

Mágneses nanorészecskék elméleti vizsgálata

Balogh László, Palotás Krisztián, Udvardi László,
Szunyogh László

BME Elméleti Fizika Tanszék

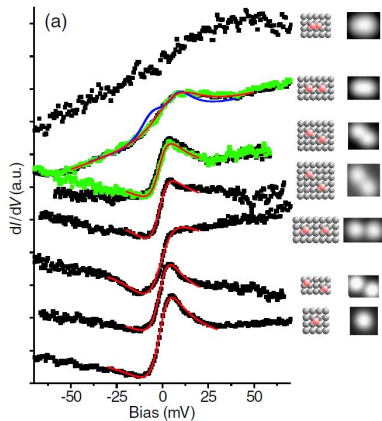
Fizikus Doktoranduszok Konferenciája,
Balatonfenyves, 2012. június 15–17.

Vázlat

- 1 Bevezető
- 2 Klasszikus Heisenberg-modell
- 3 Cr trimer

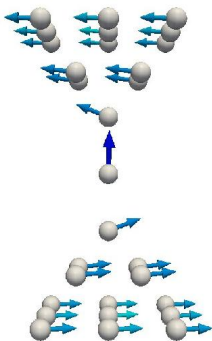
Mágneses nanoszerkezetek

- Fémfelületre helyezett mágneses nanoklaszterek vizsgálata:
 - Spinpolarizált STM
 - Pásztázó alagútspektroszkópia
 - Példa:
 - P. Wahl *et al.* Phys. Rev. Lett. **98**, 056601 (2007)
- Nanokontaktus előállítás: *electromigrated break junction*
 - dI/dV spektroszkópia



Dimenzió és szimmetria szerepe

- Tömbi anyag
- Vékonyrétegek
- Nanodrótok
- Nanoklaszterek


 $\mu_{\text{spin}} (\mu_B)$


Példa: Co nanokontaktus atomi spin-mágnességei:

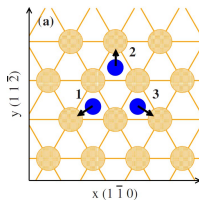
3. layer			2. layer		1. layer	central atom
1.85	1.78	1.85	1.91	1.91		
1.78	1.67	1.78			1.93	2.35
1.85	1.78	1.85	1.91	1.91		

Felületen: $1,82 \mu_B$, tömbben: $1,67 \mu_B$.

<http://arxiv.org/abs/1205.4579>

Klasszikus Heisenberg-modell

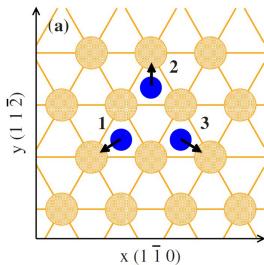
- Egyszerű példa: 3 spin, egyforma, izotróp csatolások:



$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_3 + \vec{\sigma}_3\vec{\sigma}_1) = \\ &= \frac{1}{2}J(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_3)^2 - \frac{3}{2}J\end{aligned}$$

- Ferromágnes ($J < 0$): $\vec{\sigma}_1 \parallel \vec{\sigma}_2 \parallel \vec{\sigma}_3$, kollineáris alapállapot
- Antiferromágnes ($J > 0$): $\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_3 = \vec{0}$, sík, nem-kollineáris alapállapot, $\angle(\vec{\sigma}_i, \vec{\sigma}_j) = 120^\circ$

Bonyolultabb klasszikus Heisenberg-modell



A. Antal *et al.*, Phys.
Rev. B **77**, 174429 (2008)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{\sigma}_i J_{ij}^S \vec{\sigma}_j + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\sigma}_i \times \vec{\sigma}_j) + \\
 & + \sum_i \vec{\sigma}_i K_i \vec{\sigma}_i + \\
 & + Q \left[(12)^2 + (13)^2 + (23)^3 \right] + \\
 & + 2Q' \left[(12)(13) + (21)(23) + (31)(32) \right]
 \end{aligned}$$

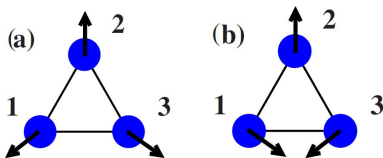
Az alapállapot meghatározásához a Landau–Lifshitz–Gilbert-egyenletet oldották meg a fenti Hamilton-függvénnyel, illetett paraméterekkel.

Kiralitás

Síkbeli konfigurációkra:

$$E_{\text{DM}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{\sigma}_i \times \vec{\sigma}_j) = \frac{3\sqrt{3}}{2} D_z \kappa_z,$$

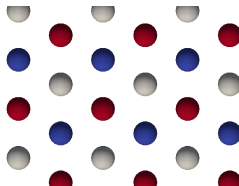
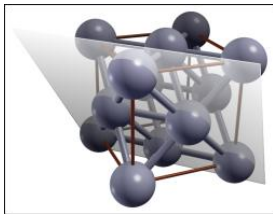
ahol $\vec{\kappa} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{(ij)} \vec{\sigma}_i \times \vec{\sigma}_j$ az ún. *kiralitásvektor*.



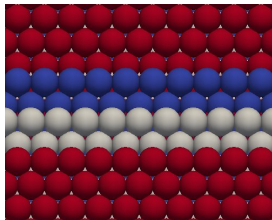
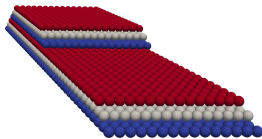
A két különböző kiralitású állapot között $\Delta E = 5.04$ meV energiakülönbség van, az alapállapot: **(a)** $\kappa_z = -1$.

A. Antal *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 174429 (2008)

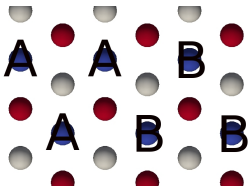
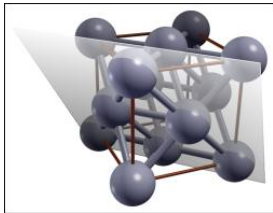
Lapcentrálrt köbös rács (111) felülete



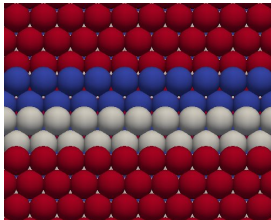
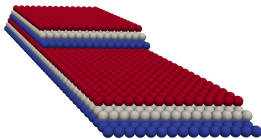
http://www.xcrysden.org/img/rh_fcc_111plane-200.png



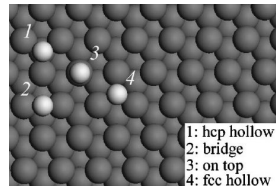
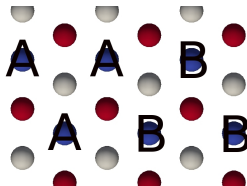
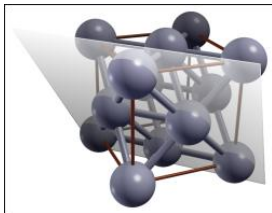
Lapcentrálrt köbös rács (111) felülete



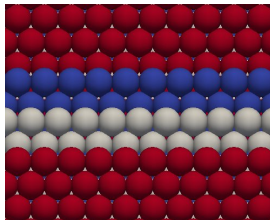
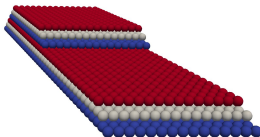
http://www.xcrysden.org/img/rh_fcc_111plane-200.png



Lapcentrált köbös rács (111) felülete



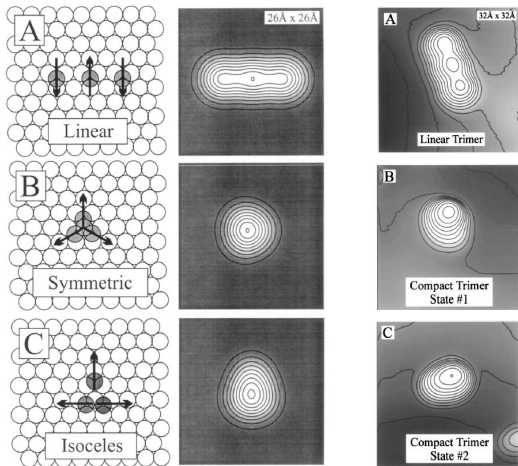
http://www.xcrysden.org/img/rh_fcc_111plane-200.png



H. J. Gotsis *et al.*, Phys. Rev. B **73**, 014436 (2006)

Mindösszesen 8
különböző
klaszterpozíció.

Cr trimer STM kísérletben

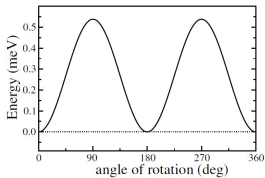


S. Uzdin *et al.*, Europhys. Lett. **47**, 556 (1999)

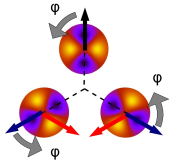
T. Jamneala *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 256804 (2001)

Körülmények: $T = 7\text{ K}$,
 ultravákuum,
 felbontóképesség $\approx 5\text{ Å}$.
 STM dI/dV spektrumokat
 mérve a trimereken, kétféle
 jelalapot találtak: az egyik
 típus esetén nem
 tapasztaltak rezonanciát a
 Fermi-energián, a másik
 típus esetén
 $T_K = 50 \pm 10\text{ K}$ Kondo
 hőmérséklettel
 Fano-jelalapot
 tapasztaltak.

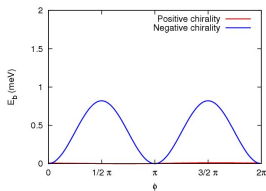
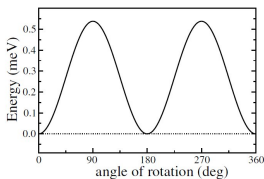
Globális forgatás a z tengely körül



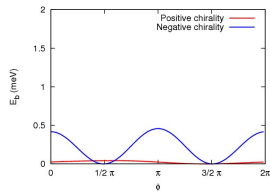
G. M. Stocks *et al.*, Prog.
Mat. Sci. **52**, 371 (2007)



Globális forgatás a z tengely körül



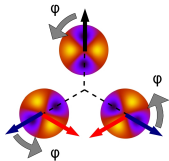
„A” pozíció



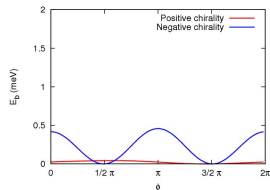
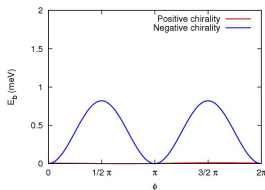
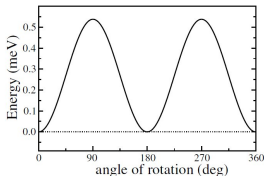
„B” pozíció

G. M. Stocks *et al.*, Prog. Mat. Sci. **52**, 371 (2007)

Hová lett az anizotrópia?



Globális forgatás a z tengely körül

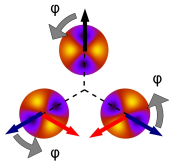


G. M. Stocks *et al.*, Prog. Mat. Sci. **52**, 371 (2007)

„A” pozíció

„B” pozíció

Hová lett az anizotrópia?



- $-3 \cos(2\phi)$
- $-\cos(2\phi) - \cos(2\phi + 120^\circ) - \cos(2\phi + 240^\circ) = 0$

Summary, future plans

Köszönöm a figyelmet!

További tervek

- Cr trimerek alaposabb tanulmányozása
- Nagyobb Cr klaszterek arany (111) felületen
- Cr egyréteg arany (111) felületen