

# Atomi spindinamika véges hőmérsékleten

Rózsa Levente

Témavezető: Dr. Udvardi László

Tudományos Diákköri Konferencia  
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2011. 11. 16.

## Bevezetés

### Atomi spindinamika

A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet  
Az effektív tér számítása

### Elméleti eredmények

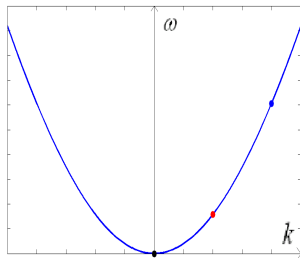
Magnonspektrum  
Az egyenlet linearizált alakjának megoldása

### Szimulációs eredmények

Ideális rács  
Rácshibák  
Véges hullámszámú gerjesztés  
Dinamikus struktúrafaktor

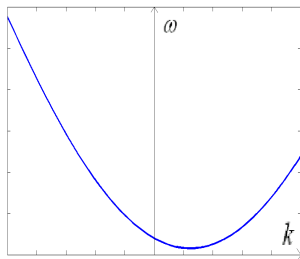
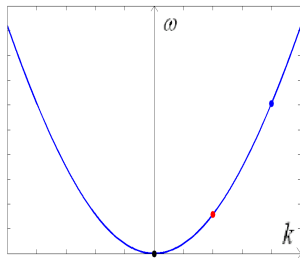
## Összefoglalás

# Bevezetés



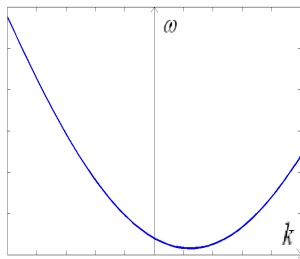
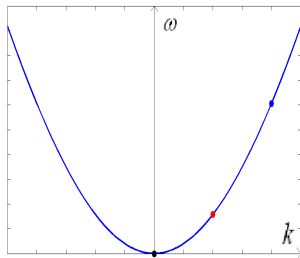
- R. Arias, D. L. Mills:  
vékonyrétegekben a  
dipól-dipól-kölcsönhatás  
következtében a  
magnonspektrum  
minimума eltolódhat a  $\Gamma$   
ponttól (*Phys. Rev. B*,  
**60**, 7395 (1999))

# Bevezetés



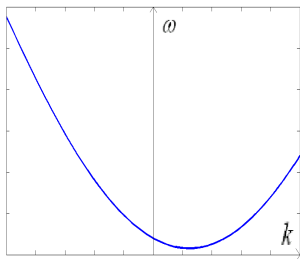
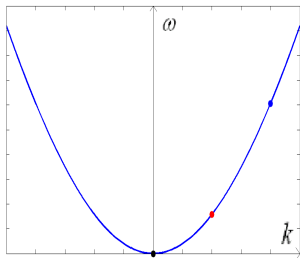
- J. Linder *et al.* (*Phys. Rev. B*, **80**, 224421 (2009)), K. Lenz *et al.* (*Phys. Rev. B*, **73**, 144424 (2006)), F. Xu *et al.* (*J. Appl. Phys.*, **109**, 07D322 (2011)): kísérleti igazolás

# Bevezetés



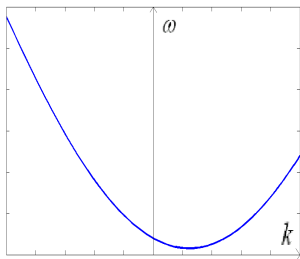
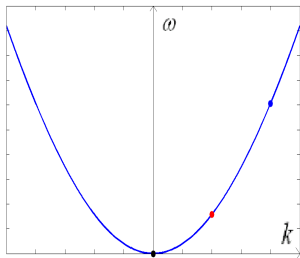
- R. N. Costa Filho *et al.*:  
diagrammatikus  
módszerek a  
magnon-magnon-szórás  
vizsgálata során (*Phys.  
Rev. B*, **62**, 6545 (2000))

# Bevezetés



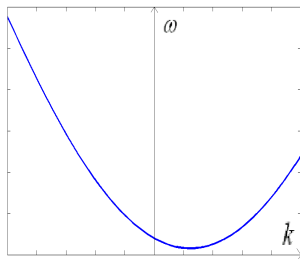
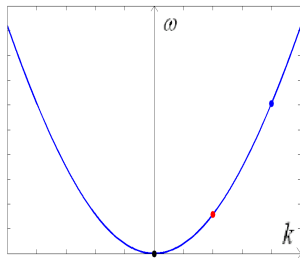
- E. Y. Vedmedenko *et al.*:  
testcentrálrt köbös rács  
(110) felületén kialakított  
vékonyrétegben  
megjelenhet a  
Dzjaloshinsky-Moriya-  
kölcsonhatás (*Phys. Rev.*  
*B*, **75**, 104431 (2007))

# Bevezetés



- L. Udvardi, L. Szunyogh:  
ilyen rendszerekben a  
magnonspektrum  
minimuma szintén  
eltolódik a  $\Gamma$  ponttól  
(*Phys. Rev. Lett.*, **102**,  
207204 (2009))

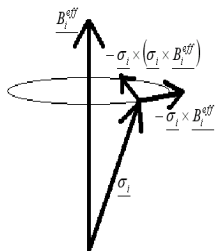
# Bevezetés



- Kh. Zakeri *et al.*: a Fe/W(110) rendszer esetén kísérleti igazolás (*Phys. Rev. Lett.*, **104**, 137203 (2010))



# A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet



$$\frac{\partial \sigma_i(t)}{\partial t} = -\gamma' \sigma_i(t) \times (B_i^{\text{eff}} + B_i^{\text{termikus}}) - \alpha \gamma' \sigma_i(t) \times (\sigma_i(t) \times (B_i^{\text{eff}} + B_i^{\text{termikus}}))$$

- az  $i$ -edik rácshelyen lévő spin beállításának irányát megadó  $\sigma_i$  egységvektorra vonatkozó mozgásegyenlet, különböző rácshelyekre együttesen kell megoldani
- $\alpha$  a Gilbert-csillapítás,  $\gamma' = \frac{1}{1+\alpha^2} \frac{e}{m}$  a módosított giromágneses arány,  $B_i^{\text{eff}}$  az adott pontban ható effektív mágneses tér,  $B_i^{\text{termikus}}$  a hőmérsékleti zaj

## Az effektív tér számítása

- a  $\mathbf{B}_i^{\text{eff}}$  effektív teret egy effektív Hamilton-függvény adott spin szerinti deriváltjából kapjuk:

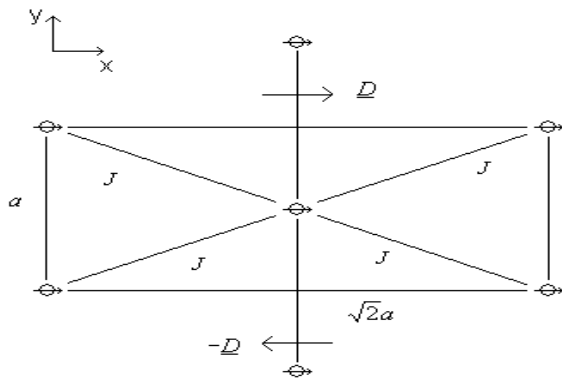
$$-\frac{\partial H}{\partial \sigma_i} = M_S V_C \mathbf{B}_i^{\text{eff}}$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_i \mathbf{J}_{ij} \sigma_j + \sum_i (K_x \sigma_{ix}^2 + K_y \sigma_{iy}^2 + K_z \sigma_{iz}^2) - M_S V_C \mathbf{B} \sum_i \sigma_i$$

- $M_S$  a telítési mágnesezettség,  $V_C$  a cellatérfogat,  $\mathbf{J}_{ij}$  az általánosított Heisenberg-modell csatolási tenzora,  $K_x, K_y, K_z$  az anizotrópiát jellemző konstansok
- a  $\mathbf{B}_i^{\text{termikus}}$  hőmérsékleti zaj az időben és rácshelyekre véve korrelálatlan fehér zaj konstansszorosa:

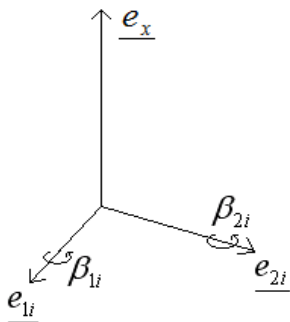
$$\mathbf{B}_i^{\text{termikus}}(t) = \sqrt{2D} \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad D = \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \frac{k_B T}{V_C M_S \gamma'}$$

## Az effektív tér számítása



- a vas vékonyréteg esetén a  $J_{ij}$  mátrix alábbi elemeit hagyjuk meg: az első szomszédok között  $J < 0$  ferromágneses Heisenberg-csatolás, a második szomszédok között  $D^{ij} = \frac{1}{2}(J_{yz}^{ij} - J_{zy}^{ij})$  Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás,  $K_x < 0$  anizotrópia

# Magnonspektrum



- ferromágneses alapállapot körül ha csak kis kitéréseket engedünk meg, a ferromágneses irányra ( $\underline{e}_x$ ) merőleges tengelyek körüli kis elfordulások szerint sorbafejthető az egyenlet, itt  $M_i = M_S V_C$  a mágneses momentum nagysága

$$\frac{\partial \beta_{2i}}{\partial t} = \gamma' \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} - \alpha \gamma' \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} + \gamma' \underline{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{\text{termikus}} + \alpha \gamma' \underline{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{\text{termikus}}$$

$$\frac{\partial \beta_{1i}}{\partial t} = -\gamma' \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} - \alpha \gamma' \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} + \gamma' \underline{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{\text{termikus}} - \alpha \gamma' \underline{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{\text{termikus}}$$

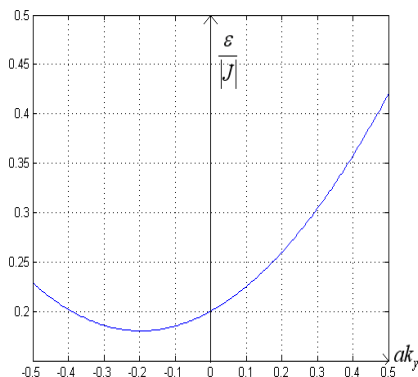
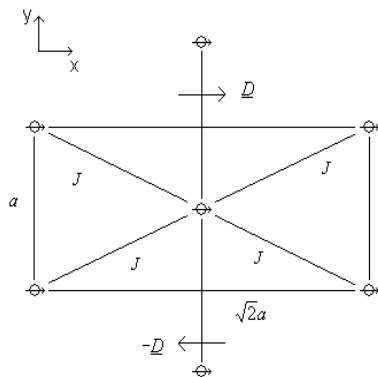
# Magnonspektrum

- ezen egyenletek alkalmazásához az energiát ismerni kell ezen szögek függvényeként
- ha tényleg alapállapot körül fejtünk sorba, a Hamilton-függvényben az első el nem tűnő tag a szögekben másodrendű, ezt kvantálva független harmonikus oszcillátorok összegeként írható a Hamilton-operátor, ezek a gerjesztések a magnonok

$$\frac{1}{\hbar} H_{SW} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \omega(\mathbf{k}) b^+(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}) + \omega(-\mathbf{k}) b^+(-\mathbf{k}) b(-\mathbf{k}) \right)$$

# Magnonspektrum

- alkalmazzuk ezt a számítást a vas vékonyrétegre  $J < 0$ ,  
 $D = 0.1|J|$ ,  $K_x = -0.1|J|$  paraméterekkel



$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle_1} J \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle_2} D_{ij} (\sigma_i \times \sigma_j) + K_x \sum_i \sigma_{ix}^2$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -4J \left( 1 - \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} ak_x\right) \cos\left(\frac{1}{2} ak_y\right) \right) + 2D \sin(ak_y) - 2K_x$$

## Az egyenlet linearizált alakjának megoldása

- a linearizált egyenletet oldjuk meg abban az esetben, ha  $\mathbf{0}$  hullámszámú külső mágneses térrel gerjesztjük a rendszert, a ferromágneses iránnyal párhuzamosan statikus  $B_x$  térrel, rá merőlegesen  $\omega$  körfrekvenciájú, kis  $B_z$  amplitúdójú térrel, és  $B_x$ -et változtatjuk
- a ferromágneses iránytól való eltérést jellemző  $S = \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2 - \langle m_z \rangle^2$  mennyiség az alábbi módon függ az  $\omega_0 = \frac{1}{1+\alpha^2}(B_x - 2K_x)$  mágneses tértől egy  $n$  atomból álló rácstra:

$$S = \frac{\omega^2 + (1 + \alpha^2)\omega_0^2}{2\left(\left((1 + \alpha^2)\omega_0^2 - \frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2}\omega^2\right)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^4}{(1+\alpha^2)^2}\right)} n \frac{B_z^2}{1 + \alpha^2} + \frac{2T}{\omega_0}$$

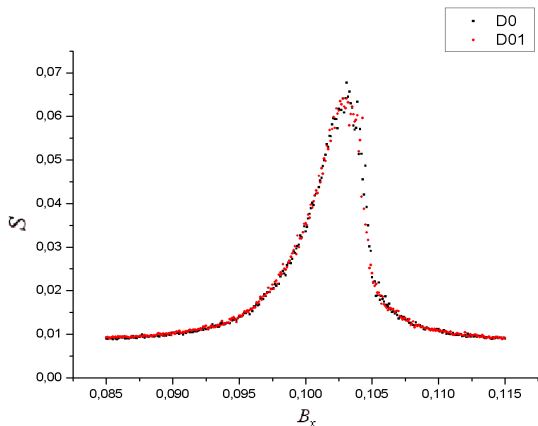
## Az egyenlet linearizált alakjának megoldása

$$S = \frac{\omega^2 + (1 + \alpha^2)\omega_0^2}{2\left(\left((1 + \alpha^2)\omega_0^2 - \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}\omega^2\right)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^4}{(1 + \alpha^2)^2}\right)^{1/2}} n \frac{B_z^2}{1 + \alpha^2} + \frac{2T}{\omega_0}$$

- rezonanciaszerű viselkedés figyelhető meg, a csúcsok helye  $\omega_{0,max} \approx \pm\omega$ , a félérték-szélesség  $\Delta\omega_0 \approx 2\alpha\omega$ , a hőmérsékletfüggő háttér a mágneses tér növelésével lecseng
- a Dzialoshinsky-Moriya-kölcsönhatás nem jelenik meg, ezért valahogy módosítani kell a szimulációs módszert: véges hullámszámú gerjesztést kell alkalmazni, vagy hibákat kell tenni a rácsba, ekkor nem marad meg a kváziimpulzus,  $\mathbf{0}$  hullámszámú külső tér véges hullámszámú magnonokat is gerjeszthet átszóródással

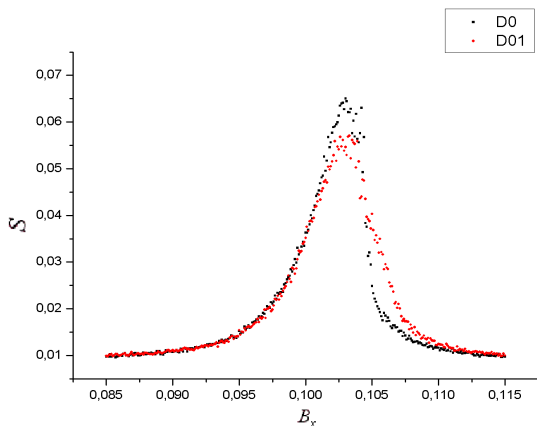


## Ideális rács



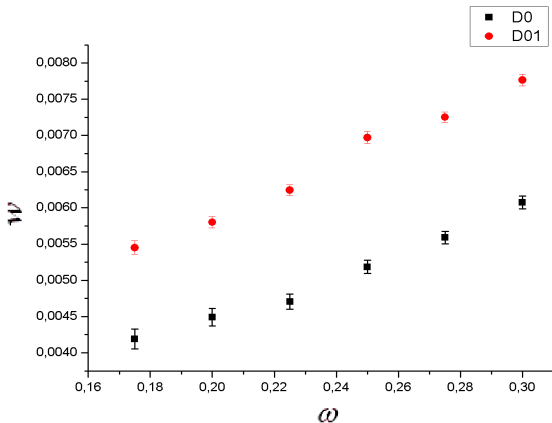
- ideális  $32 \times 32$ -es rácsra,  $\mathbf{0}$  hullámszámú gerjesztésnél nincs különbség a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül (D0), illetve  $D = 0.1|J|$  értékkel (D01) végzett szimulációk között ( $J = -1$ ,  $\omega = 0.2$ ,  $\alpha = 0.01$ ,  $T = 0.01$ ,  $K_x = -0.05$ )

# Rácshibák



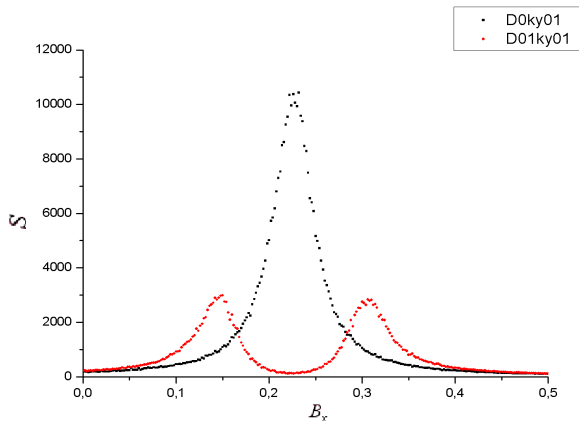
- ha 50, véletlenszerűen kiválasztott rácsponton a spinek értékét **0**-vá tesszük ( $J = -1$ ,  $\omega = 0.2$ ,  $\alpha = 0.01$ ,  $T = 0.01$ ,  $K_x = -0.05$ )

# Rácshibák



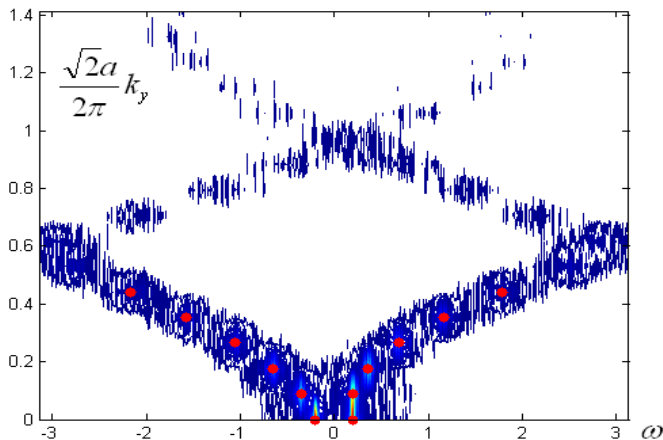
- a félérték-szélesség a gerjesztő frekvencia függvényében

## Véges hullámszámú gerjesztés



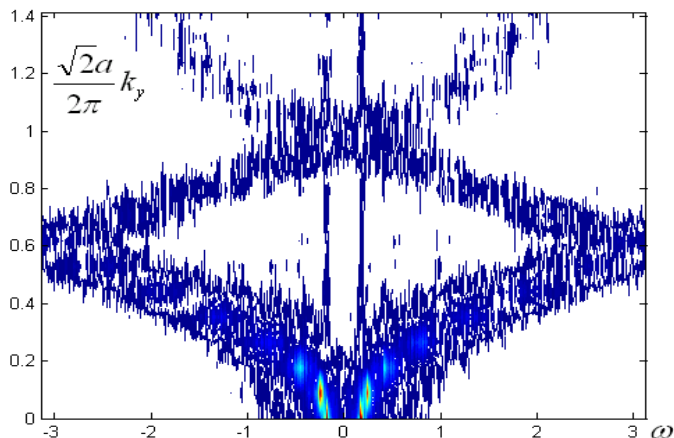
- ha véges ( $k_y = \frac{2\pi}{a} \frac{1}{16}$ ,  $k_x = 0$ ) hullámszámú a gerjesztés  
( $J = -1$ ,  $\omega = 0.5$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $T = 0.01$ ,  $K_x = -0.1$ )

# Dinamikus struktúrafaktor



- ideális rácsra, Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatással, teljes magnonspektrum megfigyelhető, piros pontok: elméleti spektrum ( $D = 0.1$ ,  $J = -1$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $T = 0.01$ ,  $K_x = -0.1$ )

# Dinamikus struktúrafaktor



- rácsból 50 atom hiányzik, külső gerjesztéssel, Dzialoshinsky-Moriya-kölcsönhatással, átszóródás véges hullámszámra ( $\omega = 0.2$ ,  $D = 0.1$ ,  $J = -1$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $T = 0.01$ ,  $K_x = -0.1$ )

Spin hullámok  $16 \times 16$ -os rácson, 50 rácshelyet kinullázva

# Összefoglalás

- megismertük az atomi spindinamika alapegyenletét, a sztochasztikus Landau-Lifshic-Gilbert-egyenletet
- ezt ferromágneses alapállapot körül vizsgálva, a Hamilton-függvényt kvantálva alacsony energiájú gerjesztéseket, magnonokat vezetünk be
- az egyenletet linearizáltuk alacsony hőmérsékleten, az alapállapottól csak kis kitéréseket megengedve, és meghatároztuk a megoldást
- a megoldást összevetettük a szimulációs eredményekkel
- az elméleti számolás és a szimuláció során is a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következménye csak véges hullámszámú külső gerjesztés, vagy nem ideális rács esetén figyelhető meg



## Hivatkozások

- B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordström, O. Eriksson, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **20**, 315203 (2008)
- T. Moriya, *Physical Review Letters*, **4**, 228 (1960)
- R. Arias, D. L. Mills, *Physical Review B*, **60**, 7395 (1999)
- J. Linder, I. Barsukov, C. Raeder, C. Hassel, O. Posth, R. Meckenstock, P. Landeros, D. L. Mills, *Physical Review B*, **80**, 224421 (2009)
- K. Lenz, H. Wende, W. Kuch, K. Baberschke, K. Nagy, A. Jánossy, *Physical Review B*, **73**, 144424 (2006)
- F. Xu, S. Li, C. K. Ong, *Journal of Applied Physics*, **109**, 07D322 (2011)
- R. N. Costa Filho, M. G. Cottam, G. A. Farias, *Physical Review B*, **62**, 6545 (2000)

## Hivatkozások

- E. Y. Vedmedenko, L. Udvardi, P. Weinberger, R. Wiesendanger, *Physical Review B*, **75**, 104431 (2007)
- L. Udvardi, L. Szunyogh, *Physical Review Letters*, **102**, 207204 (2009)
- Kh. Zakeri, Y. Zhang, J. Prokop, T.-H. Chuang, N. Sakr, W. X. Tang, J. Kirschner, *Physical Review Letters*, **104**, 137203 (2010)
- J. L. García-Palacios, E. Platen, *Physical Review B*, **58**, 14937 (1998)
- L. C. Evans: An Introduction to Stochastic Differential Equations <http://math.berkeley.edu/~evans/SDE.course.dvi> (egyetemi jegyzet)

Köszönöm a figyelmet!