

Ph.D Tézisfüzet

**Mágneses szennyezők elméleti vizsgálata alacsony dimenziós rendszerekben**

**Szilva Attila**

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Elméleti Fizika Tanszék

Témavezető: Szunyogh László, egyetemi tanár

2011. május 14.

## Előzmények

A vékonyrétegek és kisméretű nanostruktúrák a nagysűrűségű mágneses adatrögzítés és a spintronikai alkalmazások eszközei. Ezen rendszerek ugyanakkor a szilárdtestfizikai alap kutatások kedvelt célpontjai is, mivel alacsony dimenzióban a kvantummechanika meglepő jelenségei előtérbe kerülnek a klasszikus viselkedéssel szemben. A relativisztikus spin-pálya kölcsönhatás számos esetben meghatározza vagy alapvetően befolyásolja a nanoszerkezetek elektron- és mágneses szerkezetét. A spin-pálya kölcsönhatás felelős többek között a mágneses anizotrópia, az anizotróp mágneses ellenállás, a Kerr- és a Faraday-effektus, a Rashba-effektus, valamint az anomális és spin-Hall effektusok megjelenéséért.

G. Chen és N. Giordano a kilencvenes évek elején megfigyelték, hogy híg mágneses ötvözetekből készült vékonyfilmekben és nanodrótokban a Kondo ellenállás drasztikusan lecsökken [1]. Néhány évvel később Újsághy Orsolya és munkatársai a spin-pálya kölcsönhatás által indukált mágneses anizotrópiával magyarázták a kísérleti megfigyeléseket, miszerint a film felületétől 150-200 Å távolságig a mágneses anizotrópia energia nagyobb, mint  $k_B T_K$ , ahol  $T_K$  Kondo hőmérséklet [2]. Ebben az ún. 'kifagyási' tartományban a Kondo effektusért felelős dinamikus spin-flip szórás blokkolódik a szennyező energia-szintjeinek felhasadása következtében. A mágneses anizotrópia Újsághy és munkatársai által javasolt modelljében egy félig betöltött d nívójú ( $S=5/2$ ) szennyező egy olyan hordozó anyagban helyezkedik el, melyben a vezetési elektronok spin-pálya szórást szenvednek a hordozó mélyen fekvő d valencia elektronjaival történő hibridizáción keresztül (HSO modell).

Később Zaránd Gergely és Szunyogh László a fentitől alapvetően eltérő mechanizmust javasoltak [3]. Feltételezték, hogy a részlegesen (nem félig) betöltött d nívójú mágneses szennyezők lokális spin-pálya kölcsönhatása következményeként jelenik meg a mágneses anizotrópia (LSO modell). A szennyező spin állapotok pálya szabadsági fokkal is rendelkeznek, mely egy töltés Friedel-oszcillációkon keresztül csatolódik a felülethez. A numerikus becslések ellenére nyitott kérdés maradt, hogy melyik mechanizmus felelős a Kondo ellenállás csökkenéséért alacsony dimenziós rendszerekben.

A spin g-tenzor mezoszkópikus rendezetlen szemcsékben észlelt fluktuációit [4] a véletlen mátrix elmélet eszközeivel írták le [5,6]. Ezen munkák motiváltak minket abban, hogy megvizsgáljuk az LSO mechanizmus következtében megjelenő szennyező energiaszint-felhasadásának (mágneses anizotrópia) eloszlását rendezett és rendezetlen arany nanoszemcsékben.

A tömbi hordozó anyagba helyezett mágneses szennyezők közötti Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) kölcsönhatás mára a tankönyvi ismeretek részét képezi [7]. Az

elmélet szerint az oszcilláló kölcsönhatás amplitúdója  $1/R^3$  szerint cseng le, ahol  $R$  a szennyezők közötti távolság, és a periódus hosszának reciproka a Fermi-felület extrémális vektorainak hosszával egyezik meg. Ugyanakkor spin-pálya kölcsönhatásnak a kicserélődési kölcsönhatásra gyakorolt hatását eddig nem vizsgálták, ahogyan az RKKY kölcsönhatás részletes, összehasonlító vizsgálata sem történt meg különböző fémek és felületek esetében.

Számos fémfelületen, pl. a nemesfémek (111) felületén, Shockley-típusú felületi állapotok két dimenziós elektrongázt alkotnak [8]. Ezen állapotok energiatartománya a tömbi anyag sávszerkezetének relatív energiájában esik. A spin-pálya csatolás következtében a felületi állapotok diszperziós relációja felhasad, amit Bychkov-Rashba (BR) felhasadásként ismerünk. A BR felhasadás leírása és kontrollálása alapvető jelentőségű a spintronikai alkalmazásokban. Arany (011) felületen és néhány felületi fémötvözetben mint Bi/Ag(111) vagy Bi/BaTiO<sub>3</sub>(001), a numerikus számítások azt jósolták, hogy a BR felhasadás anizotróp a reciprokterben, ugyanakkor ezen effektus gondos elméleti vizsgálatára eddig nem került sor.

### **Célkitűzések**

Ph.D munkám fő célkitűzése az volt, hogy alacsony dimenziós rendszerekbe ágyazott mágneses szennyezőkre vonatkozóan a spin-pálya kölcsönhatás által indukált jelenségeket tanulmányozzam. A vizsgálandó problémakör szükségessé tette a kvantum szennyező modellek illetve a valencia és vezetési elektronok sávszerkezetét realiztikusan modellező számítások összekapcsolását, mind felületek, mind pedig nanoszemcsék esetében. E cél érdekében a szoros kötésű közelítés keretein belül Green függvény technikát (TB-GF) alkalmaztam, ami lehetővé tette a felület félvégtelen geometriájának egzakt kezelését, valamint a spin-pálya kölcsönhatás nemperturbatív kezelését is.

A TB-GF módszer használatával lehetővé vált a HSO és LSO modellek kvantitatív összehasonlítása réz és arany fémfelületek esetében. Reményeink szerint az alkalmazott módszerrel eldönthető, mely mechanizmus áll azon felület indukálta mágneses anizotrópia hátterében, amivel a redukált dimenzióban tapasztalt Kondo ellenállás anomáliát magyarázhatjuk.

Az LSO modell keretein belül a geometriailag rendezett és rendezetlen mezoszkopikus arany nanoszemcsékbe véletlenszerűen beágyazott szennyezők mágneses anizotrópiáját szándékoztam vizsgálni valóstérbeli szoros kötésű közelítésű számolással. Ezen munka végső célja a mágneses anizotrópia eloszlás esetleges univerzalitásának vizsgálata volt.

A TB-GF módszer lehetőséget biztosít tömbi anyagban vagy felület közelében két szennyező kicserélődési kölcsönhatásának számítására. Terveim között szerepelt annak vizsgálata, hogy a hordozó anyag atomjainak spin-pálya kölcsönhatása miként befolyásolja az RKKY kölcsönhatást. Ezen jelenséghez kapcsolódóan célként tűztem ki, hogy megvizsgálom az arany (111) és (110) felületeken található kétdimenziós elektronállapotok Bychkov-Rashba felhasadását és kvantitatív becslést adok a felhasadás anizotrópiájának nagyságára.

## Új tudományos eredmények

1. Analitikus kifejezést vezettem le egy mágneses szennyező  $K(d)$  anizotrópia konstansára a HSO és LSO modellekben egyaránt, valamint meghatároztam ezen kifejezések alakját a felülettől nagy  $d$  távolságra. Az aszimptotikus analízis eredményeként kapott oszcilláló  $K(d)$  függvényt periodushosszát azonosítottam a tömbi hordozó Fermi-felületének valamely extrémális vektorának hosszával és az oszcilláció amplitúdójára mindkét modellben  $1/d^2$  szerinti lecsengés adódott [Publikációk: 1,2].
2. A TB-GF technikát alkalmazva kiszámoltam az anizotrópia konstansok értékét egy a réz és arany (001) felületének közelében található mágneses szennyező esetére a  $d$  távolság függvényében. Numerikus eredményeim megerősítették a  $K(d)$  alakjára analitikusan levezetett kifejezéseket. A HSO modell esetén  $K(d)$  amplitúdója jóval a Kondo hőmérséklet alatt maradt, szemben az LSO modellel, ahol az anizotrópia energia nagyobb vagy összemérhető a Kondo hőmérséklettel a felülettől  $d \sim 100$  Å távolságon belül. Ezek alapján arra a következtetésre jutottam, hogy az LSO mechanizmus jelentős szerepet játszik a Kondo ellenállás vékony filmekben tapasztalt csökkenésében [Publikációk: 1,2].
3. A véletlen mátrix elmélet módszereit használva elvégeztem a rendezetlen arany nanoszemcsékből álló minták energiaszint-statisztika analízisét. Megmutattam, hogy a sajátenergia szinttávolság eloszlások kielégítő numerikus pontossággal leírhatók univerzális függvénnyel. Az eloszlásfüggvény az arany atomokon lévő spin-pálya kölcsönhatás kikapcsolása esetén az ortogonális Gauss sokaságnak (GOE) megfelelő Wigner-Dyson eloszlás, míg spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében a szimplektikus

(GSE) sokaságnak megfelelő eloszlás jellemzi az energia-szinttávolság statisztikát. [publikáció előkészületben].

4. Megmutattam, hogy az LSO mechanizmus esetén a mágneses anizotrópiát általánosan egy hat-paraméteres  $4 \times 4$ -es önadjungált mátrix írja le. Levezettem az anizotrópia mátrix szerkezetét, amit a numerikus eredmények igazoltak. Az anizotrópia mátrixot kifejtettem a kvadrupól operátorok bázisán és szimmetrikus aranyzemcsék esetén a hat-dimenziós anizotrópia paraméterterben rendeződést tapasztaltam egy adott héj rácshelyein numerikusan számolt paraméterértékek vonatkozásában. Dupla-pontcsoport reprezentációt alkalmazva sikerült bizonyítanom az anizotrópia paraméterek között talált szimmetria összefüggéseket [publikáció előkészületben].
5. Egy T-mátrix technikát kombinálva a TB módszerrel megvizsgáltam az RKKY kölcsönhatást két mágneses szennyező között réz és arany tömbi környezetben. Numerikus eredményeim 1 %-os pontosságon belül igazolták, hogy az oszcilláció amplitúdója  $1/R^3$ -szerint csökken, ahol  $R$  a szennyezők közötti távolság, másrészt az oszcillációk frekvenciája megegyezik a Fermi felület megfelelő extrémális vektorának hosszával. Megmutattam, hogy arany esetén az erős spin-pálya kölcsönhatás következtében a kölcsönhatási energia amplitúdója jelentősen csökkent. A jelenség fizikai magyarázatának hátterében az spin-pálya kölcsönhatás miatt fellépő „spin-keveredés” áll [Publikációk: 4,5].
6. A TB-GF módszer segítségével részletes számításokat végeztem az arany (110) és (111) felületek Shockley-típusú felületi elektronállapotainak diszperziós relációira. Analitikus  $k \cdot p$  perturbáció számítás valamint első elvű számolások eredményeivel összhangban megmutattam, hogy arany (110) felület esetén a Bychkov-Rashba felhasadás  $k$ -ban elsőrendben anizotróp. Továbbá megmutattam, hogy arany (111) felületen ( $C_{3v}$  szimmetria) is anizotróp a BR felhasadás, de ennek leírásához az effektív Hamilton mátrix  $k$ -ban (legalább) harmadrendű közelítését kell venni [Publikáció: 3 és további publikáció előkészületben].

## Referenciák

- [1] Guanlong Chen and N. Giordano, Phys. Rev. Lett. **66**, 209 (1991)
- [2] O. Újsághy, A. Zawadowski, and B. L. Györffy, Phys. Rev. Lett. **76**, 2378 (1996); O. Újsághy and A. Zawadowski, Phys. Rev. B **57**, 11598 (1998); O. Újsághy, L. Borda, and A. Zawadowski, J. Appl. Phys. **87**, 6083 (2000)
- [3] L. Szunyogh, G. Zaránd, S. Gallego, M. C. Muñoz, and B. L. Györffy, Phys. Rev. Lett. **96**, 067204 (2006).
- [4] J.R.Petta and D.C. Ralph: Physical Review Letters, **89**, 156802 (2002).
- [5] P.W. Brouwer, X. Waintal, and B.I. Halperin: Physical Review Letters, **85**, 369 (2000).
- [6] K.A. Matveev, L.I. Glazman, and A.I. Larkin: Physical Review Letters, **85**, 2789 (2000).
- [7] M.A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954); T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956); K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- [8] S. LaShell, B. A. McDougall and E. Jensen, Phys. Rev. Lett. **77**, 3419 (1996).

## Saját közlemények

- [1] A. Szilva, S. Gallego, and M. C. Munoz, B.L. Györffy, G. Zarand, L. Szunyogh: Friedel-oscillations-induced surface magnetic anisotropy, Phys. Rev. B **78**, 195418 (2008).
- [2] A. Szilva, L. Szunyogh, G. Zarand, S. Gallego, and M. C. Munoz: Surface-induced magnetic anisotropy of impurities, IEEE Trans. Magn. **44**, 2772 (2008).
- [3] E. Simon, A. Szilva, B. Ujfalussy, B. Lazarovits, G. Zarand and L. Szunyogh: Anisotropic Rashba splitting of surface states from the admixture of bulk states: Relativistic ab initio calculations and kp perturbation theory, Phys. Rev. B **81**, 235438 (2010).
- [4] E. Simon, B. Ujfalussy, A. Szilva and L. Szunyogh: Anisotropy of exchange interactions between impurities on Cu(110) surface, Journal of Physics: Conference Series **200**, 032067 (2010).
- [5] Exchange interaction between magnetic adatoms on surfaces of noble metals, E. Simon, B. Ujfalussy, B. Lazarovits, A. Szilva, L. Szunyogh, G.M. Stocks, arxiv:1102.1656, közlésre elfogadva a Phys. Rev. B folyóiratnál