

Számítógépes Mágnesség és Szupravezetés

kutatási konzorcium

BME TTK Elméleti Fizika Tanszék

Szunyogh László

Udvardi László

Oroszlány László (ELTE)

Doktorjelöltek:

Nyári Bendegúz Tamás (ELKH TKI)

Nagyfalusi Balázs (WFK)



Wigner FK SzFI Elméleti Szilárdtestfizika Osztály

Újfalussy Balázs

Palotás Krisztián

Rózsa Levente

Lászlóffy András

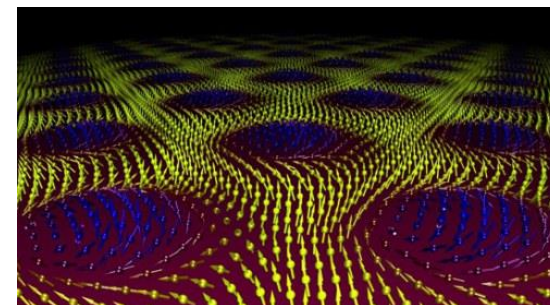
Kucska Nóra



Számítógépes Mágnesség és Szupravezetés

Kutatási profil

- **Első elvű (kvantummechanikai) elektronszerkezet számítások**
Főként saját fejlesztésű programok: Green-függvényes technika
Anyagspecifikus számolások → mélyebb megértés és predikciók
- **Spin-modell paraméterek első elvekből**
Monte-Carlo és spin-dinamika szimulációk
- **Komplex mágneses szerkezetű rendszerek**
Tömbi mágnesek, mágneses vékonyrétegek, mágneses nanostruktúrák
Mágneses skyrmionok
Spinhullám gerjesztések, mágneses fázisátalakulások
- **Hibrid mágneses – szupravezető nanoszerkezetek**
Többrétegű szupravezető heterostruktúrák felületi állapotainak meghatározása ab initio számolásokkal
Majorana alapú qubit szimulációja topologikus szupravezetőkben
Egzotikus állapotok mágneses, illetve topologikus szupravezetőkben
Pásztázó alagútmikroszkópos kísérletek elméleti szimulációja



Négyspin-kölcsönhatások felületi atomi struktúrákban

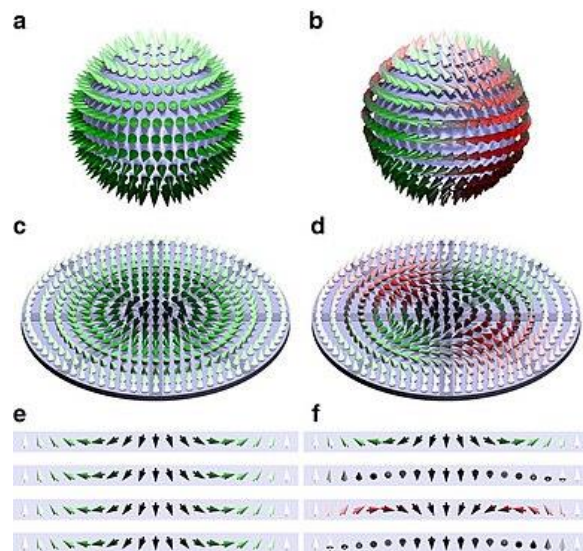
Témavezető: Nyári Bendegúz Tamás

nyari.bendeguz@ttk.bme.hu

Konzulens: Szunyogh László

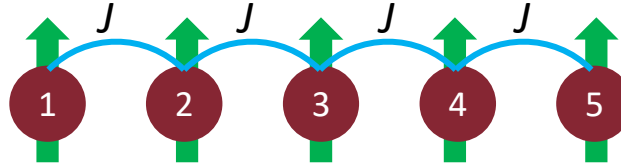
BME TTK Elméleti Fizika Tanszék

Témakiírás: <http://ttk.bme.hu/node/7292>



Spin-kölcsönhatások

Legegyszerűbb eset: Ising-modell



$$E_i = J s_i s_{i-1} + J s_i s_{i+1}$$

Kölcsönhatás paraméter, skalár
 $J > 0$ FM, $J < 0$ AFM

Spin változók, skalár
+1 fel spin, -1 le spin

s skalár, megszorított spin irányok(fel/le)
 J skalár, izotrop kölcsönhatás
Párvkölcsönhatás, kétspin-kölcsönhatás
Első szomszéd kölcsönhatás
1 dimenziós



s vektor, tetszőleges spin irány
 J tenzor, királis és anizotrop kölcsönhatások
Többspin-kölcsönhatások
Tetszőleges szomszéd kölcsönhatások
Tetszőleges dimenzió (lánc, felület, tömb)

Kevés esetben alkalmazható realiztikus anyagokra.

A legtöbb mágneses anyag mágneses szerkezetét leírja.

Hogyan számoljunk kölcsönhatásokat?

Cél: Négyspin-kölcsönhatások meghatározása

Az energia felület bonyolult függvénye a spin változóknak



Különböző konfigurációk mellett *ab initio* sávenergia számolások



A kölcsönhatási paraméterek illesztése a kapott energiákra.

A szakdolgozó feladat:

Sávenergia számolások futtatása szuperszámítógépe a rendelkezésre álló programkód segítségével egyszerű geometriákra.

Különböző konfiguráció választási módszerek tesztelése, összehasonlítása.

A konfigurációk generálása és a kölcsönhatás paraméterek illesztése a rendelkezésre álló MATLAB scriptekkel (fejlesztette: Rózsa Levente)

Irodalmi áttekintés

Skymion képződés a Fe/Ir(111) felületen az izotrop négyspin-kölcsönhatás következtében.

PRL 117, 207202 (2016)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
11 NOVEMBER 2016

Skymions at the Edge: Confinement Effects in Fe/Ir(111)

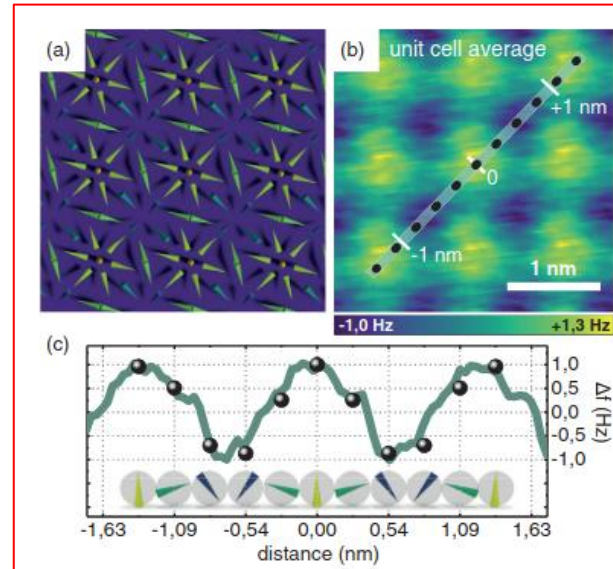
Julian Hagemester, Davide Iaia,[†] Elena Y. Vedmedenko, Kirsten von Bergmann,
André Kubetzka,^{*} and Roland Wiesendanger

Department of Physics, University of Hamburg, D-20355 Hamburg, Germany

(Received 16 June 2016; published 10 November 2016)

To understand these experimental findings, we employ atomistic Monte Carlo simulations with a single-spin Metropolis update mechanism. The magnetic monolayer Fe/Ir(111) can be described by the Hamiltonian

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{ij} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - \sum_{ij} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \\
 & - \sum_{ijkl} K_{ijkl} [(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \mathbf{S}_l) + (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_l)(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_k) - (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_k)(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_l)] \\
 & - \sum_{ij} B_{ij} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)^2 + K_{\perp} \sum_i (S_i^z)^2
 \end{aligned} \quad (1)$$



Fe lánc spin-spirál alapállapotának leírása Re(0001) felületén négyspin királis kölcsönhatásokkal.

PHYSICAL REVIEW B 99, 184430 (2019)

Magnetic structure of monatomic Fe chains on Re(0001): Emergence of chiral multispin interactions

A. Lászlóffy,^{1,*} L. Rózsa,² K. Palotás,^{1,3,4} L. Udvardi,^{1,5} and L. Szunyogh^{1,5}

¹Department of Theoretical Physics, Budapest University of Technology and Economics, Budafoki út 8., HU-1111 Budapest, Hungary

²Department of Physics, University of Hamburg, D-20355 Hamburg, Germany

³Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Center for Physics, Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 49, H-1525 Budapest, Hungary

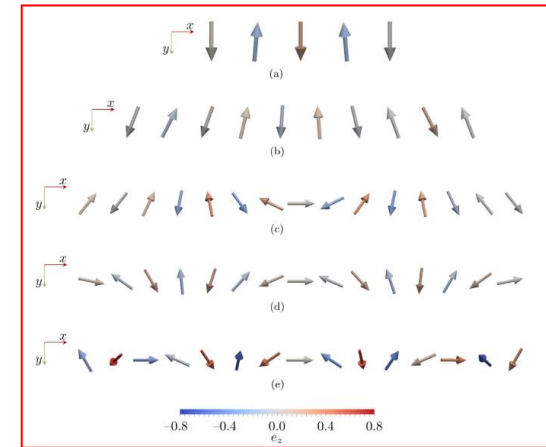
⁴MTA-SZTE Reaction Kinetics and Surface Chemistry Research Group, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary

⁵MTA-BME Condensed Matter Research Group, Budapest University of Technology and Economics, Budafoki út 8., HU-1111 Budapest, Hungary

(Received 15 January 2019; revised manuscript received 21 March 2019; published 22 May 2019)

Changing from the two-spin model in Eq. (1) to the model containing also four-spin interactions in Eq. (19) naturally modifies the interpretation of the chiral interaction energies obtained from the torque method,

$$\begin{aligned}
 D_{i,j}^{\alpha} = & D_{ij}^{\alpha} + D_{ijj}^{\alpha} + \sum_{k \neq \{i,j\}} D_{kij}^{\alpha} \\
 & - \sum_{k \neq \{i,j\}} D_{kjj}^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l \neq \{i,j\}} D_{klj}^{\alpha};
 \end{aligned} \quad (26)$$



Mágneses kölcsönhatások számítása rendezetlen ötvözetekben

Témavezető: Szunyogh László
szunyogh.laszlo@ttk.bme.hu

Témakiírás: <http://www.ttk.bme.hu/node/7322>

A mágneses kölcsönhatások hangolásának egy természetes lehetősége a különböző atomok ötvözése: vagy a kémiai összetétel (koncentráció) vagy az atomok rácson elfoglalt pozíciója változik. A gyakorlatban használt mágnesek túlnyomórészt ötvözetek.



Alnico patkómágnes

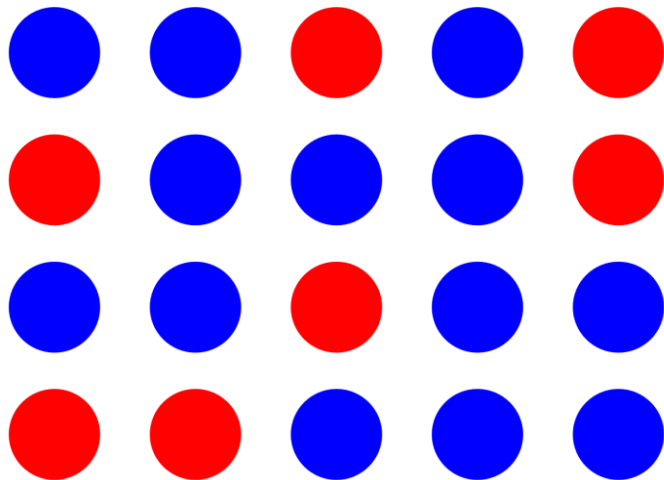


NdFeB permanens
mágnes

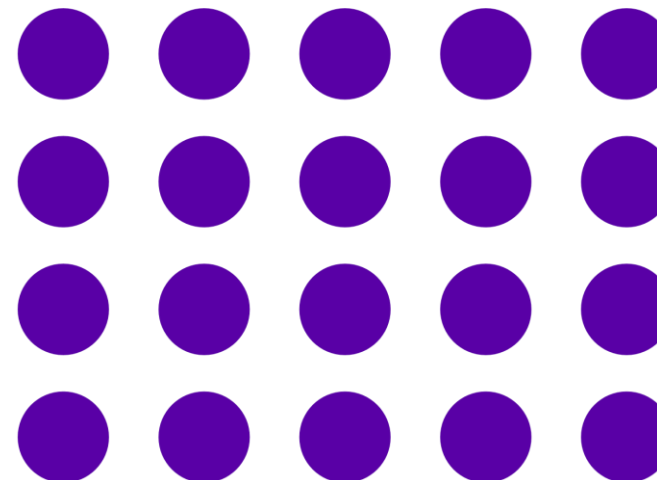


Permalloy $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$

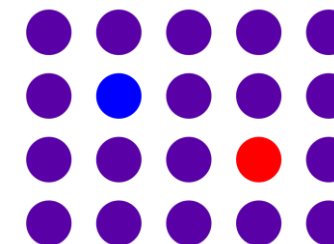
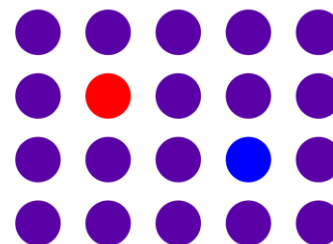
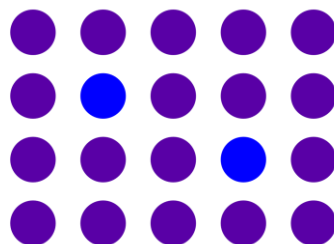
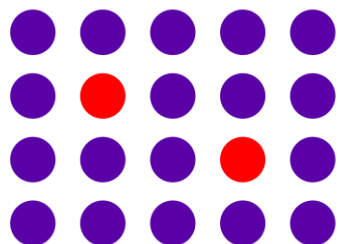
Kétféle atom N rácshelyen:
2N konfiguráció



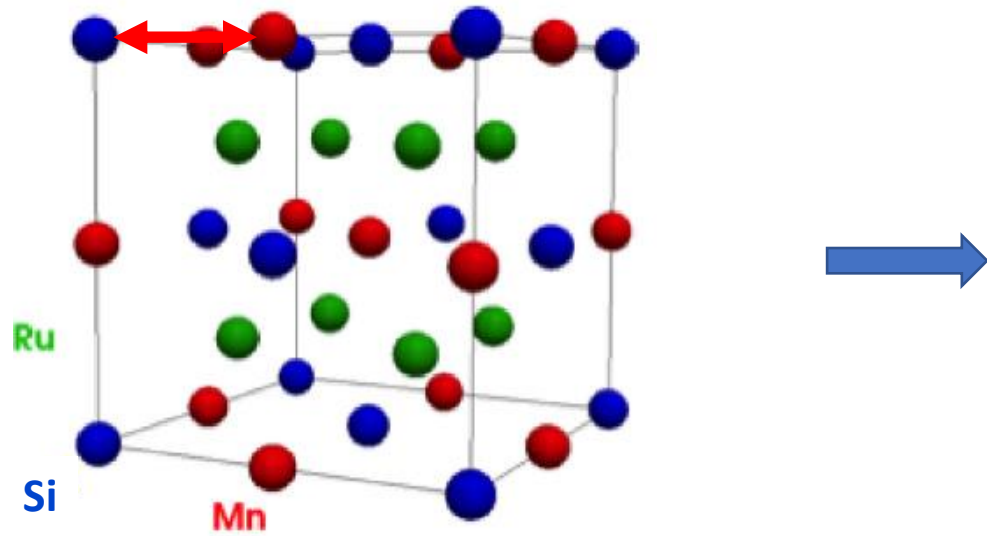
Átlagolás:
Koherens potenciál közelítés (CPA)



Amit számolni tudunk: két atom közötti mágneses kölcsönhatás az átlagos háttérben

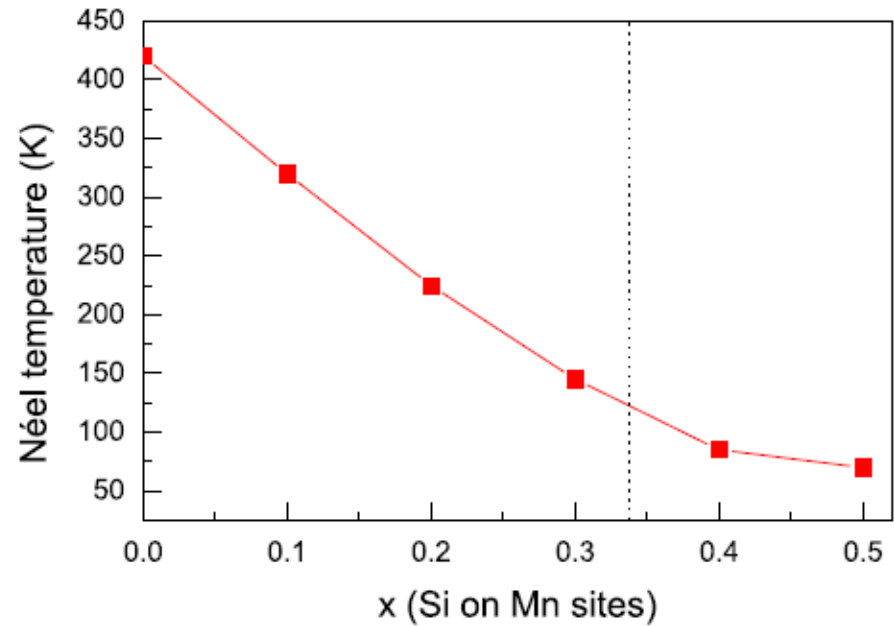


Egy példa: rendezetlen $\text{Ru}_2(\text{MnSi})$ ötvözet



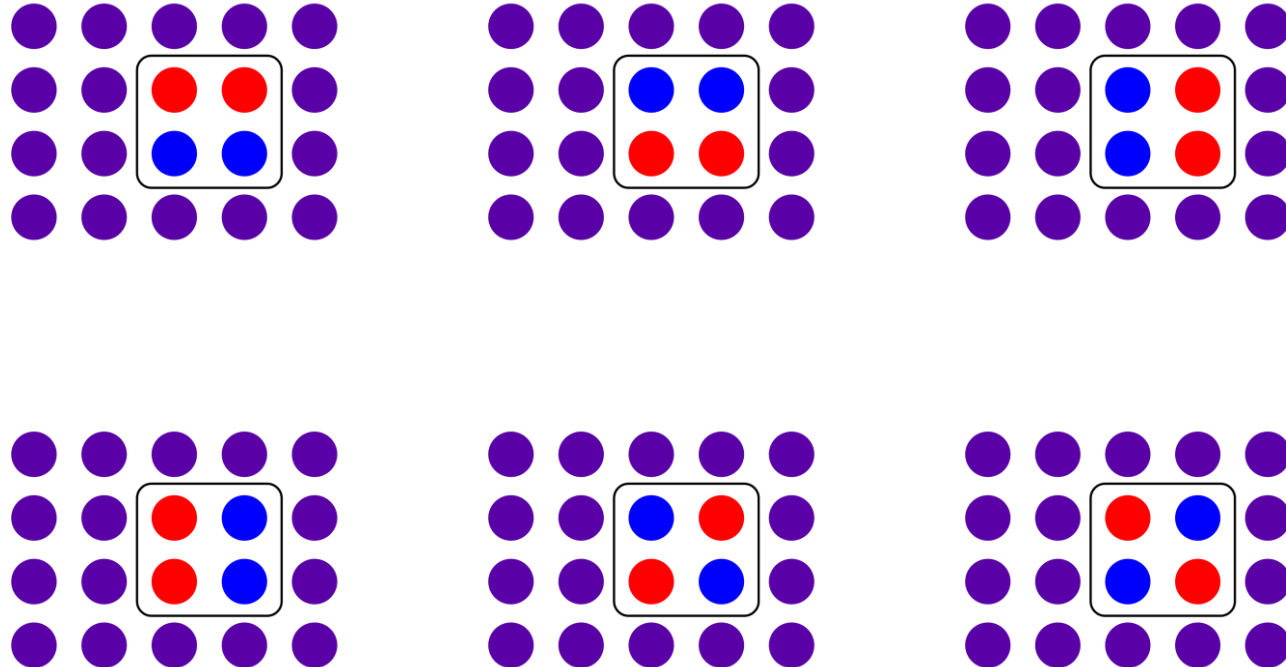
Az Mn és Si atomok véletlenszerű kicserélődése megváltoztatja a Mn atomok közötti mágneses kölcsönhatást

Az antiferromágnes-paramágnes átalakulás hőmérséklete



Egy érdekes és fontos kérdés: Hogy függenek a kölcsönhatások a különböző atomok térbeli elhelyezkedésétől, azaz a rövidtávú rendezettségétől?

Négy rácshelyen két-két különböző atom: hat lehetőség

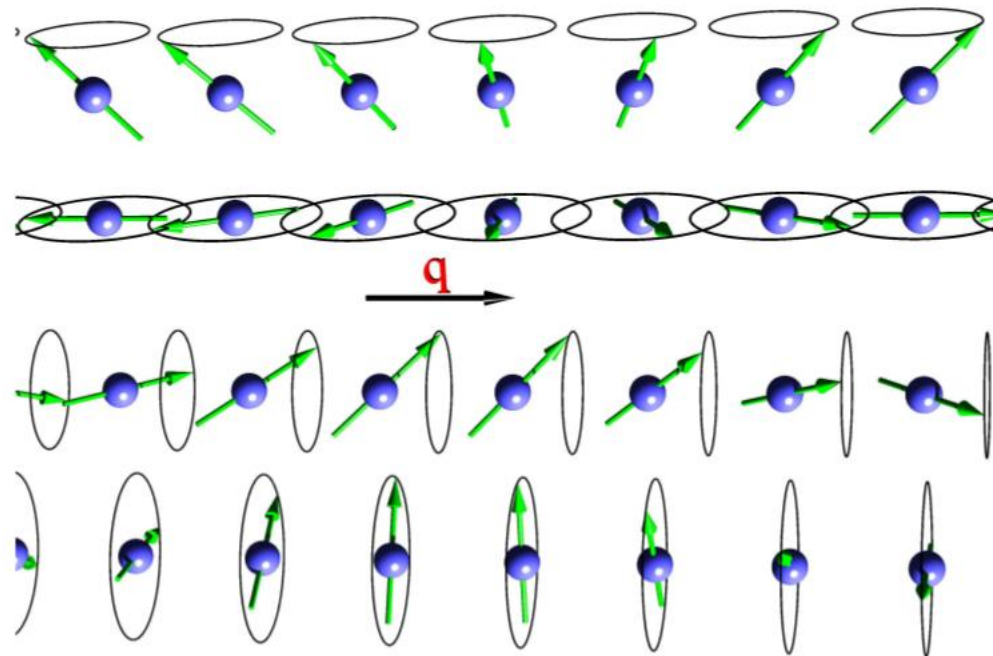


Két kiszemelt atom közötti kölcsönhatás konfigurációs átlaga mennyiben különbözik az elkent (CPA) háttérben számított kölcsönhatástól?

Spin-spirál állapotok atomi vastagságú vékonyrétegekben

Témavezető: Szunyogh László
szunyogh.laszlo@ttk.bme.hu

Témakiírás: <http://www.ttk.bme.hu/node/7323>



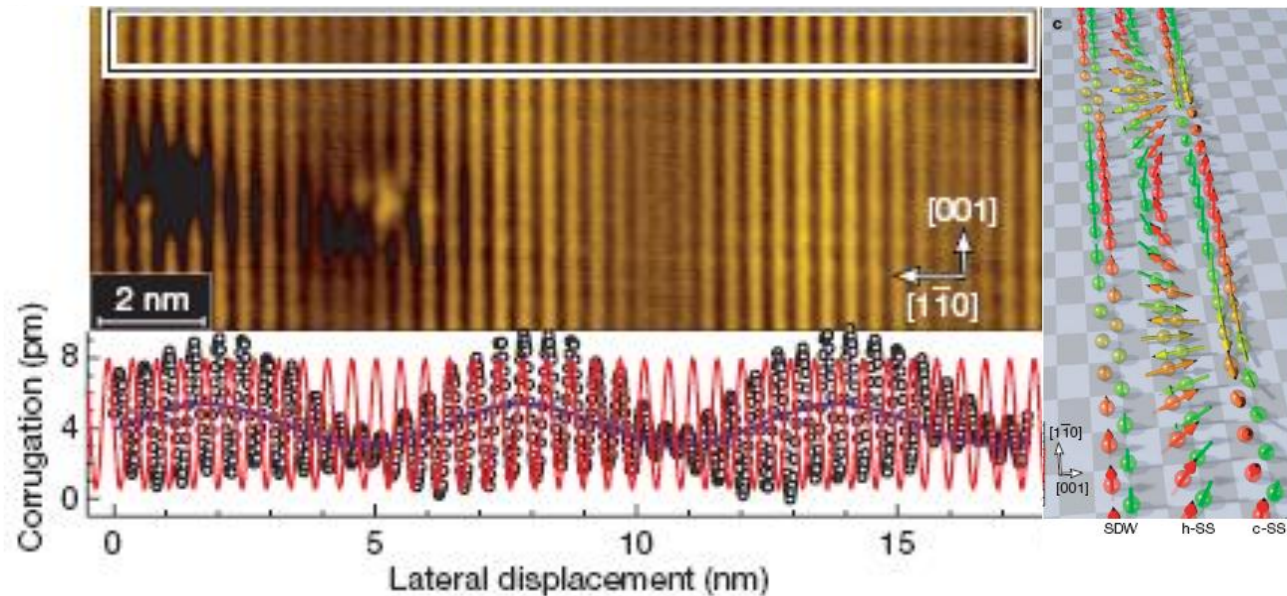
pl.
Dy, Ho
Mn₃Sn

<https://www.flapw.de/MaX-6.0/documentation/spinSpirals/>

Egyatom vastagságú Mn réteg W(110) felületen

M. Bode et al., Nature **447**, 193 (2007)

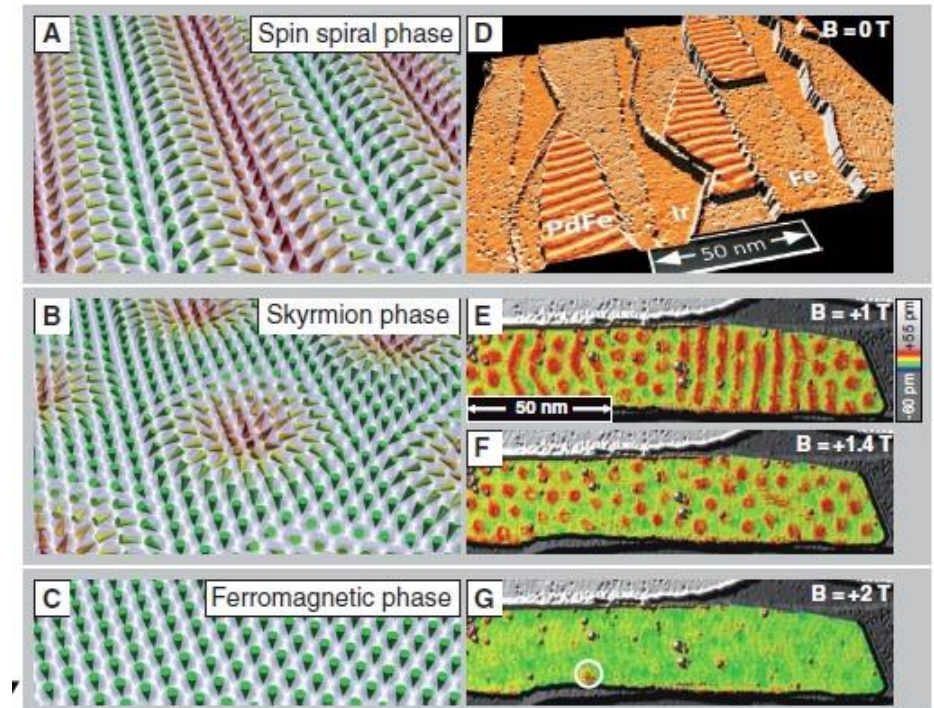
Spin-polarizált pásztázó alagútelektron mikroszkópos kép



- Antiferromágneses szerkezet 12 nm hullámhosszú Néel típusú spin-spirál modulációval
- DM kölcsönhatás ,spin-forgató' hatása

PdFe kettős réteg Ir(111) felületen

N. Romming et al., Science **341**, 636 (2013)

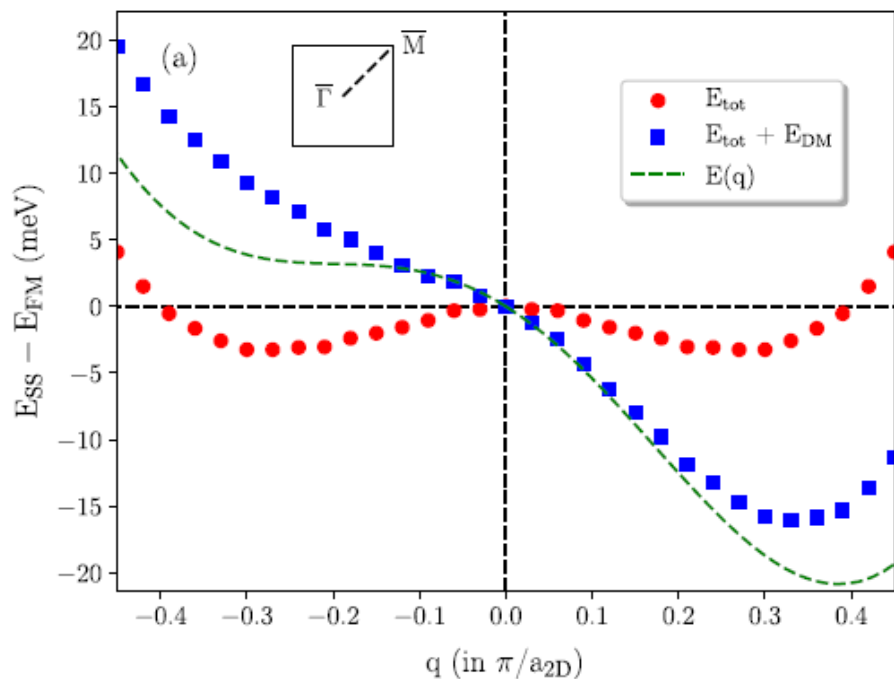


Mágneses tér hatására mágneses skymionok stabilizálódnak

A spin-spirál állapotok számítása: együttes eltolási és spin-forgatási szimmetria \rightarrow általánosított Bloch-tétel

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ u_{\mathbf{k}}^{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \rightarrow \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}/2)\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}/2)\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Egy számolás Mn/W(001) monorétegre
(E. Simon and L. Szunyogh,
Phys. Rev. B 100, 134428 (2019))



Feladatok és célok:

- Az elmélet megismerése
- A spin-spirál kód használatának elsajátítása
- Fe/Ta(110) monoréteg kísérletileg mért spin-spirál alapállapotának elméleti igazolása

Távlatilag:

Kiterjesztés egydimenziós spinláncra és szupravezető állapotokra

Köszönjük a figyelmet!