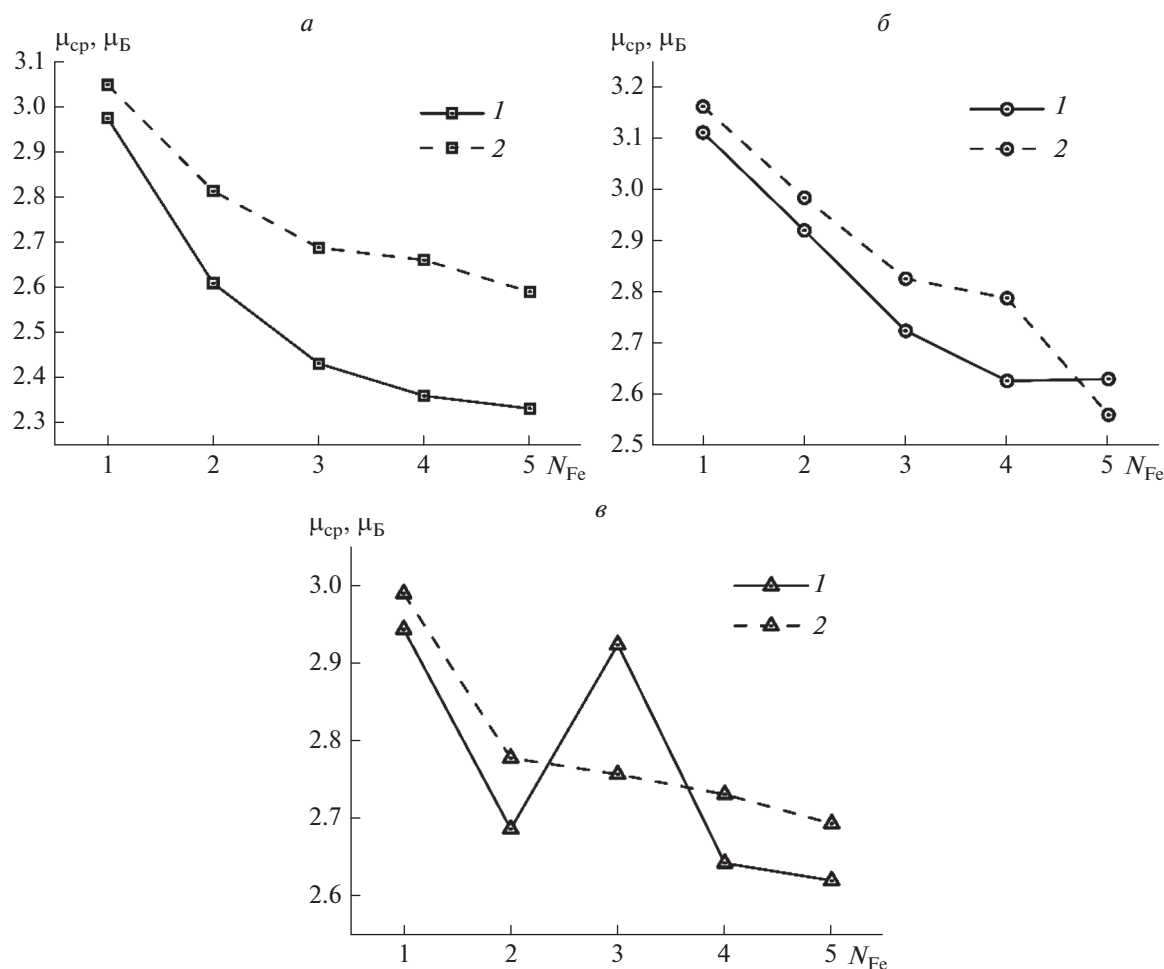


Рис. 2. Значение усредненного магнитного момента в зависимости от толщины пленки железа, для граней (100) (*a*), (110) (*б*), (111) (*в*); без релаксации (1), с релаксацией (2).

энергии. Минимальный вклад наблюдается для монослойной пленки. С увеличением толщины ферромагнитной пленки наблюдается увеличение влияния релаксации на приведенную энергию и уменьшение энергии, приходящей на атом.

На рис. 2*a*–2*в* представлено влияние релаксации на среднее значение намагниченности, с увеличением толщины пленки. Мы видим, что с увеличением толщины пленки, среднее значение намагниченности уменьшается. Также, для всех граней учет релаксации приводит к увеличению значений магнитного момента, кроме двух случаев: для грани (111) при толщине пленки 3 слоя и для грани (110) при толщине пленки в 5 моноатомных слоев. Именно для этих систем наблюдается смена типа анизотропии, под влиянием релаксации, которую можно наблюдать на рис. 3*a*–3*в*. На рисунке 3*в*, при толщине пленки в 3 моноатомных слоя наблюдается смена типа анизотропии. При расчетах без релаксации преобладает плоскостная анизотропия, в то время как, при учете релаксации

мы можем наблюдать анизотропию типа “легкая” ось. Подобный, хоть и менее амплитудный переход можно наблюдать для грани (100), при толщине пленки 5 слоев на рис. 3*a*. В этом случае, наоборот, при учете релаксации появилось преобладание плоскостной анизотропии.

Для грани (111) рис. 3*в*, с увеличением толщины пленки, независимо от влияния релаксации, прослеживается переход к преобладанию перпендикулярной анизотропии. Для граней (100), рис. 3*a*, с увеличением толщины пленки характерно осциллирующее поведение. Каждый новый слой пленки меняет тип анизотропии с перпендикулярной на плоскостную и обратно. Для грани (110), рис. 3*б*, такие сильные осцилляции, как для грани (100), не наблюдаются, однако при изменении толщин пленки от 1 до 2 и от 3 до 4 моноатомных слоя, происходит смена типа анизотропии.

Результаты наших расчетов коррелируют с расчетами одиночного монослоя Fe других авторов методом Корринги–Кона–Ростокера. В [16]

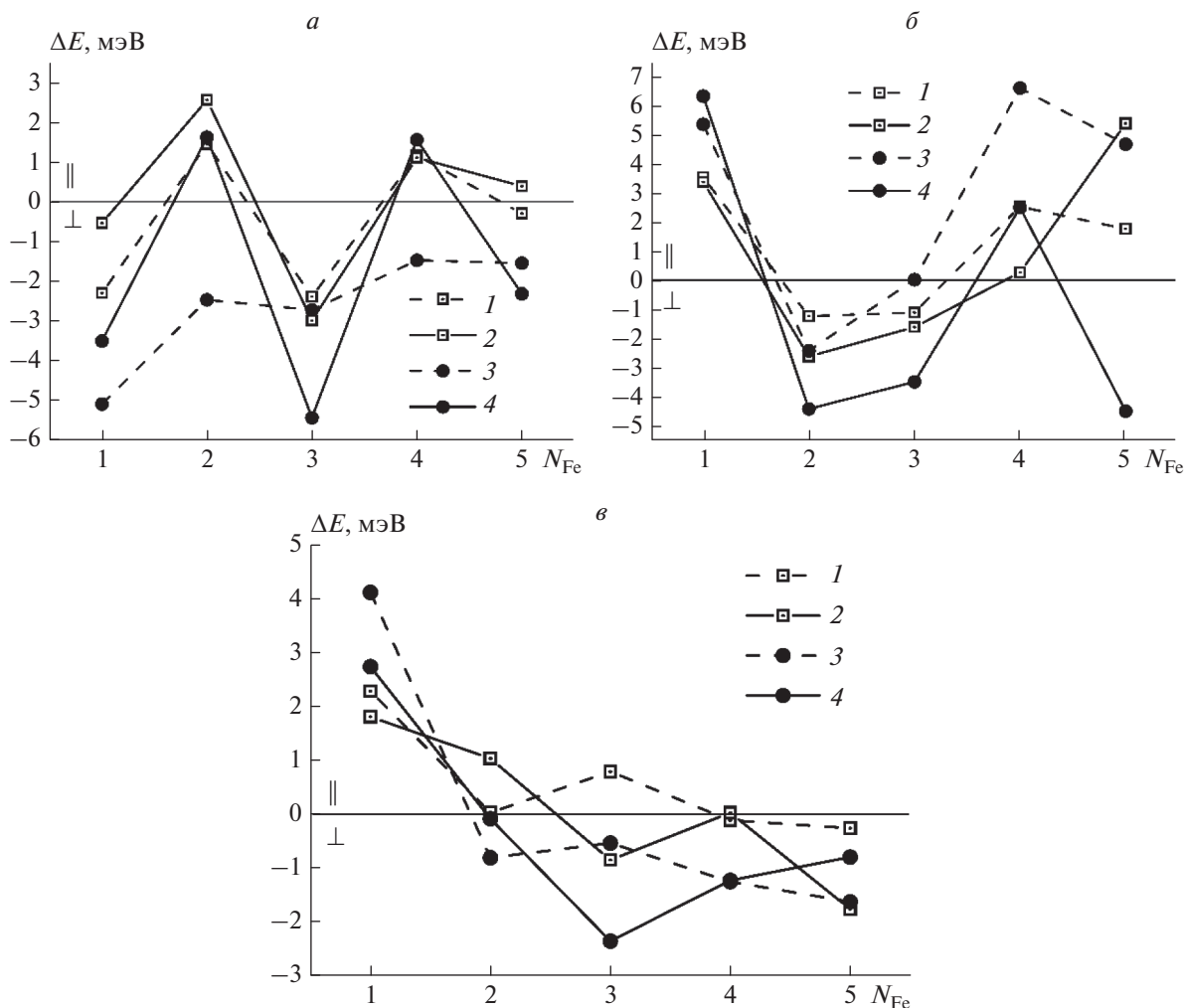


Рис. 3. Значение энергии магнитной анизотропии и ее спин-орбитальной составляющей гетероструктуры Fe/Pt/Fe при изменении толщины пленки железа. Для граней (100) (а), (110) (б), (111) (в); ΔE_{MA} без релаксации (1), ΔE_{MA} с релаксацией (2), ΔE_{SOC} без релаксации (3), ΔE_{SOC} с релаксацией (4).

для грани Pt(100) получена перпендикулярная магнитная анизотропия. В статье [11] расчеты на грани Pt(111) демонстрируют преимущество магнитной анизотропии в плоскости, со значением $E_{\text{MA}} = 0.71$ мЭВ. Наши расчеты без релаксации дают $E_{\text{MA}} = 2.2$ мЭВ, учет релаксации приводит к уменьшению до $E_{\text{MA}} = 1.8$ мЭВ.

Исследование релаксации показывает, что наличие неоднородной картины межатомных расстояний вызывает заметное изменение величины E_{MA} и также, может являться причиной переориентации намагниченности в атомах. Работы других авторов для других систем подтверждают данное суждение. В работе [17] исследовалась роль релаксации на E_{MA} для кластеров ГЦК переходных металлов. В [18] изучали влияние релаксации на E_{MA} для проволоки Со на краю ступеньки Pt(111). В обеих работах наблюдается улучшение

количественного описания E_{MA} при учете поверхностной релаксации.

При подсчете энергии магнитной анизотропии, важно оценить, что именно вносит наибольший вклад в ее значение. Разобраться, откуда она берется. Для ответа на этот вопрос, мы оценили вклад спин-орбитальной составляющей на величину магнитной анизотропии. Включение спин-орбитальной связи (SOC) в DFT приводит к появлению дополнительного вклада $H_{\text{SOC}}^{\alpha\beta} \propto \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ к гамильтониану, который связывает оператор спина Паули $\vec{\sigma}$ с оператором углового момента $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. В качестве релятивистской поправки SOC действует преимущественно в непосредственной близости от ядер, так что предполагается, что вклады H_{SOC} за пределами PAW сферы незначительны. Таким образом, VASP вычисляет

Таблица 2. Значения орбитального магнитного момента $\mu_{\text{орб}}$, $\mu_{\text{Б}}$ и спинового магнитного момента μ , $\mu_{\text{Б}}$, для каждого атома пленки в зависимости от толщины пленки

Атом	$N_{\text{Fe}} = 1, \mu_{\text{орб}}$	$N_{\text{Fe}} = 2, \mu$	$N_{\text{Fe}} = 2, \mu_{\text{орб}}$	$N_{\text{Fe}} = 2, \mu$	$N_{\text{Fe}} = 3, \mu_{\text{орб}}$	$N_{\text{Fe}} = 3, \mu$
Fe ₁	0.078	2.943	0.054	2.777	0.097	2.851
Fe ₂			0.072	2.779	0.083	2.587
Fe ₃					0.087	2.833

Таблица 3. Результаты расчетов E_{SOC} , мЭВ для толщин магнитной пленки Fe в 5–3 монослоев и толщиной про- слойки 3 монослоя грань (111)

E_{SOC} , мЭВ						
Атом	$N_{\text{Fe}} = 5$	$N_{\text{Fe}} = 5$ С релакс.	$N_{\text{Fe}} = 4$	$N_{\text{Fe}} = 4$ С релакс.	$N_{\text{Fe}} = 3$	$N_{\text{Fe}} = 3$ С релакс.
Pt ₁	–749.6	–747.9	–751.1	–747.4	–751.9	–747.8
Pt ₂	–752.8	–751.1	–754.1	–750.4	–764.4	–750.5
Pt ₃	–749.6	–747.9	–751.1	–747.4	–751.9	–747.8
Fe ₁	–9.0	–9.2	–9.1	–9.2	–10.5	–9.1
Fe ₂	–11.9	–12.2	–12.1	–12.3	–12.5	–11.7
Fe ₃	–12.3	–12.1	–11.4	–11.6	–12.7	–12.9
Fe ₄	–11.4	–11.6	–12.4	–12.7		
Fe ₅	–12.5	–12.6				

матричные элементы H_{SOC} только для одноцен- тровых вкладов всех электронов.

$$E_{\text{SOC}}^{ij} = \delta_{R_i R_j} \delta_{l_i l_j} \sum_{n,k} w_k f_{nk} \times \times \sum_{\alpha, \beta} \langle \widetilde{\Psi}_{nk}^{\alpha} | \widetilde{\rho}_i \rangle \langle \phi_i | H_{\text{SOC}}^{\alpha\beta} | \phi_j \rangle \langle \widetilde{\rho}_j | \widetilde{\Psi}_{nk}^{\beta} \rangle. \quad (1)$$

Кристаллическая решетка оказывает влияние на орбитали, которые, в свою очередь, связаны со спинами в локализованном случае через спин- орбитальное взаимодействие. Для зонных мате- риалов спин-орбитальное взаимодействие инду- цирует орбитальный момент, который связывает полный магнитный момент с осями кристалла. Вычисленные значения орбитального и спиново- го магнитных моментов для каждого атома Fe в зависимости от толщины пленки приведены в табл. 2.

На основе этого вычисляется полная энергия, зависящая от ориентации намагниченности, ока- зывающей вклад в анизотропию. Поэтому спин- орбитальное взаимодействие является основным источником магнитокристаллической анизотро- пии. При отсутствии спин-орбитального взаимо- действия направления спинов не имеют связи с кристаллической структурой, это значит, что си- стема является инвариантной, относительно об- щего вращения всех спинов. Поэтому во всех на- ших расчетах, приведенных в данной работе, учитывалось спин-орбитальное взаимодействие.

На рис. 3а и 3б наряду с энергией магнитной анизотропии представлены значения ее спин-ор- битальной составляющей для всех исследуемых граней. Анализируя поведение спин-орбиталь- ного взаимодействия, можно сделать вывод, что наибольший вклад в осциллирующее поведение $E_{\text{МА}}$ вносит именно энергия спин-орбитального взаимодействия.

Атомы Pt играют важную роль в магнитной анизотропии пленки Fe. Гибридизация с орби- талями Fe вызывает спиновую поляризацию на атоме Pt и, как следствие, усиливает $E_{\text{МА}}$ из-за большой спин-орбитальной связи в атоме Pt. Это наглядно видно по рассчитанным значени- ям E_{SOC} для отдельных атомов приведенных в табл. 3 в зависимости от толщины магнитной пленки для грани (111), и в табл. 4 уже в зависи- мости от ориентации грани для толщины пленки в 5 монослоев. Величина E_{SOC} для атомов плати- ны почти в 70 раз больше, чем для атомов железа. Кроме атома Fe ближайшего к интерфейсу значе- ние E_{SOC} для которого минимально энергия спин- орбитального взаимодействие слабо меняется с толщиной. Влияние релаксации и ориентации грани на E_{SOC} сравнимы по величине и не превы- шают 10%.

Таким образом в работе проведено исследова- ние влияния релаксации с изменением толщины ферромагнитной пленки на значения $E_{\text{МА}}$ и маг- нитных моментов. Показано, что наибольшее сжатие происходит у приповерхностного атома, а

Таблица 4. Результаты E_{SOC} , мэВ для толщины магнитной пленки Fe в 5 монослоев, для разных ориентаций поверхностной грани, с учетом релаксации

Атом	(100)	(110)	(111)
Pt ₁	−749.0	−752.5	−747.9
Pt ₂	−767.9	−766.8	−751.1
Pt ₃	−750.1	−752.4	−747.9
Fe ₁	−8.8	−8.6	−9.2
Fe ₂	−11.7	−11.7	−12.2
Fe ₃	−11.7	−11.8	−12.1
Fe ₄	−11.7	−11.7	−11.6
Fe ₅	−12.5	−12.5	−12.6

направление магнитного момента оказывает существенное влияние на параметр релаксации, меняя как значение, так и характер смещения. Релаксация оказывает незначительное влияние на значение приведенной энергии. С увеличением толщины ферромагнитной пленки, наблюдается уменьшение энергии, приходящей на атом. Влияние релаксации приводит к увеличению значений магнитного момента, кроме двух случаев: для грани (111) при толщине пленки 3 слоя и для грани (110) при толщине пленки в 5 монослоев, для которых наблюдается смена типа анизотропии под влиянием релаксации. Для граней (100) и (110), при увеличении толщины пленки характерно осциллирующее поведение, в то время как для грани (111), виден переход к преобладанию перпендикулярной анизотропии. Было показано, что наибольший вклад в осциллирующее поведение E_{MA} вносит энергия спин-орбитального взаимодействия. Величина E_{SOC} для атомов платины почти в 70 раз больше, чем для атомов железа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-22-00093). Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yang I., Savrasov S.Y., Kotliar G. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. No. 21. Art. No. 216405.
2. Shick A.B., Mryasov O.N. // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. No. 17. Art. No. 172407.
3. Savrasov S. Y., Toropova A., Katsnelson M.I. et al. // Z. Kristallogr. 2005. V. 220. P. 473.
4. Ohtake M., Itabashi A., Futamoto M. et al. // IEEE Trans. Magn. 2014. V. 50. Art. No. 2104204.
5. Ohtake M., Itabashi A., Futamoto M. et al. // J. Magn. Soc. Japan. 2015. V. 39. P. 167.
6. Ravelosona D., Chappert C., Mathet V. // Appl. Phys. Lett. 2000 V. 76. P. 236.
7. Hsu Y.N., Jeong S., Lambeth D.N. // IEEE Trans. Magn. 2000. V. 36. P. 2945.
8. Shima T., Takanashi K., Takahashi Y.K. // Appl. Phys. Lett. 2002. V. 81. P. 1050.
9. Mankovsky S., Ebert H. // Electron. Struct. 2022. V. 4. No. 3. Art. No. 034004.
10. Fritzsche H., Gradmann U. // MRS Proceedings. 1993. V. 313. P. 671.
11. Etz C., Zabloudil J., Weinberger P., Vedmedenko E.Y. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. No. 18. Art. No. 184425.
12. Makeev M.Yu., Mamonoва M.B. // Изв. РАН. Сер. физ. 2023. Т. 87. № 4. С. 488; Makeev M.Yu., Mamonoва M.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2023. V. 87. No. 4. P. 427.
13. Шляхтич М.А., Прудников П.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2023. Т. 87. № 3. С. 440; Shlyakhtich M.A., Prudnikov P.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2023. V. 87. No. 3. P. 389.
14. Kresse P.G., Furthmuller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. No. 11169.
15. Мамонова М.В., Makeev M.Yu., Калинин Д.С., Зенова А.А. // ФТТ. 2021. Т. 63. № 11. С. 1787; Mamonoва M.V., Makeev M.Y., Kalinin D.S., Zenova A.A. // Phys. Solid State. 2022. V. 63. No. 11. P. 1787.
16. Tsujikawa M., Hosokawa A., Oda T. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Art. No. 054413.
17. Frantisek M., Alexander B., Peter M. // Czechoslov. J. Phys. 2006. P. 51.
18. Guirado-Lopez R. // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. Art. No. 174420.

Ab initio calculations of the magnetic anisotropy of Fe/Pt/Fe heterostructures with surface relaxation included

M. Y. Makeev^a, *, M. V. Mamonoва^a

^aOmsk State University, Omsk, 644077 Russia

*e-mail: mihailmaki603@gmail.com

A numerical study of the effect of surface relaxation, the equilibrium change in the interplanar distance, on the values of the magnetic and energy characteristics of the Fe/Pt/Fe system was carried out. The contribution of the spin-orbit interaction to the value of the magnetic anisotropy energy is studied as a function of the thickness of the ferromagnetic film.

Keywords: surface relaxation, magnetocrystalline anisotropy, spin-orbit coupling, ab-initio calculation