

# Zárójelentés

## Hibrid mágneses szerkezetek

OTKA T046267

Négy és fél év időtartamú pályázatunkban két fő témakörben végeztünk intenzív elméleti kutatásokat: (A) Mágneses nanostruktúrák ab initio szintű vizsgálata és (B) Mágneses félvezetők és kvantumszennyezők tanulmányozása. Az alábbiakban összefoglaljuk e két témakörben született 48 tudományos közleményünk fontosabb eredményeit. Hivatkozásképpen a publikációs listában szereplő cikkek sorszámát tüntettük föl.

### (A) Mágneses nanostruktúrák

Az atomi méretű nanoszerkezetek alkalmazása nagysűrűségű mágneses adattárolásra jelentős kihívást jelent napjainkban a kutatások számára. Ab-initio adiabatikus spin-dinamika módszert alkalmaztunk fémes felületekre helyezett ‘nanodrótok’ mágneses alapállapotának megkeresésére. Megmutattuk, hogy a szimmetria csökkenése a felület normálisához képest dőlt mágneses irányú alapállapot kialakulásához vezethet. Számításokat végeztünk egy Pt(111) felületen képződő terasz lépcsőjének mentén elhelyezett 7 Co atomból álló láncre. Az általunk kapott alapállapot mágneszettségi irány, mely kb.  $42^\circ$ -ot zár be a felület normálisával, kiváló egyezést mutat a kísérleti tapasztalattal [1,2]. A mágneses szerkezet meghatározásának másik módja egy klasszikus Heisenberg spin-modellen alapul, melyhez a spin-kölcsönhatási és mágneses anizotropia paramétereit ab-initio Green-függvényes módszerrel határoztuk meg. Ezt a modelt Monte-Carlo szimulációkkal vagy a Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet megoldásával tanulmányoztuk. ‘Benchmark’ jellegű számítást végeztünk egy Au(111) felületre helyezett Cr trimerre, mely a frusztrált mágneses rendszerek típuspéldájának tekinthető. Legérdekesebb eredményünk, hogy a Dyzaloshinskiy-Moriya (DM) kölcsönhatás feloldja a kétféle kiralitású alapállapot konfigurációk degenerációját [36,42]. Ugyancsak a DM kölcsönhatás jelentőségét mutattuk ki a Mn/W(110) és Mn/W(100) monorétegek mágneses mintázatképződésében [47]. Számításaink igen jól visszaadták a korábban (110 felületen) ill. utólag (100 felületen) spin-polarizált STM mérésekkel megfigyelt spin-spirál szerkezetek periódushosszát.

A mágneses adattárolás egyik legfontosabb tényezője a mágneses anizotropia, hiszen ennek mértéke, mely számos kísérleti körülménytől (pl. a szubsztrát, a vékonyréteg és a fedőréteg anyagi minősége, geometriai szerkezete stb.) függ, határozza meg a mágneses irány átfordulásának hőmérsékletét. Ezért továbbra is kiemelt figyelmet szenteltünk a mágneses anizotropia tanulmányozásának. A kísérletek szerint a Cu<sub>3</sub>Au(001) szubsztráton növesztett vékony, fcc szerkezetű vas filmek mágneszettsége alacsony hőmérsékleten kb. 3 atomi réteg vastagságnál a felületre merőleges irányból a felülettel párhuzamos irányba fordul. Számításaink szerint a két atomi réteg vastagságú film csak abban az esetben mutat merőleges mágneszettséget, ha a rétegek merőleges irányú pozitív relaxációt szenvednek és az arany atomok diffúziója kicsi. Három vas monoréteg esetében éppen az arany atomok diffúziója, melyet egy merőleges kontrakció stabilizál, vezet merőleges mágneszettséghez. Ezek alapján arra következtettünk, hogy a vas film

növesztésének kísérleti körülményei határozzák meg a mágneses átfordulási vastagságot [8]. Az újgenerációs mágneses adattárolás egyik alapvető feltétele a felületre merőleges könnyű mágneses irány kontrollálhatósága. Ennek egyik eszköze a különböző bonyolultságú rétegstruktúrák alkalmazása. Együttműködő spanyol partnereink Ru(0001) felületre vitt vékony Co filmek mágnesezettségének irányát vizsgálták a film vastagságának függvényében és azt tapasztalták, hogy a két monoréteg vastagságú film a felületre merőlegesen mágneses, míg az egy ill. három (és annál több) monoréteg vastagságú filmek könnyű mágneses iránya a felülettel párhuzamos. Elméleti számításaink azt igazolták, hogy a két monoréteg vastagságú Co film merőleges anizotrópiáját a rétegek felületi relaxációjának következtében történő elektronszerkezet módosulás (határréteg hibridizáció) okozza [23].

Különbéle mesterséges felületi nanostruktúrák előállítási és vizsgálati technikáinak rohamos fejlődése (elsősorban az atomi skálájú pásztázó alagút mikroszkópia) maga után vonta az itt előforduló különleges elektronállapotok elméleti tanulmányozásának szükségszerűségét. Mi egy mágneses atomokból felépített gyűrű (quantum corral) spin-polarizált állapotait vizsgáltuk. Az ab-initio számításainkból kapott diszkrét állapotsorozat jó egyezést mutatott egy effektív analitikus modell eredményével. A modell keretén belül arra a következtetésre jutottunk, hogy a gyűrű által bezárt állapotokból adódó mágneses momentum a gyűrű átmérőjének függvényében oszcillál [10]. Szisztematikusan tanulmányoztuk 3d átmeneti fém szennyezők által keltett felületi állapotokat Cu(111) felületén. A korábbi STM kísérletekkel egybehangzóan kimutattuk az adatok által indukált kötött állapotokat. Mágneses szennyezők esetében markáns különbséget észleltünk a különböző spinállapotokhoz rendelhető rezonanciák helyében és jellegében, amit a szennyező d-sávja és a felületi elektronállapotok közötti hibridizációval magyaráztunk [22].

Az ún. 'Rendezetlen Lokális Momentumok' (Disordered Local Moments, DLM) módszer a sűrűségfunkcionál eljárás olyan kiterjesztése, mely átlagtér közelítésben figyelembe veszi a ferromágneses fémek véges hőmérsékleti spin-fluktuációit, ezáltal lehetővé teszi ezen rendszerek mágneses tulajdonságainak ab initio szintű tárgyalását. Részletesen kidolgoztuk a módszer relativisztikus változatát, melyet a mágneses anizotrópia energia hőmérsékletfüggésének számítására alkalmaztunk. Meghatároztuk az L10 szerkezetű rendezett FePt ötvözet mágneses anizotrópiájának hőmérsékletfüggését a ferromágneses fázisban. Az anizotrópia konstans jó közelítéssel a mágnesezettség négyzetével arányosnak adódott, ami megfelelő egyezést jelent a kísérletekkel, ugyanakkor rámutat arra, hogy az ún. "független ion" közelítés nem alkalmazható az erősen itineráns mágneses viselkedést mutató rendszerekre [5]. Hasonló eredményt kaptunk a rendezett FePd ötvözetre is [29]. Modellszámítás segítségével megmutattuk, hogy az eltérés az itineráns rendszerben fellépő anizotróp kicserélődési kölcsönhatásnak tulajdonítható. Ugyanezzel a modellel jó közelítéssel sikerült magyarázni a köbös szimmetriájú ötvözetek mágneses anizotrópia-mágnesezettség függését is [29]. A relativisztikus Rendezetlen Lokális Momentum (R-DLM) módszert alkalmaztuk ferromágneses vékonyrétegekre is. Réz felületre helyezett kobalt vékonyrétegekre a kísérleti megfigyeléssel összhangban általában a felülettel párhuzamos mágnesezettségi irányt kaptunk, de a Curie hőmérséklet közelében számításaink reorientációra vezettek a felületre merőleges irányba. Ez a viselkedés - Heisenberg modellen alapuló szimulációink alapján - ugyancsak az itineráns rendszerekben fellépő anizotróp kicserélődési kölcsönhatás következménye [37,38].

Az eredetileg Slonczewski (1996) által megjósolt, majd kettős mágneses vékonyrétegekben kísér-

letileg is megfigyelt és széles körben vizsgált, áram által indukált mágneses átfordulás (Current Induced Magnetic Switching) a spintronikai alkalmazások ígéretes eszköze. A jelenség pontos leírása, kontrollálhatóságának és gyakorlati alkalmazhatóságának vizsgálata napjainkban intenzíven folyik. Mi egy olyan elméleti módszert dolgoztunk ki, mely a két réteg mágneses elfordulási energiájának számításán és a fenomenológikus Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet megoldásán alapul. Explicit kifejezéseket írtunk fel az átfordulási időre és a kritikus áramerősségre. Co/Cu/Co kettősrétegek átfordulási idejére kiváló egyezést kaptunk a kísérletekkel. A kritikus áramerősség esetében, mivel itt több bizonytalan, a kísérlettől függő geometriai tényező is szerepet játszik, egyelőre nem tudtunk megbízható becslést adni [7]. Alkalmazva korábban bevezetett módszerünket részletesen vizsgáltuk az áram által indukált mágneses kapcsolás jelenségét a technológiai alkalmazások szempontjából ígéretes permalloy/réz/permalloy hármasréteg szerkezetben. A kapcsolási időre kapott kb. 30 ps-os érték jó egyezést jelent a kísérletekkel [9].

A Kubo-Greenwood formula és a Korringa-Kohn-Rostoker ‘beágyazási’ (embedding) technika ötvöztetésével olyan programot fejlesztettünk ki, amely alkalmas véges nanostruktúrák transzport tulajdonságainak meghatározására. A módszerrel különböző geometriájú arany nanokontaktusok vezetőképességét határoztuk meg. Különös figyelmet szenteltünk az átmeneti fém (Pd, Fe és Co) szennyezők hatásának a kontaktus vezetésére. Számításaink szerint a vezetés nagyon érzékenyen változik a szennyező atom pozíciójának függvényében. Ezt a változást a kontaktus centrumában lévő atom rezonáns viselkedést mutató s-típusú állapotssűrűségével hoztuk összefüggésbe, amelyet a mágneses szennyező kisebbségi spin d-típusú elektronjaival való kölcsönhatás indukál [4,7].

A mágneses vékonyrétegek egyik legfontosabb vizsgálati eszköze a magneto-optikai Kerr effektuson alapul. Egy réz réteggel elválasztott kettős nikkel réteg Kerr forgatását tanulmányozva megállapítottuk, hogy az a réz réteg vastagságának függvényében oszcillál. Ez annak a következménye, hogy a spacer vastagság függvényében a két mágneses réteg csatolása fluktuál a ferromágneses és antiferromágneses csatolás között [4]. Az arany felületén növesztett vas vékonyréteg kb. 3 atomi rétegvastagságnál fellépőmágneses irányváltozást ab initio számításainkban egyértelműen korreláltatni tudtuk a felületre merőlegesen beeső fény Kerr forgatási szögének ugrásszerű csökkenésével. A beesési szög változtatásával 70 fok estén kaptunk maximális forgatási szöget. Számításainkat kombinálva egy egyszerű fenomenológikus modellel, egy domén esetében meghatároztuk a Kerr forgatási szög külső mágneses tér függését [18].

A réteges rendszerek elektron- és mágneses szerkezetét számító ab initio programmunkat továbbfejlesztettük úgy, hogy az atomi potenciál és töltéssűrűség leírásában a gömbszimmetrikus tagon túl figyelembe vettük a magasabb rendű, aszimmetrikus tagokat is. Mindazonáltal, hogy az ún. teljes töltéssűrűség módszer a teljes energia igen pontos számítását teszi lehetővé, rámutattunk arra, hogy, amennyiben a pályamomentum kvantumszámok szerinti kifejtés konvergenciája nem megfelelő, az energia- ill. potenciálskála zérushelyének megválasztásától függenek az eredmények. Az intersticiális potenciál minimalizálása azonban optimális választásnak tűnik [28,34].

## (B) Mágneses félvezetők és kvantumszennyezők

Kutatásaink egy részében mágneses félvezető struktúrák tulajdonságait tanulmányoztuk. Ezek az anyagok fontos szerepet játszanak jelenleg a spintronikai kísérletekben, és a technológiai fejlesztésben. Az ún. hat sáv közelítést használva meghatároztuk GaMnAs-ben a két Mn spin közötti kölcsönhatást. Azt tapasztaltuk, hogy a két spin közötti kölcsönhatás kis távolságokra izotróp, míg nagy Mn-Mn távolságnál erősen anizotróp. Az effektív kölcsönhatást használva Monte Carlo szimulációkat végeztünk, és megmutattuk, hogy híg limeszben nem-kollineáris állapot alakulhat ki [13]. Ezt a jelenséget a szennyezési sáv képbén is tanulmányoztuk: Mikroszkópikus számítások alapján effektív modellt alkottunk nagyon híg mágneses félvezető ötvözetek leírására, majd a modellt Monte Carlo szimuláció és átlagtérelmélet segítségével tanulmányoztuk, és megmutattuk, hogy lehetséges a szennyezési sávban egy lokalizációs fázisátalakulás létrejötte valamint hogy a spin-pálya kölcsönhatás természetesen vezet nem-kollineáris állapotok megjelenéséhez [14]. A magnetotranszport tulajdonságok leírására egy a mikroszkópikus tulajdonságokon felülemelkedő skálaelméletet dolgoztunk ki [17]. Az elmélet kiválóan leírja a rendezetlen mágneses félvezetőkben megfigyelhető anomális magnetorezisztenciát.

A Kondo-ellenállás redukált dimenzióban észlelt csökkenésének valószínű magyarázata a mágneses szennyező spinállapotának felhasadása a spin-pálya kölcsönhatás és a felület együttes hatásaként. Olyan modellt vizsgáltunk, melyben az erős lokális spin-pálya kölcsönhatás következtében a szennyezőn kialakuló, pályakarakterrel rendelkező spin-multiplet és a felület által indukált, Friedel oszcillációt mutató kristálytér kölcsönhatása indukálja a multiplet felhasadását. A hordozó anyag vezetési elektronjait a felület geometriáját egzaktul kezelő tight-binding módszerrel írtuk le. A perturbációszámítás első és másodrendjében kiszámítottuk egy  $d^1$ -konfigurációjú lokális spin energiájának felhasadását a felülettől mért  $d$  távolság függvényében, ami  $1/d^2$ -tel arányosan csökkenő amplitudójú, oszcilláló viselkedést mutatott [31]. Realisztikus becsléseink alapján a vizsgált mechanizmus több nagyságrenddel erősebb a hordozó atomokon fellépő spin-pálya kölcsönhatás által indukált mágneses anizotrópiánál [43].

Renormálási csoport ill. ab initio számításokat ötvözve megmutattuk, hogy egy Au felületen elhelyezkedő Cr trimerben egy egzotikus Kondo állapot jön létre a belső rejtett orbitális kvantumszámoknak köszönhetően, egy többezerszeresére megnövekedett Kondo hőmérséklettel. Számításaink kiváló összhangban vannak Mike Crommie csoportjának (University of California, Berkeley) végzett méréseivel [11].

Vizsgáltuk a spin szennyezések elektron koherenciára való hatását. Ez a probléma a mezoszkópikus fizika egyik legfontosabb kérdése, hiszen az inelasztikus folyamatok korlátozzák a töltéshordozók interferenciáját egy mezoszkópikus rendszerben. Formalizmust dolgoztunk ki, melynek segítségével meghatározható numerikus renormálási módszerrel egy kvantum szennyezőn való szórás inelasztikus hatás keresztmetszete a bejövő elektron energiájának függvényében. A módszert a Kondo problémára alkalmaztuk először [3]. Az inelasztikus szórási tulajdonságok vizsgálatával kapcsolatban vettük észre, hogy szükséges az úgynevezett szinguláris fermi folyadékok fogalmának a bevezetése is [20].

Számos publikációban foglalkoztunk a környezetbe ágyazott spinek relaxációjával. Bozonizáció, skálaegyenletek ill. renormálási csoport segítségével tanulmányoztuk egy rendezett antiferromág-

nesben egy szennyező spin dinamikáját, és megmutattuk, hogy a spinhullámokhoz való erős csatolások effektíve gyengítik egymást, és így a spin még erős disszipáció esetén is koherensen viselkedik [12]. Numerikus renormálási csoport, bozonizáció és skálaanalízis módszerével vizsgáltuk a Bose-Fermi Kondo-modell fázisdiagrammját. Megmutattuk, hogy erős disszipációnál egy fázisátalakulás jön létre, ahol a töltésfluktuációk megszűnnek [19]. A spin alapú félvezető kvantum bitek viselkedésének leírásához elengedhetetlen az elektromágneses fluktuációk a félvezető dotba zárt spinre való hatásának megértése ezekben a rendszerekben. Megmutattuk, hogy az elektromágneses fluktuációk külső mágneses tér jelenléte nélkül is a spin-pálya kölcsönhatásnak köszönhetően egy véletlen Berry fázis megjelenéséhez, és így spin relaxációhoz vezetnek [33]. Ezt az elméletet kiterjesztettük a pályaintegrál formalizmus keretei között és megmutattuk, hogy a szemiklasszikus limeszben a spin-pálya kölcsönhatás segítségével a spint pusztán elektronikusan manipulálni is lehet [48].

Vizsgáltuk kvantum dotokban izolált spinek ill. félvezető elektródákhoz csatolt kvantum dotok dinamikáját is. Megvizsgáltuk, hogy milyen körülmények között lehetséges két csatolt mezoszkópikus kvantum dotban elérni az ún. két szennyezés Kondo kvantum kritikus pontot, amely a kvantum kritikus rendszerek egyik legismertebb példája. Megmutattuk, hogy a kvantum kritikus viselkedést a két dot közötti töltés transzport rontja el, és javaslatot tettünk, hogy a gyakorlatban hogyan lehet ezt elnyomni [25]. Megmutattuk, hogy egy csatolt kis kvantum dot - nagy kvantum dot rendszerben a nagy dot méretének ill. a két dot közötti csatolásnak a függvényében megváltozik a diszkrét energiaszintek spektruma. Egy egzakt alapállapotú tételt konstruáltunk, a gerjesztések kvantumszámait pedig perturbatív eszközökkel ill. MC szimulációval határoztuk meg. Az energiaszintek fejlődése az erősen korrelált állapot felépülését tükrözi [35]. Numerikus renormálási csoport segítségével vizsgáltuk két csatolt kvantum dot optikai vezetőképességét a két csatornás Kondo tartományban [40]. Meghatároztuk az univerzális átcsapási függvényeket ill. annak anomális tulajdonságait. Megvizsgáltuk, hogy a konform térelmélet milyen tulajdonságokat jósol ezekre a mennyiségekre, és kiváló egyezést találtunk. Végezetül összefoglaló munkánk jelent meg kvantum dotok ill. nanostruktúrák transzporttulajdonságai témakörökben [24].

A fentiekén kívül még a következő, a pályázat eredeti célkitűzéseire kevésbé kapcsolódó eredményeink születtek:

Egy szupravezető környezetbe helyezett spin kötött állapotokat ún. Shiba állapotokat hoz létre a gapben. Korábban azonban többnyire csak egyszerűsített modelleket tanulmányoztak, melyek figyelmen kívül hagyták a d-nívó belső struktúráját. Megmutattuk, hogy a d-nívó belső szerkezete többszörös Shiba állapotok létrejöttéhez vezet, továbbá, hogy a spin-felbontott spektrumban a Shiba állapotok markánsan elkülönülnek a szupravezető koherencia csúcstól, és ezért jól detektálhatók [46].

Megmutattuk, hogy a korábbi állításokkal szemben, az erős csatolású tartományban létezik egy kiterjedt hőmérséklettartomány, ahol a kétállapotú rendszerek kétcsatornás Kondo viselkedést mutatnak. Ez a tartomány könnyen elérhető, ha az alagutazó atomon rezonanciaszórás van [15].

Kiterjesztettük Sachdev és Young szemiklasszikus elméletét a Q -állapotú kvantum Potts modellre. Meghatároztuk mind a gapes, mind pedig a kvantum kritikus tartományban a dinamikus korrelációs függvényt, az utóbbi tartományban konform térelméletet alkalmazva. A gapes fázisban megmutattuk, hogy a spin korrelációs függvény diffúziós viselkedést mutat, ami azzal van kapcsolatban, hogy az alacsonyenergiás elmélet  $SU(Q-1)$  szimmetriát mutat [21].

Olyan átlagtér elméletet konstruáltunk, amely  $SP(N)$  spineket használ, és egy nehéz-Fermion rendszernek mind az antiferromágneses-, mind pedig a Fermi folyadék fázisát képes leírni. A formalizmust két szennyezés esetén teszteltük, és megmutattuk, hogy ott képes a kvantum kritikus pont leírására is [27].

Megmutattuk, hogy három komponensű vonzó fermionikus hideg atomi rendszerekben egy baryonikus fázis jelenik meg, ahol a fermionok kötött trionokat (baryonok) képeznek [39,44].

## Összefoglalás

Most lezárult pályázatunk elsősorban az alap kutatásba sorolható, bár a mágneses vékonyréteg kutatás és spintronika területén több, a technológia számára is fontos eredményünk született (pl. komplex vékonyrétegek mágneses anizotrópiája, áram által hajtott spinátfordulás, mágneses félvezetők, stb.) Ezt támasztja alá az is, hogy elméleti kutatásainkat számos kísérleti kutatócsoporttal együttműködésben végeztük. Eredményességünket tükrözi a 48, összesen közel 196 impaktfaktorú, tudományos közlemény, valamint az a mintegy 200 független hivatkozás, melyet ezen munkáinkra már eddig is kaptunk.