Mágneses nanoszerkezetek elméleti vizsgálata többszintű modellezéssel

Szunyogh László



BME TTK Fizikai Intézet Elméleti Fizika Tanszék





ELFT Anyagtudományi és Diffrakciós Szakcsoportjának Őszi Iskolája, Visegrád, 2011. október 5-7

Munkatársak

Udvardi László, Antal András, Balogh László, Szilva Attila, Deák András, Palotás Krisztián, Zaránd Gergely BME TTK Fizikai Intézet, Elméleti Fizika Tanszék

> Újfalussy Balázs, Lazarovits Bence, Simon Eszter MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Julie B. Staunton, Manuel dos Santos Diaz University of Warwick, UK

Malcolm G. Stocks, Marcus Eisenbach Oak Ridge National Laboratory, TN, USA

> Ulrich Nowak, University of Konstanz, Germany

Roy Chantrell, Jerome Jackson University of York, UK

Az előadás vázlata

Motiváció: mágneses adattárolás, mágneses nanoszerkezetek

Elméleti és számítástechnikai háttér

- Relativisztikus spin-polarizált elektronszerkezet számítás
- Ab initio spin-dinamika
- Többszintű spin-dinamika Klasszikus spinmodel A relativisztikus "nyomaték" módszer

Alkalmazások, jelenségek

- Mágneses anizotrópia tömbi antiferromágnesekben: IrMn₃
- Mágneses nanorészecskék
 - (i) Co lánc mágneses orientációja platina felületen
 - (ii) Hőmérsékleti spin-reorientáció: Co/Au(111)
- Dzsalosinszkij-Moriya kölcsönhatás ultravékony filmekben
 - (i) Mágneses mintázatképződés: Mn/W(110), Mn/W(001)
 - (ii) Spin-hullám spektrum aszimmetriája: Fe/W(110)
- Rashba felhasadás fémek felületén: Au(111), Au(110), BiAg(111)

Motiváció Nagysűrűségű mágneses adattárolás



San Jose Research Center

Hitachi Global Storage Technologies

Motiváció Nagysűrűségű mágneses adattárolás



Motiváció Merőleges mágneses adattárolás

Co and Fe nanorészecskék mágneses anizotrópiája Laboratory of Nanostructures at Surfaces, Lausanne (H. Brune, S. Rusponi)



Motiváció A mágneses nanostruktúrák vizsgálati eszközeinek robbanásszerű fejlődése

Spin-polarizált pásztázó alagútmikroszkóp (SP-STM)



R. Wiesendanger, Institut für Angewandte Physik und Zentrum für Mikrostrukturforschung Universität Hamburg





Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions

Stefan Heinze¹*[†], Kirsten von Bergmann²*[†], Matthias Menzel^{2†}, Jens Brede², André Kubetzka², Roland Wiesendanger², Gustav Bihlmayer^{3†} and Stefan Blügel³

Fe/lr(111)



- a Nano-skyrmion rács
- b Atomi felbontású STM kép
- c SP-STM kép
- d Az SP-STM képek szimulációi

Motiváció

Jelenségek

- Oszcilláló kicserélődési réteg-réteg kölcsönhatás
- Óriás mágneses ellenállás (P. Grünberg, A. Fert, Nobel díj 2007)
- Anizotróp mágneses ellenállás
- Áram által indukált mágneses kapcsolás
- Merőleges mágneses anizotrópia
- Felületi mágneses domének, mintázatképződés
- Spin-reorientáció
- Kicserélődési határfelületi csatolás (exchange bias)

Spin-pálya kölcsönhatás

. . .

Dirac Hamilton operátor
$$H_D = c \overrightarrow{\alpha} \left(\overrightarrow{p} - \frac{q}{c} \overrightarrow{A} \right) + \beta m c^2 + q \phi$$
 sorfejtés
 $H_{SOC} = \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d(q\phi)}{dr}}_{\xi} \overrightarrow{L} \overrightarrow{S}$ $1/c^2$ rendig



Számítógépes modellezés alapelvekből

- Sűrűségfunkcionál elmélet (Walter Kohn, Nobel díj 1998) Realisztikus, anyagspecifikus számítások
- Relativisztikus elmélet (Dirac egyenlet)
 Spin-pálya kölcsönhatás, mágneses anizotrópia



- Green függvény (árnyékolt Korringa-Kohn-Rostoker, SKKR) módszer A felületi rendszer geometriáját egzaktan kezeli Nagy rendszer (sok réteg) számolását teszi lehetővé
- Beágyazásos technika véges méretű atomcsoportokra Az atomfürt és környezetének kölcsönhatását egzaktan veszi figyelembe
- Ab initio spin-dinamika

Nem-kollineáris mágneses rendszerek

Spin-dinamika

1. Az elektronok **gyors** és a spin(irány) **lassú** mozgásának adiabatikus szétcsatolása: $\tau_{hopping} (10^{-15} \text{ s}) << \tau_{spin-flip} (10^{-13} \text{ s})$

Az elektronállapotok leírására használható a stacionárius lokális sűrűségfunkcionál módszer (LSDA)

- 2. Atomi spin közelítés
- 3. A spin-konfiguráció időfejlődése:

Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet

$$\frac{\partial \overrightarrow{e}_i}{\partial t} = \frac{\gamma}{1+\alpha^2} \, \left(\overrightarrow{e}_i \times \overrightarrow{B}_i \right) + \frac{\alpha \gamma}{1+\alpha^2} \, \left(\overrightarrow{e}_i \times \left(\overrightarrow{e}_i \times \overrightarrow{B}_i \right) \right)$$

 $\overrightarrow{M}_i = M_i \overrightarrow{e}_i$

 $\gamma\,$ giromágneses állandó, $\,\alpha\,$ Gilbert fékeződési faktor





Többszintű spin-dinamika

1. Klasszikus spin-model

$$H\left(\left\{\overrightarrow{e}\right\}\right) = H_0 + \sum_i \overrightarrow{e}_i \mathbf{K}_i \overrightarrow{e}_i - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \overrightarrow{e}_i \mathbf{J}_{ij} \overrightarrow{e}_j$$

lokális (on-site) anizotrópia kicserélődési kölcsönhatás

Tenzoriális kicserélődési kölcsönhatás:
$$\mathbf{J}_{ij} = J_{ij} \mathbf{I} + \mathbf{J}_{ij}^S + \mathbf{J}_{ij}^A$$
 $J_{ij} = \frac{1}{3}Tr \mathbf{J}_{ij}$ $\mathbf{J}_{ij}^S = \frac{1}{2} \left(\mathbf{J}_{ij} + \mathbf{J}_{ij}^t \right) - J_{ij} \mathbf{I}$ $\mathbf{J}_{ij}^A = \frac{1}{2} \left(\mathbf{J}_{ij} - \mathbf{J}_{ij}^t \right)$ izotrópanizotróp szimmetrikusantiszimmetrikusrelativisztikus (spin-pálya) effektus

Többszintű spin-dinamika

2. Parametrizálás: A relativisztikus "nyomaték" módszer

L. Udvardi et al., Phys. Rev. B 68 104436 (2003)



Többszintű spin-dinamika

3. Megoldás statisztikus fizikai módszerekkel



<u>Alkalmazások</u>

Antiferromágneses tömbi IrMn ötvözetek mágneses anizotrópiája

• Legelterjedtebben használt ipari antiferromágnes (exchange bias)



• Mágneses anizotrópia \rightarrow forgatás az (111) tengely körül $E(\varphi) = E(0) + K_{\text{eff}} \sin^2 \varphi$

L₁₂ IrMn₃ (folyt.)





(még nanorészecskékben is ritkán van ekkora MAE)

Kiléphet-e a frusztrált T1 spin-állapot az (111) síkból?

→ forgatás az (110) tengely körül

$$\frac{111) \text{ sík}}{2} = 1,3$$

$$E(\varphi) = E(0) + \frac{K_{\text{eff}}}{8} \left(2 + \sin^2 \varphi - 2\cos \varphi - 2\sqrt{2}\sin \varphi (1 - \cos \varphi)\right)$$

A köbös bulk AFM IrMn₃ frusztrált spin-konfigurációját az uniaxiális MAE stabilizálja az (111) síkban

L. Szunyogh et al., Phys. Rev. B 79, 020403(R) (2009)

Atomfürtök, nanorészecskék

Pt(111) felület lépcsőélei mentén önszerveződő Co-láncok mágneses orientácója

- Kísérlet: P. Gambardella et al., Nature 416, 301–304 (2002)
 - pásztázó alagútmikroszkópos kép
 - a lépcsőél irányába dőlő mágneses momentum



- Alacsony szimmetria → nem-triviális mágneses orientáció
- Meghatározható-e ab initio spin-dinamika számítással ez a mágneses állapot?



Spin-dinamika szimuláció B. Újfalussy et al., Phys. Rev. B 70, 100404(R) (2004)



• Eredmény: közelítőleg ferromágneses állapot $\theta = 42^{\circ}$ és $\phi = 90^{\circ}$

Hőmérsékleti spin-reorientáció

Planáris Co₃₆ klaszter Au(111) felületen



- ~ 300 és 150 K között dőlt mágnesezettség
- ~150 K alatt merőleges mágnesezettség \rightarrow "szuperparamágneses határ" $T_{\rm B}$ ~150 K

Dzsalosinszkij-Moriya kölcsönhatás

I. E. Dzyaloshinskii, Sov. Phys. JETP 5, 1259–1262 (1957) T. Moriya, Phys. Rev. 120, 91–98 (1960)

SP kh.

2

$$E_{DM} = \overrightarrow{e}_i \, \mathbf{J}_{ij}^A \, \overrightarrow{e}_j = \overrightarrow{D}_{ij} \left(\overrightarrow{e}_i \times \overrightarrow{e}_j \right) \quad \text{ahol} \quad D_{ij}^\alpha = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \, J_{ij}^{\beta\gamma}$$

A. Fert and P. Levy, Phys. Rev. Lett. 44, 1538 (1980) \rightarrow közvetett kicserélődés (Deák András, BME Fizikus BSc szakdolgozat, 2009)

DM kh. a mágneses momentumok nem-kollineáris rendeződését preferálja:



Dzsalosinszkij-Moriya kölcsönhatás



 $\kappa_z = -1$

Cr trimer Au(111) felületen



 $\kappa_z = 1$

Kiralitás

$$\vec{\kappa} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{(ij)} (\vec{\sigma}_i \times \vec{\sigma}_j)$$

$$E_{DM} = \frac{3\sqrt{3}}{2} D_z \,\kappa_z$$



A. Antal et al., Phys. Rev. B 77, 174429 (2008)

Mágneses mintázatképződés ultravékony filmekben

Mn monoréteg W(110) felületen M. Bode et al., Nature 447, 193 (2007)



Konstans áramú SP-STM kép

nagy hullámhosszú (12 nm) moduláció az antiferromágneses struktúrán ún. ciklois típusú spin-spirál \rightarrow a mágneses momentumok a (001) tengely körül fordulnak el

Spin-spirál képződés Mn/W(110) és Mn/W(001) monorétegekben

 $\lambda = 7.6 \text{ nm}$

 $\lambda = 2.2 \text{ nm}$



Mindkét eredmény kvantitatív egyezésben van a kísérlettel !

Spin-spirál képződés Mn/W(100) monorétegben

Paramágneses spin-szuszteptibilitás $\chi(\overrightarrow{q}) = (3k_BT\mathbf{I} - \mathbf{J}(\overrightarrow{q}))^{-1}$



Ultravékony mágneses filmek magnon spektruma

Fe/W(110) magnon spektruma adiabatikus közelítésbenU.L. & Sz.L., PRL 102, 207204 (2009)(figyelmen kívül hagyja a Stoner kontinuumot, de a diszperziós görbe q < 1 Å⁻¹ esetén jó)



A magnon spektrum királis aszimmetriája: egyszerű magyarázat



A magnon spektrum királis aszimmetriája: egyszerű magyarázat



Fe/W(110) magnon spektrumok aszimmetriája

Kísérlet (SPLEEM):

J. Prokop, J. Kirschner (MPI Halle) privát közlemény

 $Fe_{1}/W(110)$

Kh. Zakeri et al. PRL **104**, 137203 (2010)

Fe₂/W(110)



Rashba-effektus arany felületén

(Spintronika: elektromosan kontrollált spin-precesszió, Datta-Das SFET)



A felhasadás oka: inverzió szimmetria sérül a felületen → a spin-pálya kh. feloldja a Bloch állapotok Kramers degeneranciáját

Izotróp Rashba effektus:
$$H_R^{iso}(\mathbf{k}) = \alpha_R (\mathbf{e}_z \times \mathbf{k}) \cdot \sigma$$
 $\alpha_R = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \langle \phi_0 | \partial_z V / \partial z | \phi_0 \rangle$
$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \pm \alpha_R |\mathbf{k}|$$

Anizotróp Rashba-felhasadás Au(110) felületen

E. Simon et al., Phys. Rev. B 81, 085414 (2010)



Anizotróp Rashba-felhasadás Au(110) felületen

E. Simon et al., Phys. Rev. B 81, 085414 (2010)



	x irány		y irány	
	m*/m _e	$\alpha_{\rm R}~(eV~{\rm \AA})$	m*/m _e	$\alpha_{\rm R}~({\rm eV}~{\rm \AA})$
Au(111)	0.19	0.57	0.19	0.57
Au(110)	0.11	0.8	0.32	0.17

Közel ötszörös aszimmetria a Rashba paraméterben

Magyarázat: a felületi állapottal hibridizáló bulk állapotok szimmetriája (k·p perturbációszámítás)

Magasabb rendű anizotróp Rashba-felhasadás

Vajna Szabolcs, BME Fizikus BSc szakdolgozat, 2010

Spin-pálya kölcsönhatásban elsőrendű degenerált perturbációszámítás U A Rashba Hamiltoni általános alakja:

 $H_{R}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$

 σ_i időtükrözésre előjelet vált \downarrow $\alpha_i(\mathbf{k})$ a **k** komponenseinek páratlan hatványú polinomja

Példa $C_{3\nu}$ pontcsoportra (harmadrendű közelítés):

$$H_{R}(\mathbf{k}) = \alpha^{(1)} \left(k_{x} \sigma_{y} - k_{y} \sigma_{x}\right) + \alpha^{(3)} \left(\left(k_{x}^{3} + k_{x} k_{y}^{2}\right) \sigma_{y} - \left(k_{x}^{2} k_{y} + k_{y}^{3}\right) \sigma_{x}\right) + \alpha^{(3')} \left(k_{x}^{3} - 3k_{x} k_{y}^{2}\right) \sigma_{z}$$

elsőrendű izotróp tag harmadrendű anizotróp tagok (két független paraméter)

Rashba-felhasadás BiAg(111) felületi ötvözetben

C. Ast et al., PRL 98, 186807 (2007)



Anizotróp Rashba felhasadás: Bi/Ag(111)



Összefoglalás

A spin-pálya kölcsönhatás változatos formákban jelenik meg a mágneses nanostruktúrák fizikájában:

Mágneses anizotrópia Spin-spirál képződés vékonyrétegekben Spin-hullám spektrum aszimmetriája Rashba effektus

A relativisztikus ab-initio számításokon alapuló spin-modellek a komplex mágneses nanostruktúrák széleskörű elméleti tanulmányozását teszik lehetővé

Köszönöm a figyelmet !