

Vékonyrétegek és nanoszerkezetek mágneses rendeződésének elméleti vizsgálata

Nagyfalusi Balázs

A mágneses vékonyrétegek és nanoszerkezetek vizsgálata már hosszú ideje a szilárdtestfizika érdeklődésének fókuszában van. Számos jelenség megértéséhez alapvető fontosságú a rendszer elektron- és mágneses szerkezetének ismerete és napjaink számítástechnikai kapacitása már lehetővé teszi, hogy ezeket elméleti úton, akár első elvekből kiindulva is meghatározhassuk. A doktori munkámban különféle mágneses rendszerek: vékonyrétegek és spinláncok tulajdonságait vizsgáltam, amelyek viselkedése fontos szerepet játszik a mágneses adattároló eszközök fejlesztésében.

A munkám egyik részében vékonyrétegek mágneses anizotrópia energiájának (MAE) hőmérsékletfüggését vizsgáltam Monte Carlo szimulációk segítségével. A MAE több hatás eredőjeként adódik, amelyek gyakran egymással ellentétes mágneses rendeződést preferálnak. Ezek a járulékok különböző módon reagálnak a rendszer vastagságának és hőmérsékletének változására, amely végsősoron a MAE előjelének megváltozáshoz, és így egy spin reorientációs átalakuláshoz (SRT) vezethet. A szabadenergia feltérképezéséhez egy a jól temperált metadinamika módszerén alapuló eljárást használtam. A munka során először modell rendszereken ellenőriztem a módszer működését, majd valós, kísérletileg motivált fizikai rendszereket vizsgáltam. Az utóbbiak szimulációjához szükséges csatolásokat és mágneses anizotrópia paramétereiket első elvekből való számításokra alapoztam. A modell mono- és kettősrétegekben sikerrel reprodukáltam az irodalomból elvárt hőmérsékletfüggést, és részletesen vizsgáltam a SRT-t az anizotrópia függvényében. A kutatásaim igazolták az Au(001) felületre helyezett kettős és hármas Fe rétegek közötti SRT-t. W(110) felületen levő Fe kettős rétegen való vizsgálataim rávilágítottak, hogy a Dzjalosinszkij–Morija-kölcsönhatás okozta véges hőmérsékletű dinamikus anizotrópia járuléknak fontos szerepe van hőmérséklet növelése folyamán végbemenő SRT-ban.

A doktori munka jelentős feladata volt a metadinamika kód továbbfejlesztése, hogy a topológikus töltésre, mint kollektív változóra alapozva topológikus struktúrákat, azaz skyrmionokat és antiskyrmionokat is vizsgálni tudjak. A szimulációkat $(\text{Pt}_{0.95}\text{Ir}_{0.05})/\text{Fe}/\text{Pd}(111)$ és $\text{Pd}/\text{Fe}/\text{Ir}(111)$ kettősrétegekben végeztem. A mágneses konfigurációt jellemző topológikus töltés önmagában nem elegendő a különböző skyrmionok azonosítására, de a konfiguráció alapos vizsgálatával a különféle objektumok azonban beazonosíthatóak. Ez lehetővé tette, hogy beazonosítsak a hőmérséklet és a külső mágneses tér függvényében egy olyan tartományt, ahol a skyrmionok részecskéként viselkednek a rácson, és így képes voltam meghatározni a kémiai potenciáljukat. A véges hőmérsékletű kémiai potenciál görbék azt mutatták hogy a vizsgált $(\text{Pt}_{0.95}\text{Ir}_{0.05})/\text{Fe}/\text{Pd}(111)$ kettősrétegben a skyrmionok és antiskyrmionok keletkezése is energetikailag kedvezőtlen, de $\text{Pd}/\text{Fe}/\text{Ir}(111)$ -ben olyan mágneses térben, ahol az alapállapot térpolarizált azt találtam, hogy a skyrmionoknak negatív a kémiai potenciálja, azaz az adott $B - T$ paraméterek mellett a térpolarizált háttérből való létrejöttük kedvező folyamat.

A kutatás másik fő iránya nemmágneses hordozókra helyezett mágneses atomi Fe láncok vizsgálata volt *ab initio* optimalás segítségével. A $\text{Re}(0001)$, $\text{Rh}(111)$ és $\text{Nb}(110)$ felületekre helyezett láncok vizsgálatának jelentőségét az adta, hogy így az alapállapot mágneses rendeződést külön spin modell feltételezése nélkül, közvetlenül az elektronszerkezetből lehet meghatározni. A $\text{Re}(0001)$ és $\text{Nb}(110)$ felületekre helyezett Fe láncokban sikerrel reprodukáltam a spinspirál szerkezetet, jó egyezéssel a kísérletileg mért hullámhosszal. A vizsgálataim kiterjedtek az elektronszerkezet-számításban használt ℓ_{\max} impulzusmomentum-térbeli levágás hatásának vizsgálatára, és a létrejövő mágneses konfigurációk összehasonlítására klasszikus kvadratikuss spin modell számolásokon alapuló eredményekkel is.