

Magyar Tudományos Akadémia doktora értekezés

Vékonyrétegek mágneses anizotrópiájának elméleti vizsgálata

Szunyogh László

a fizikai tudomány kandidátusa
egyetemi docens

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Természettudományi Kar

Fizikai Intézet, Elméleti Fizika Tanszék

2000.

Tartalomjegyzék

1	Előzmények, célkitűzés	3
1.1	Az értekezés szerkezete és témája	8
2	Az alkalmazott módszerek	10
2.1	A spin-polarizált relativisztikus KKR	10
2.2	Az árnyékolt KKR módszer	13
2.3	2D transláció invariancia	14
2.4	A CPA réteges rendszerekben	17
2.5	A MAE számítása	19
3	A mágneses anizotrópia tanulmányozása egyszerűbb rendszerekben	22
3.1	Au(001)/Fe	22
3.2	Au(111)/Co/Au	25
3.3	Cu(001)/Co/M	29
4	A Cu(001)/Fe rendszer	34
4.1	A ferromágneses fázis	36
4.1.1	A határréteg hibridizáció hatása	37
4.1.2	A szubsztrát spin-pálya kölcsönhatásának szerepe . . .	41
4.1.3	A határréteg keveredés hatása	42
4.2	Az antiferromágneses fázis	43
4.3	Cu(001)/(Fe _x Co _{1-x})	50
5	A Cu(001)/Ni rendszer	56
5.1	Az inverz reorientáció	57
5.2	Cu(001)/Ni/Co: a normál reorientáció	62
6	További vizsgálatok	70
6.1	A felület közeli szennyeződés mágneses anizotrópiája	70
6.2	A MAE oszcilláló viselkedése vékonyrétegekben	76

6.3	Ferromágnesek Bloch-falának elektron elmélete	80
7	Összefoglalás	88
	Köszönetnyilvánítás	92
	Irodalomjegyzék	93
	Saját publikációk jegyzéke	98

1. fejezet

Előzmények, célkitűzés

A szilárdtest felületek, határrétegek ill. vékonyrétegek kutatása az elmúlt két évtizedben szinte páratlan fejlődésen ment keresztül. Szerepet játszott ebben az a tény, hogy egyre kifinomultabb kísérleti módszerekkel, minőségében és összetételében egyre tisztábban karakterizálható mintákat sikerült előállítani és ezáltal a háromdimenziós tömb állapotú anyagban lejátszódó jelenségek vizsgálatáról a figyelem mindjobban a kétdimenziós struktúrák felé irányult. Nyilvánvaló igény alapozta meg ezt a fejlődést, hiszen pl. a különböző anyagok kölcsönhatása, a katalitikus és adszorpciós folyamatok, a vezetési jelenségek túlnyomó többsége az anyag felületi szerkezetének beható ismerete nélkül csak részlegesen érthető meg. Ugyanakkor a fenti technológiai fejlődés merőben új, a tömb állapotú viselkedéstől eltérő fizikai jelenségek felfedezéséhez is vezetett. Az egyik leglátványosabban fejlődő, a technológiai alkalmazás szempontjából igen fontos és az alap kutatás számára újszerű eredményeket hozó terület a felületi, határréteg ill. vékonyréteg mágnesség témaköre volt.

Az, hogy a dimenzionalitásnak alapvető szerepe van a kiterjedt rendszerek mágnességében, elméletileg már régóta ismert tény volt. Curie úttörő hipotézise (Curie 1895) és Weiss kvantitatív átlagtérelmélete (Weiss 1907) nyomán világossá vált, hogy a kondenzált anyagok ferromágnessége az atomi mágneses momentumok közötti kölcsönhatás következménye valamint, hogy a paramágneses és ferromágneses állapotok hasonló fizikai model alapján írhatók le. A kvantummechanika alapvető formalizmusa (Heisenberg 1925, Schrödinger 1926) és a Pauli-féle kizárási elv (Pauli 1925) ismeretében hamarosan választ kaptunk arra, hogy ez a kölcsönhatás az elektronok Coulomb taszításának következménye, az ún. kicserélődési kölcsönhatás. Megszületett a mágneses anyagok leírására azóta is leggyakrabban használt Heisenberg model (Hei-

senberg 1928), melynek klasszikus formája

$$H = -\frac{1}{2} \sum'_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad , \quad (1.1)$$

ahol H a mágneses rendszer energiája, i és j az atomok (rácspontok) indexei, \vec{S}_i az i -ik atom mágneses momentumának irányába mutató egységvektor, J_{ij} pedig a kicserélődési kölcsönhatás, melynek hatótávolsága véges: sok esetben elégséges csak a legközelebbi szomszédok figyelembevétel. A szumma mellett álló vessző azt jelzi, hogy az azonos indexeket ($i=j$) kizárjuk az összegzésből, az $1/2$ szorzó pedig a párok ismétlését korrigálja. Ez a model a statisztikus fizika különböző módszereivel kezelhető, bizonyos esetekben egzaktul is megoldható. Aszerint, hogy a rács hány dimenzióban (D) végtelen kiterjedésű ill. hogy a spin mozgása hány dimenzióban megengedett ($d=1$ Ising, $d=2$ XY, $d=3$ Heisenberg), a fenti model különböző univerzalizációs osztályokba sorolható. Ezek szerint az Ising model egydimenziós rácson (1D) véges hőmérsékleten nem mutat hosszútávú rendeződést (Ising 1925), míg kétdimenziós (2D) rácson Onsager (1944) egzakt megoldása, valamint magasabb dimenziójú rácson magas hőmérsékletű sorfejtések megmutatták, hogy létezik ferromágneses rendeződés (l. Wilson, Kogut 1974). Folytonos spinváltozókra ($d \geq 2$) Mermin és Wagner tétele kimondta, hogy $D \leq 2$ esetén és rövid hatótávolságú kölcsönhatást feltételezve nem alakulhat ki hosszútávú rendeződés véges hőmérsékleten (Mermin, Wagner 1966). Mivel a tömbállapotú (bulk) ferromágnesek mágneszettségének ill. mágneses szuszceptibilitásának (pl. a kritikus exponensek) vizsgálata ezen anyagokat a 3D Heisenberg univerzalizációs osztályba sorolta, kézenfekvő volt feltételezni, hogy ugyanezen anyagok vékonyrétegei 2D Heisenberg típusúak. *A Mermin-Wagner tétel értelmében azonban a vékonyrétegek nem mutathatnának mágneses rendeződést.*

A 80-as évek közepétől fogva viszont kísérletileg teljesen bizonyossá vált, hogy nem-mágneses szubsztráton növesztett vékony Fe, Co és Ni filmek mágneses tulajdonságokkal rendelkeznek és a film vastagságának függvényében átmenet valósul meg a 3D Heisenberg ill. a 2D Ising típusú viselkedés között (Gradmann és mtsi. 1986; Farle, Baberschke 1987; Liu, Bader 1990; Li, Baberschke 1992). A kérdés tehát átfogalmazódott: *Milyen új, a tömb állapotban nem, vagy legalábbis csökkentett mértékben jelenlévő effektus okozza igen sok vékonyfilmben a spinek mozgási szabadságának befagyását?* A választ az elmélet már jóval korábban megadta: ez a jelenség a bulk mágneseknél már jól ismert *mágneses anizotropia*, mely hatására a mágneszettség a kristály valamely tengelyének irányába áll (könnyű tengely), míg más irányok

magasabb energiát képviselnek (nehéz tengelyek). Van Vleck (1937) mutatott rá először, hogy e jelenség alapvető oka a relativisztikus *spin-pálya kölcsönhatás* (spin-orbit coupling, SOC), mely az elektron spinjének mozgását összekapcsolja a pályamozgással és ezáltal a kristály geometriájával is. Megmutatható viszont, hogy köbös rendszerekben a szabad energiának a mágnesezettség iránya szerinti Landau-Lifshitz féle fenomenológikus sorfejtésében a legalacsonyabb el nem tűnő nem-triviális tag negyedrendű. Így érthető, hogy a köbös szerkezetű tömb ferromágnesek a mágneses anizotrópia energiája (MAE) igen kicsi, tipikusan $0.1 \mu\text{Ryd}$ /elemi cella nagyságrendű.

Neél (1954) vetette fel először azt a gondolatot, hogy felületek közelében a rendszer szimmetriájának csökkenése miatt a szabad energia sorfejtésében másodrendű tag is megjelenhet, ami több nagyságrenddel nagyobb mágneses anizotrópia energiát jelenthet. Amennyiben a könnyű irány a felületre merőleges irányba mutat, ez az energia elegendő lehet ahhoz, hogy a mágneses momentumokat (spineket) viszonylag magas hőmérsékleten is ebbe az irányba kényszerítse és ezáltal a vékonyrétegek kísérletileg megfigyelt 2D Ising típusú mágnesként való viselkedését megmagyarázza.

A spin-pálya kölcsönhatás következményeként föllépő mágneses anizotrópia mellett a mágneses momentumok egymással való közvetlen kölcsönhatása, a mágneses dipól-dipól kölcsönhatás is meghatározó szerepet játszik a vékonyrétegek mágneses orientációjának alakításában. A relativisztikus áram-áram kölcsönhatás multipól sorfejtésének magasabb rendű tagjai általában elhanyagolhatók a mágneses anizotrópia szempontjából. Igen könnyen belátható, hogy egy véges vastagságú rétegben ez a kölcsönhatás a mágneses momentumok síkbeli orientációját preferálja, valamint az is, hogy ez az energiajárulék a rétegvastagsággal lényegében lineárisan nő. Így egy merőleges felületi mágneses anizotrópiával rendelkező vékonyréteg vastagságának növelésével egy kritikus vastagságnál a mágneses momentumoknak a merőleges irányból a síkkal párhuzamos irányba való átfordulása várható. Ezt a jelenséget *spin-reorientációnak* hívjuk. A reorientációs átmenet számos esetben a hőmérséklet növelésével is elérhető, melynek alapvető indoka a spinrendszer entrópiájának növekedése. Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a vékonyrétegek mágnességének leírásához szükséges *minimális spin-model*

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_i \lambda_i (S_i^z)^2 + \frac{\omega}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\vec{S}_i \vec{S}_j}{R_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \vec{R}_{ij})(\vec{S}_j \vec{R}_{ij})}{R_{ij}^5} \right) \quad (1.2)$$

alakú, ahol a második tag a spin-pálya kölcsönhatásból eredő anizotrópiát

veszi figyelembe, a harmadik tag pedig a mágneses dipól-dipól kölcsönhatási energia. E model alapállapot diagramjára végeztünk átfogó vizsgálatot a λ_i anizotrópia állandók és az ω dipólerősség függvényében (Udvardi és mtsi. 1998), valamint átlagtér közelítésben tanulmányoztuk a reorientációs ill. ferromágnes-paramágnes fázisátalakulásokat (Szunyogh, Udvardi 1998; Udvardi és mtsi. 2000), azonban ezen munkák nem képezik a jelen dolgozat tárgyát.

A vékonyrétegek és multiréteg szekvenciák merőleges mágneses anizotrópiájának vizsgálata a 80-as évek végétől kezdve világméretben igen intenzív kutatási területté vált és még napjainkban is töretlen lendülettel folyik. A kutatások fő motorja az a technológiai lehetőség, mely a *nagy sűrűségű mágneses ill. magneto-optikai adattárolásban*, és ezáltal a számítógépes hardware eszközök újabb generációjának létrehozásában rejlik. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a felületre merőleges fel- ill. lefelé mutató spinbeállítás alkalmas a bináris kódolásra ill. a kisméretű felületi domének (bitek) koncentrált adattárolást tesznek lehetővé. A termikus hibák csökkentése végett viszonylag magas reorientációs hőmérsékletű, azaz nagy merőleges anizotrópiával rendelkező anyagok használata kívánatos. A felületi mágneses anizotrópia (FMA) igen sok, kísérletileg többé-kevésbé szabályozható tényező függvénye: nyilvánvalóan függ a vékonyréteg és a hordozóanyag fajtájától, az alkalmazott rétegvastagságoktól, a felületeken ill. határfelületeken létrejött elektronszerkezeti változásoktól, a növesztés irányától, sebességétől, hőmérsékletétől stb. A fent említett tényezők FMA-ra gyakorolt hatásának vizsgálatában a kísérletek stratégiája a különböző rendszerek szisztematikus, összehasonlító tanulmányozása volt.

Mivel a mágneses anizotrópia a rendszer alapállapot tulajdonsága, átmeneti fémek rendszerekben számítására a sűrűségfüktionál elmélet ill. azon belül a lokális sűrűség közelítés (Hohenberg, Kohn 1964; Kohn, Sham 1965) jól alkalmazható. A sávszerkezet számoló módszerek fejlődése, mely lehetővé tette a komplex rendszerek vizsgálatát, a 80-as évek közepétől utat nyitott a mágneses anizotrópia energia első elvekből történő (first principles) számítására különböző vékonyrétegekben ill. multirétegekben. Az első ilyen számítást Gay és Richter (1986, 1987) végezték Fe, Ni és V mono-rétegekre egy önkonzisztens lokális pálya módszerrel valamint az ún. force theorem közelítésben (l. a 2.5. alfejezetben). Dalderoop és mtsi. (1990, 1992) az elektronszerkezet és mágneses anizotrópia közötti néhány alapvető összefüggésre mutattak rá bulk ferromágnesekben valamint nem-mágneses szubsztrátban elhelyezett ferromágneses monorétegekben a linearizált muffin-

tin pálya módszer felhasználásával atomi gömb közelítésben (LMTO-ASA). Hasonlóan igényes számításokat végeztek Wang és mtsi. (1993, 1994) a teljespotenciál linearizált kiterjesztett síkhullám módszerrel (FP-FLAPW), melyben többek között a rácsrelaxációknak a MAE-ra gyakorolt hatására hívták föl a figyelmet.

A fent említett számítások közös vonása, hogy a nem-relativisztikus önkonzisztens elektronszerkezetből kiindulva a spin-pálya kölcsönhatást perturbatív módon kezelték. E közelítést a legszemléletesebben Bruno (1989) dolgozta ki, aki egy Slater-Koster tight-binding modelben írta föl a spin-pálya kölcsönhatásban másodrendű energiakorrekciót és rámutatott a MAE valamint a pályamomentum anizotrópiája közötti kapcsolatra. Ezen összefüggés nagymértékben leegyszerűsített formáját

$$\Delta E = -\frac{\xi}{4\mu_B} \Delta m_{orb}, \quad (1.3)$$

ahol ΔE az anizotrópia energia, Δm_{orb} a pálya mágneses momentum anizotrópiája, ξ a spin-pálya kölcsönhatás erőssége, μ_B pedig a Bohr-magneton, azóta is gyakran használják a kísérleti eredmények interpretálására. A fenti összefüggés érvényességének kritikai vizsgálatára a 3.1 alfejezetben térek vissza.

Az elektron relativisztikus elmélete, azaz a Dirac-egyenlet (Dirac 1928) alapján Guo és mtsi. (1991, 1992) végeztek először számításokat Fe vékonyrétegek mágneses anizotrópiájára Ag szubsztrátban. Ezáltal lehetővé vált, hogy az elektronok spin-polarizációját és a relativisztikus effektusokat az elmélet azonos szintjén kezeljék. Mivel azonban Guo és mtsi. az LMTO módszert szupercella közelítésben alkalmazták, számításaik csak olyan rendszerre vonatkozhattak, mely az Fe és Ag vékonyrétegek igen nagy számú (elvben végtelen) ismétlődéséből áll.

A fent említett reprezentatív elméleti munkák ismeretében a 90-es évek elejére megfogalmazódott az igény egy olyan újabb módszer kidolgozására, mely

- nagy pontosságú, first principles, anyagspecifikus számításra képes a relativisztikus elektronelmélet alapján
- a korábbi számításokra jellemző néhány monoréteges vastagságon túl lépve képes vastagabb rétegek kezelésére úgy, hogy
- mind a szubsztrát mind a vákuum 'félvégtelen' geometriáját figyelembe veszi és

- a különböző anyagok határán létrejövő keveredés ill. ötvöződés hatását is modellezni tudja.

Az elmúlt évtizedekben az ún. Korringa–Kohn–Rostoker (Korringa 1947, Kohn és Rostoker 1954), rövidítve KKR, eljárás vagy más néven Green–függvényes technika, jelentős sikereket ért el a tömb állapotú fémek rendszerek elektronszerkezet számításában. A KKR módszer természetes módon kiterjeszhető a Dirac egyenlet megoldására mágneses (effektív kicserélődési) tér jelenlétében. Ugyanakkor, mivel a módszer a rendszer Green–függvényének számításán alapul, kiválóan kombinálható a véletlen keveredésű ötvözetek átlagtér leírásával, az ún. koherens-potenciál közelítéssel (CPA) (Soven 1970, Györffy 1972).

Feladatul tűztem ki tehát a KKR eljárás olyan továbbfejlesztését, mely megőrizve a módszer eleganciáját és pontosságát, numerikus szempontból egyszerűen kivitelezhető módon teljesíti a fent megfogalmazott kritériumokat. A kifejlesztett módszer spin-polarizált relativisztikus változatával szisztematikus számítássorozatokot végeztem különböző vékonyréteg rendszerek mágneses anizotrópia energiájára. Ezen elméleti vizsgálatokból egyrészt a felületi mágneses anizotrópiát meghatározó általános jelenségekre próbáltam fényt deríteni, másrészt pedig megkíséreltem az egyes rendszerek sajátosságait minél pontosabb, anyagspecifikus számításokkal megmagyarázni.

1.1. Az értekezés szerkezete és témája

Az értekezés főbb tartalmi részeit Fejezetekbe osztottam, melyeket további alfejezetekre tagoltam. Az egyes alfejezetek fejlécén külön feltüntettem azon publikációim hivatkozását, mely anyagára az adott alfejezet támaszkodik. Az egyes fejezetek témái a következők:

- 2** Az alkalmazott módszereket írom le. A számítások alapjául szolgáló spin-polarizált relativisztikus Korringa-Kohn-Rostoker módszer rövid bemutatása után az általunk kifejlesztett árnyékolt (screened) KKR eljárást ill. annak réteges rendszerekre való alkalmazási technikáját mutatom be. Ebben a kontextusban külön kitérek a koherens-potenciál közelítésre és végül a MAE számításának néhány aspektusával foglalkozom.
- 3** Néhány egyszerűbb rendszer – Au(001)/Fe, Au(111)/Co₁/Au és Cu(001)/Co₁/M₁ (M átmeneti fém) – példáján keresztül elsősorban

a felületi mágneses anizotrópia kialakításában szerepet játszó alapvető elektronszerkezeti hatásokat tanulmányozom. Itt a fő hangsúlyt a mágneses/nem-mágneses határreteg menti hibridizáció vizsgálata kapja, melyet a mágneses réteg fölé helyezett fedőréteg vastagságával ill. anyagi minőségével szabályozhatunk.

- 4 A Cu(001)/Fe rendszert vizsgálom, mely mind geometriai struktúráját, mindpedig mágneses szerkezetét tekintve méltán tekinthető az egyik legkülönlegesebb mágneses vékonyréteg rendszernek. Külön alfejezetben foglalkozom a ferromágneses ill. anti-ferromágneses fázis mágneses anizotrópia tulajdonságaival. A ferromágneses fázis vizsgálata kitűnő lehetőséget nyújt az FMA-t kontrolláló olyan fontos hatások, mint a határreteg hibridizáció, a szubsztrát spin-pálya kölcsönhatása és az interdiffúzió, bemutatására. Az antiferromágneses fázis vizsgálata pedig az atomi rétegek közötti kicserélődési csatolás jelentőségére hívja fel a figyelmet. Megmutatom, hogy a vas kobalttal való ötvözése antiferromágneses-ferromágneses fázisátalakulást indukál, drasztikus változást okozva a rendszer MAE-jában.
- 5 A Cu(001)/Ni rendszerrel foglalkozom, melyben 7 atomi réteg vastagság körül inverz reorientáció, azaz a mágnesezettségnek a felülettel párhuzamos irányból a merőleges irányba való fordulása tapasztalható. First principles számításokkal igazolom, hogy az inverz reorientáció oka a Ni atomi rétegek tetragonális kontrakciója miatt fellépő merőleges anizotrópia. A vastagabb Ni filmek normál reorientációját egy "építő-kocka" model keretében vizsgálom, mely a mágneses anizotrópia járulékok térbeli csoportosíthatóságán alapul. Számításaink azt jósolják, hogy a normál reorientáció kritikus vastagságánál alig vastagabb Ni rétegre helyezett ultravékony Co fedőréteg ismételt inverz reorientációt okozhat.
- 6 Néhány további érdekes alkalmazás kerül tárgyalásra. Ezek között szerepel a szennyeződés mágneses anizotrópiájának vizsgálata, különös tekintettel a felülettől való távolság szerinti aszimptotikus viselkedésre. Ez a tanulmány elvezet a mágneses anizotrópia energia oszcilláló viselkedéséhez vékonyrétegekben, melyet a Cu/Co/Cu rendszeren tanulmányozok. Végezetül pedig a ferromágneses anyagok Bloch-falának first principles elektron elméletét tárgyalom, a bcc Fe 90°-os Bloch-falára végzett konkrét vizsgálaton keresztül.
- 7 Összefoglalom tudományos eredményeimet és következtetéseimet.

2. fejezet

Az alkalmazott módszerek

2.1. A spin-polarizált relativisztikus Korringa–Kohn–Rostoker eljárás

Ebben az alfejezetben röviden bemutatom a Korringa-Kohn-Rostoker módszer Green függvényes formalizmusát, kiemelt tekintettel a spin-polarizált relativisztikus tárgyalásra. Osszuk fel az általunk vizsgált Ω tértartományt diszjunkt Ω_n ($n \in I \subset \mathbb{N}$) halmazokra (cellákra),

$$\Omega = \bigcup_{n \in I} \Omega_n, \quad (2.1)$$

melyek mindegyike egy geometriai rács valamely \vec{R}_n helyvektorú pontja (atommag) köré centrált. Ekkor a lokális spin-sűrűség funkcionál közelítés (LSDA) által definiált effektív $V^{\text{eff}}(\vec{r})$ potenciál és $\vec{B}^{\text{eff}}(\vec{r})$ kicserélődési tér is egyértelműen felbontható

$$V^{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_{n \in I} V_n^{\text{eff}}(\vec{r}_n) \quad (V_n^{\text{eff}}(\vec{r}_n) = 0 \quad \text{ha} \quad \vec{r} \notin \Omega_n) \quad (2.2)$$

ill.

$$\vec{B}^{\text{eff}}(\vec{r}) = \sum_{n \in I} \vec{B}_n^{\text{eff}}(\vec{r}_n) \quad (\vec{B}_n^{\text{eff}}(\vec{r}_n) = 0 \quad \text{ha} \quad \vec{r} \notin \Omega_n) \quad (2.3)$$

alakban, ahol $\vec{r}_n = \vec{r} - \vec{R}_n$. Valamely z komplex energiára legyenek az n -ik cellára vonatkozó Kohn-Sham-Dirac egyenlet független megoldásai a cella határán megfelelően normált $Z_Q^n(z; \vec{r})$ ill. $J_Q^n(z; \vec{r})$ négy-komponensű hullám-függvények, melyek rendre regulárisak ill. szingulárisak az origóban

$$\left(c\vec{\alpha}\vec{p} + (\beta - I_4)mc^2 + I_4V_n^{\text{eff}}(\vec{r}) + \beta\vec{\Sigma}\vec{B}_n^{\text{eff}}(\vec{r}) - zI_4 \right) \begin{Bmatrix} Z_Q^n(z; \vec{r}) \\ J_Q^n(z; \vec{r}) \end{Bmatrix} = 0, \quad (2.4)$$

ahol c a fénysebesség, m az elektron nyugalmi tömege,

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix},$$

σ_i ($i = 1, 2, 3$) a Pauli mátrixok, I_n az n -dimenziós egységmátrix és a Q összevont index a (κ, μ) relativisztikus kvantumszámokat jelöli (Rose 1961). Bár a többszörös szóráselmélet érvényes a potenciál tetszőleges alakjára (Gonis 1992), a következőkben az ún. atomi gömb közelítésre (ASA) szorítokozom, melyben $V_n^{\text{eff}}(\vec{r})$ és $\vec{B}_n^{\text{eff}}(\vec{r})$ csak a radiális koordinátától ($r = |\vec{r}|$) függenek ill. a cellát egy azonos térfogatú gömbbel helyettesítjük. Ebben a közelítésben az atomi gömbön belüli effektív térhez egy meghatározott irányt rendelünk, melyet a lokális koordinátarendszer \hat{z} irányával azonosítunk. A (2.4) egyenlet ekkor standard prediktor-korrektor technikával megoldható és a cella impulzusmomentum térbeli $\underline{t}^n(z) \equiv \{t_{QQ'}^n(z)\}$ szórás mátrixa (single-site t -matrix) könnyen kiszámolható (Feder, Rosicky 1984; Strange és mtsi. 1985). Ugyanakkor az effektív tér globális koordinátarendszerhez viszonyított irányát a t -mátrix impulzusmomentum térbeli transzformációjával lehet figyelembe venni,

$$\underline{t}(z) = \underline{D}(R) \underline{t}_{\text{loc}}(z) \underline{D}(R)^+, \quad (2.5)$$

ahol R az adott térbeli forgatás, $\underline{D}(R)$ az R irreducibilis ábrázolása, míg $\underline{t}_{\text{loc}}(z)$ a lokális koordinátarendszerben felírt t -mátrix.

A KKR módszerben a cellák térbeli elrendeződésére vonatkozó információt a szabad (potenciálmentes) Green-függvény kétcentrumú kifejtéséből adódó $\underline{G}_0^{nm}(z) \equiv \{G_{0,QQ'}(z; \vec{R}_n - \vec{R}_m)\}$ ún. struktúrakonstansok hordozzák, melyek relativisztikus megfelelőjét a nem-relativisztikus kifejtési mátrixelemek Clebsh-Gordon együtthatók általi transzformációja szolgáltatja (l. pl. Weinberger 1990). A többszörös szórás folyamatát a $\tau_{QQ'}^{nm}(z)$ szórási úthossz operátor (scattering path operator - SPO) reprezentálja (Györfly, Stott 1972). Definiálva az alábbi cella és impulzusmomentum indexszel rendelkező mátrixokat (Weinberger 1990)

$$\mathbf{t}(z) = \{\underline{t}^n(z) \delta_{nm}\}, \quad \mathbf{G}_0(z) = \{\underline{G}_0^{nm}(z)\}, \quad \boldsymbol{\tau}(z) = \{\underline{\tau}^{nm}(z)\},$$

az SPO a következőképpen adható meg

$$\boldsymbol{\tau}(z) = \mathbf{t}(z) + \mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z) + \mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z) + \dots \quad (2.6)$$

vagy

$$\boldsymbol{\tau}(z) = (\mathbf{t}(z)^{-1} - \mathbf{G}_0(z))^{-1}. \quad (2.7)$$

Viszonylag hosszadalmas levezetés eredményeképpen (Faulkner, Stocks 1980; Gonis 1992) a $\mathcal{G}(z; \vec{r}, \vec{r}')$ egy-elektron Green-függvény felírható mint

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(z; \vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{QQ'} Z_Q^n(z; \vec{r}_n) \tau_{QQ'}^{nm}(z) Z_{Q'}^m(z; \vec{r}'_m)^\dagger \\ &- \delta_{nm} \sum_Q \left\{ J_Q^n(z; \vec{r}_n) Z_Q^n(z; \vec{r}'_n)^\dagger \Theta(r_n - r'_n) + Z_Q^n(z; \vec{r}_n) J_Q^n(z; \vec{r}'_n)^\dagger \Theta(r'_n - r_n) \right\} , \end{aligned} \quad (2.8)$$

ahol $\vec{r} \in \Omega_n$, $\vec{r}' \in \Omega_m$ és $\Theta(x)$ a Heavyside-féle lépcsőfüggvény. Ezek után könnyedén származtatható az elektronrendszer állapotsűrűsége (density of states - DOS)

$$n(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int d^3r \text{Tr} (\mathcal{G}(\epsilon + i\delta; \vec{r}, \vec{r})) \quad (2.9)$$

a töltéssűrűség

$$\rho(\vec{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{\mathcal{C}} dz \text{Tr} (\mathcal{G}(z; \vec{r}, \vec{r})) , \quad (2.10)$$

a spinmomentum sűrűség

$$\vec{m}_{\text{spin}}(\vec{r}) = -\frac{\mu_B}{2\pi} \text{Im} \int_{\mathcal{C}} dz \text{Tr} (\beta \vec{\Sigma} \mathcal{G}(z; \vec{r}, \vec{r})) , \quad (2.11)$$

valamint a pályamomentum sűrűség

$$\vec{m}_{\text{orb}}(\vec{r}) = -\frac{\mu_B}{\pi} \text{Im} \int_{\mathcal{C}} dz \text{Tr} (\beta \vec{L} \mathcal{G}(z; \vec{r}, \vec{r})) , \quad (2.12)$$

ahol \vec{L} a pályamomentum operátora. A fenti képletekben \mathcal{C} egy olyan kontúrt jelöl a felső komplex félsíkon, mely a valós tengelyen a valenciasáv alatt indul (ϵ_B) és végpontja a Fermi-energiánál (ϵ_F) van ill. Tr egy 4×4 -es mátrix nyomát jelöli. Nyilvánvaló, hogy a Poisson-egyenlet megoldásával valamint az LSDA funkcionálok felhasználásával az effektív potenciál (2.2) és kicserélődési tér (2.3) a fent vázolt eljárás iteratív ismétlésén keresztül önkonzisztens módon meghatározhatók, mely eredményeképpen a mágnesezettség adott iránya mellett megkapható a rendszer teljes energiája, a cellákra vonatkoztatott töltések, spin- valamint pályamomentumok. Elvben lehetőség van a mágnesezettség irányának önkonzisztens meghatározására is, mely a spin-sűrűség funkcionál elmélet koncepcionális továbbfejlesztését igényli (Stocks és mtsi. 1998; Niu és mtsi. 1999).

2.2. Az árnyékolt Korringa–Kohn–Rostoker módszer (SKKR)

Zeller R., Dederichs P.H., Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **52**, 8807–8812 (1995)

Weinberger P., Turek I., Szunyogh L., *Int. J. Quant. Chem.* **63**, 165–188 (1997)

Figyelembevéve a (három-dimenziós) szabad Green-függvény alakját,

$$G_0(z; \vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ip|\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (p^2 = z, \text{Im}(z) > 0),$$

nyilvánvaló, hogy a $\underline{G}_0^{nm}(z)$ szabad struktúrakonstans vezető rendben $1/|\vec{R}_n - \vec{R}_m|$ lecsengésű, azaz *hosszú hatótávolságú*. Emiatt redukált szimmetriájú – felületek, vékonyrétegek esetében legfeljebb 2D transláció invarianciával rendelkező – rendszerekre a (2.7) egyenletben szereplő mátrixinvertálás egzaktul nem végezhető el. Ismeretes volt, hogy az LMTO módszernek létezik egy tight-binding változata, melyben egy kanonikus transzformációt alkalmazva az (energiafüggetlen) struktúrakonstansok hatótávolsága térben lokalizálható (Andersen, Jepsen 1984; Lambrecht, Andersen 1986; Wenzien és mtsi. 1989). Az LMTO és KKR módszerek analógiájára alapozva valamint felhasználva a Kollár János és Újfalussy Balázs által kidolgozott numerikus eljárást (Kollár, Újfalussy 1992) először numerikus úton parametrizáltuk az energiafüggő KKR struktúrakonstansokat lokalizáló transzformációt és kidolgoztunk egy felületi számításokra alkalmas KKR technikát. Röviddel ezután egy olyan konzisztens elmélet keretébe foglaltuk az új eljárást, mely az addig viszonylag *ad-hoc* jellegűnek tűnő transzformációt átgondolt fizikai alapra helyezte és egyúttal fölöslegessé tette a körülményes parametrizálást.

Az elmélet alapját az képezi, hogy a $\tau(z)$ SPO ill. alternatíván a $\mathbf{G}(z)$ ún. struktúrális Green-függvény mátrix

$$\mathbf{G}(z) = \mathbf{G}_0(z) + \mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z) + \mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z)\mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z) + \dots \quad (2.13)$$

$$= \mathbf{G}_0(z) (\mathbf{I} - \mathbf{t}(z)\mathbf{G}_0(z))^{-1} = \mathbf{G}_0(z) + \mathbf{G}_0(z)\tau(z)\mathbf{G}_0(z), \quad (2.14)$$

fölírható tetszőleges referencia rendszert használva. Jelöljük az új referencia rendszert r indexszel, melynek struktúrális Green-függvény mátrixa, az ún. *árnyékolt struktúra-konstans*

$$\mathbf{G}_r(z) = \mathbf{G}_0(z) (\mathbf{I} - \mathbf{t}_r(z)\mathbf{G}_0(z))^{-1}, \quad (2.15)$$

ahol $\mathbf{t}_r(z)$ az r rendszer t -mátrixa. A (2.15) egyenletből kifejezve $\mathbf{G}_0(z)$ -t, majd behelyettesítve (2.14)-be nyerjük

$$\mathbf{G}(z) = \mathbf{G}_r(z) (\mathbf{I} - \Delta \mathbf{t}(z) \mathbf{G}_r(z))^{-1}, \quad (2.16)$$

ahol az *árnyékolt t-mátrix*

$$\Delta \mathbf{t}(z) = \mathbf{t}(z) - \mathbf{t}_r(z). \quad (2.17)$$

A (2.7) egyenlettel analóg módon definiálhatjuk az *árnyékolt SPO-t*

$$\boldsymbol{\tau}_\Delta(z) = (\Delta \mathbf{t}(z)^{-1} - \mathbf{G}_r(z))^{-1}, \quad (2.18)$$

melyből a fizikai SPO (2.7) könnyedén megkapható

$$\boldsymbol{\tau}(z) = \mathbf{t}(z) (\Delta \mathbf{t}(z)^{-1} \boldsymbol{\tau}_\Delta(z) \Delta \mathbf{t}(z)^{-1} + \mathbf{t}(z)^{-1} - \Delta \mathbf{t}(z)^{-1}) \mathbf{t}(z). \quad (2.19)$$

A $\mathbf{G}_r(z)$ mátrix magától értetődően az új referencia rendszer Green-függvényének kétcentrumú kifejtési együtthatóit tartalmazza. Ha ezen rendszert egy olyan $V_r = konst.$ potenciál írja le, mely az általunk vizsgált rendszer valenciasávja fölött van, akkor ebben az energiatartományban $\underline{G}_r^{nm}(z)$ exponenciálisan lecsengő viselkedést mutat, azaz *rövid hatótávolságú* lesz és a (2.18) egyenlet sávmátrix technikákkal kezelhető.

2.3. Két-dimenziós transzláció invarianciával rendelkező rendszerek

Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Kollár J., *Phys. Rev. B* **49**, 2721–2729 (1994)

Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., Kollár J., *NATO ASI Series E: Applied Sciences* **256**, 301–311 (1994)

Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Kollár J., *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 3301–3306 (1994)

Uiberacker C., Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Ernst A., Dederichs P.H., *Phil. Mag. B* **78**, 423–427 (1998)

Ebben az alfejezetben az SKKR módszer réteges rendszerekre való alkalmazásának elemeit vázolom. Kétdimenziós transzláció invariancia esetén a rácsvektorokat a következő módon jellemezhetjük

$$\vec{R}_n = \vec{C}_p + \vec{T}_i, \quad (2.20)$$

ahol \vec{C}_p az p -ik réteg (sík) generáló vektora, mellyel a különböző rétegek rács-pontjait egymással fedésbe hozhatjuk és \vec{T}_i egy 2D transzláció vektor. Egy

rétegen (p) belül a cellák identikusak, tehát *egy* meghatározott $\underline{t}^p(z)$ t -mátrixszal jellemezhetőek és definiálhatók az alábbi 2D rács Fourier transzformáltak

$$\underline{G}_0^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel}) = \sum_{\vec{T}_i} e^{i\vec{k}_{\parallel}\vec{T}_i} \underline{G}_0(z; \vec{C}_p + \vec{T}_i, \vec{C}_q), \quad (2.21)$$

ill.

$$\underline{T}^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel}) = \sum_{\vec{T}_i} e^{i\vec{k}_{\parallel}\vec{T}_i} \underline{T}(z; \vec{C}_p + \vec{T}_i, \vec{C}_q), \quad (2.22)$$

ahol \vec{k}_{\parallel} a 2D Brillouin-zóna egy vektora. Bevezetve az atomi rétegindek szerinti mátrixjelölést

$$\mathbf{t}(z) = \{\underline{t}^p(z) \delta_{pq}\}, \quad \mathbf{G}_0(z; \vec{k}_{\parallel}) = \{\underline{G}_0^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel})\}, \quad \boldsymbol{\tau}(z; \vec{k}_{\parallel}) = \{\underline{T}^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel})\},$$

a (2.7) egyenlet faktorizálható a \vec{k}_{\parallel} vektorok szerint

$$\boldsymbol{\tau}(z; \vec{k}_{\parallel}) = \left(\mathbf{t}(z)^{-1} - \mathbf{G}_0(z; \vec{k}_{\parallel}) \right)^{-1}. \quad (2.23)$$

Az árnyékolt 2D struktúrakonstansok számítására kétféle stratégiát használtunk: (i) ha a rácsponatok egy 3D transzláció invariáns rácson helyezkednek el (a síkokra merőleges irányú transzláció szimmetriát a felület jelenléte töri meg), a (2.15) árnyékolási transzformációt a 3D Fourier-térben végezhetjük el, majd a 3D Brillouin-zónában merőleges irányban integrálhatunk; (ii) ha a \vec{C}_p vektorok nem konzisztensek egy 3D transzláció invariáns ráccsal (pl. rácsrelaxáció esetén), akkor $\underline{G}_0^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel})$ Ewald összegzéssel kiszámítható (Kambe 1967a, 1967b, 1968) és a (2.15) egyenlet 2D rács-Fourier transzformált változatát,

$$\mathbf{G}_r(z; \vec{k}_{\parallel}) = \mathbf{G}_0(z; \vec{k}_{\parallel}) [\mathbf{I} - \mathbf{t}_r(z) \mathbf{G}_0(z; \vec{k}_{\parallel})]^{-1}, \quad (2.24)$$

oldjuk meg.

Mivel a $\underline{G}_r^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel})$ mátrix $|p-q|$ gyorsan lecsengő függvénye, valamely alkalmas n -re a

$$\underline{G}_r^{pq}(z; \vec{k}_{\parallel}) = 0 \quad \text{ha} \quad |p-q| > n \quad (2.25)$$

közelítés alkalmazható. Tesztszámításaink alapján az fcc(100), (110), (111) ill. bcc(100) és (110) felületekre az $n=3$ érték elegendőnek bizonyult. Így bevezethető az ún. *alapréteg* (principal layer) (Wenzien és mtsi. 1989), mely n egymást követő atomi réteget foglal magában. Belátható, hogy az alaprétegek szerint indexelt struktúrakonstans mátrixok blokk-tridiagonális alakúak, és ezért a (2.23) egyenlet megoldásához a lineáris algebra egyszerű eszközei használhatóak (Godfrin 1991). Nagy előnye a módszernek az, hogy

a standard mátrix-inverziós technikákkal szemben *a számítási idő a mátrix méretével (a rétegek számával) lineárisan skálázódik.*

Számításainkban a rendszert három részre osztottuk:

L a baloldali fél-végtelen rész, mely identikus tömbi szubsztrát atomokból épül fel,

I a középső véges vastagságú rész, mely tartalmazza a vékonyréteget valamint a szubsztrát ill. vákuum néhány rétegét (puffer) és

R a jobboldali fél-végtelen rész, mely ugyancsak identikus vákuum (konstans potenciálú üres gömb) vagy tömbi szubsztrát rétegekből áll.

A (2.23) egyenletben definiált szórási úthossz operátornak csak a $\tau_{II}(z, \vec{k}_{\parallel})$, I alrendszerre vett projekcióját számítjuk ki, míg az L és R tartományok a szórási folyamatok határfeltételeit biztosítják. A részletek mellőzésével a fent leírt technika lehetővé teszi egy ún. *felületi szórási úthossz operátor* definiálását, mely a $\tau_{II}(z, \vec{k}_{\parallel})$ számításakor egzaktul leírja az összes többszörös szórási folyamatot a L ill. R tartományban. Ez természetesen azt implikálja, hogy csak az I tartományban kezeljük a potenciálokat önkonzisztens módon.

A (2.23) mátrix-inverzió elvégzése után az SPO valós térbeli reprezentációját a

$$\underline{\tau}^{pi,qj}(z) = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int_{BZ} d^2k_{\parallel} e^{-i\vec{k}_{\parallel}(\vec{T}_i - \vec{T}_j)} \underline{\tau}^{pq}(z, \vec{k}_{\parallel}), \quad (2.26)$$

Brillouin-zóna integrálással kapjuk, ahol Ω_{BZ} a 2D Brillouin-zóna térfogata. A rendszer pontcsoport szimmetriáját kihasználva az önkonzisztens számításokhoz szükséges réteg-diagonális blokkok esetében ez az integrál átírható a

$$\underline{\tau}^{p0,p0}(z) = \frac{1}{|G|} \sum_{S \in G} \underline{D}(S)^+ \left[\frac{1}{\Omega_{IBZ}} \int_{IBZ} d^2k_{\parallel} \underline{\tau}_S^{pp}(z, \vec{k}_{\parallel}) \right] \underline{D}(S), \quad (2.27)$$

alakra, ahol IBZ a Brillouin-zóna egy irreducibilis szegmensét jelöli, G az adott pontcsoport, $|G|$ a csoport rendje, $\underline{D}(S)$ az S transzformáció ábrázolása és $\underline{\tau}_S^{pp}(z, \vec{k}_{\parallel})$ a (2.22)-ben definiált SPO az S -sel transzformált t -mátrixokkal (l. (2.5)). Ebből azonnal látszik, hogy (i) a (2.21) struktúra konstansokat csak egy IBZ-ben kell kiszámítani ill. (ii) ha valamely S és R pontcsoport operációkra az összes t -mátrix ugyanúgy transzformálódik, akkor a (2.27)-ben szereplő integrált nem kell újra elvégezni. A mágnesezettség néhány speciális (pl. a síkokra merőleges) irányra esetén ez utóbbi tulajdonság nagymértékben csökkenti a számolási időt.

Az önkonzisztens számítások további numerikus részleteit az egyes cikkek tartalmazzák, ezért ezekre az értekezésben nem térek ki részletesen. Végezetül azonban megjegyzem, hogy a muffin-tin közelítésen belül új eljárást dolgoztunk ki a Poisson egyenlet réteges rendszerekben való megoldására különös tekintettel a vákuum határfeltételre.

2.4. A koherens potenciál közelítés réteges rendszerekben

Weinberger P., Levy P.M., Banhart J., Szunyogh L., Újfalussy B., *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 7679-7690 (1996)

A rendezetlen helyettesítéses ötvözetek átlagtér elmélete, a koherens potenciál közelítés (CPA) egyszerűen implementálható a KKR módszer keretein belül (Györffy 1972; Faulkner, Stocks 1980). Míg azonban tömb állapotú rendszerekben a különböző, rendezetlen eloszlású komponensek átlagos szórását egy 3D transláció invariáns effektív (koherens) médium hatásával írjuk le, réteges rendszerekre ez az effektív potenciál 2D transláció invariáns és rétegenként változhat. Ugyanis egy homogén ötvözet vékonyrétegében vagy felületén, ahol minden rétegben ugyanazon komponensek, ugyanazon koncentrációval keverednek, a felület ill. határréteg jelenléte miatt a rétegenkénti valódi és effektív potenciálok szükségszerűen különböznek. Még nyilvánvalóbb a helyzet interdiffúzió vagy inhomogén ötvözet esetében, mikor a koncentrációk rétegenként is változhatnak. Ezért tekintsünk általában N atomi réteget, melyek mindegyikét n_p számú komponens ($p = 1, \dots, N$) véletlenszerű eloszlása jellemez, rendre c_p^α ($\alpha = 1, \dots, n_p$) koncentrációval

$$\sum_{\alpha=1}^{n_p} c_p^\alpha = 1 .$$

Az egyes komponensek t -mátrixai legyenek $\underline{t}^{p\alpha}(z)$, a megfelelő koherens t -mátrix pedig $\underline{t}_c^p(z)$. Mivel a koherens médium 2D transláció invariáns, a vonatkozó SPO (2.23) és (2.26) alapján meghatározható

$$\boldsymbol{\tau}_c(z; \vec{k}_{\parallel}) = \left(\mathbf{t}_c(z)^{-1} - \mathbf{G}_0(z; \vec{k}_{\parallel}) \right)^{-1} , \quad (2.28)$$

ill.

$$\underline{\tau}_c^{pi,qj}(z) = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int_{BZ} d^2 k_{\parallel} e^{-i\vec{k}_{\parallel}(\vec{T}_i - \vec{T}_j)} \underline{\tau}_c^{pq}(z, \vec{k}_{\parallel}) . \quad (2.29)$$

A (single-site) koherens potenciál közelítés keretein belül az SPO feltételes konfigurációs átlagai a következő eredményre vezetnek (l. még Butler 1985)

$$\langle \underline{\mathcal{T}}^{pi,pi}(z) \rangle_{pi,\alpha} = \langle \underline{\mathcal{T}}^{p0,p0}(z) \rangle_{p0,\alpha} = \underline{D}^{p\alpha}(z) \underline{\mathcal{T}}_c^{p0,p0}(z) = \underline{\mathcal{T}}_c^{p0,p0}(z) \tilde{\underline{D}}^{p\alpha}(z), \quad (2.30)$$

ill.

$$\langle \underline{\mathcal{T}}^{pi,qj}(z) \rangle_{pi,\alpha;qj,\beta} = \underline{D}^{p\alpha}(z) \underline{\mathcal{T}}_c^{pi,qj}(z) \tilde{\underline{D}}^{q\beta}(z) \quad ((pi) \neq (qj)), \quad (2.31)$$

ahol a (pi, α) feltétel azt jelenti, hogy a (pi) pozíción egy α típusú atomot rögzítünk, valamint

$$\underline{D}^{p\alpha}(z) = (\underline{I} - \underline{t}^{p\alpha}(z)^{-1} \underline{\mathcal{T}}_c^{p0,p0}(z))^{-1}, \quad (2.32)$$

és

$$\tilde{\underline{D}}^{p\alpha}(z) = (\underline{I} - \underline{\mathcal{T}}_c^{p0,p0}(z) \underline{t}^{p\alpha}(z)^{-1})^{-1}. \quad (2.33)$$

A koherens potenciál közelítés réteges rendszerekre az alábbi módon fogalmazható meg

$$\sum_{\alpha=1}^{n_p} c_p^\alpha \langle \underline{\mathcal{T}}^{p0,p0}(z) \rangle_{p0,\alpha} = \underline{\mathcal{T}}_c^{p0,p0}(z) \quad (p = 1, \dots, N), \quad (2.34)$$

melyből (2.30) alapján

$$\sum_{\alpha=1}^{n_p} c_p^\alpha \underline{D}^{p\alpha}(z) = \underline{I} \quad (p = 1, \dots, N) \quad (2.35)$$

következik. Nyilvánvaló, hogy a fenti N számú egyenletet kell a (2.28), (2.29) és (2.32) egyenletek felhasználásával szimultán módon iteráltatni, hogy a kívánt $\underline{t}_c^p(z)$ mátrixokat megkapjuk. Ezután a (2.30) egyenlet által definiált SPO-ból a (2.8)-(2.12) egyenletek alapján számolhatjuk ki a megfelelő, atomi rétegekre és komponensekre felbontott, fizikai mennyiségeket.

2.5. A mágneses anizotrópia energia (MAE) számítása

Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **51**, 9552–9559 (1995)

Mint azt a bevezetőben már említettem, mágneses anizotrópia energiának nevezzük a rendszer teljes energiájának megváltozását a mágnesezettség (globális) irányának megváltozása következtében. A felületi merőleges mágneses

anizotrópia esetén a felülettel párhuzamos (\parallel) ill. az arra merőleges (\perp) irányt hasonlítjuk össze,

$$\Delta E = E(\parallel) - E(\perp) , \quad (2.36)$$

általában feltételezve, hogy uniaxiális rendszerekben a kitüntetett (\hat{z}) irányra merőleges síkban a mágneses anizotrópia elhanyagolhatóan kicsiny. A rendszer teljes energiájához képest azonban a MAE kb. tíz nagyságrenddel kisebb, így ΔE direkt számítása komoly numerikus nehézségbe ütközik. Ezért mi az ún. force theorem közelítést alkalmaztuk, mely a sűrűség funkcionál módszer variációs tulajdonságán alapul (Weinert és mtsi. 1985). Eljárásunk alapvetően két lépésből áll:

1. Önkonzisztens számítást végzünk a mágnesezettség merőleges irányítottsága mellett, mivel a számítási idő szempontjából ez a leggyorsabb (l. a 2.3. alfejezet végén).
2. Az így kapott önkonzisztens potenciálokat és effektív tereket változatlanul hagyva csak az egyrészecske energia (sávenergia, E_b) változását számítjuk ki:

$$\Delta E^{\text{LSDA}} \simeq \Delta E_b = E_b(\parallel) - E_b(\perp) . \quad (2.37)$$

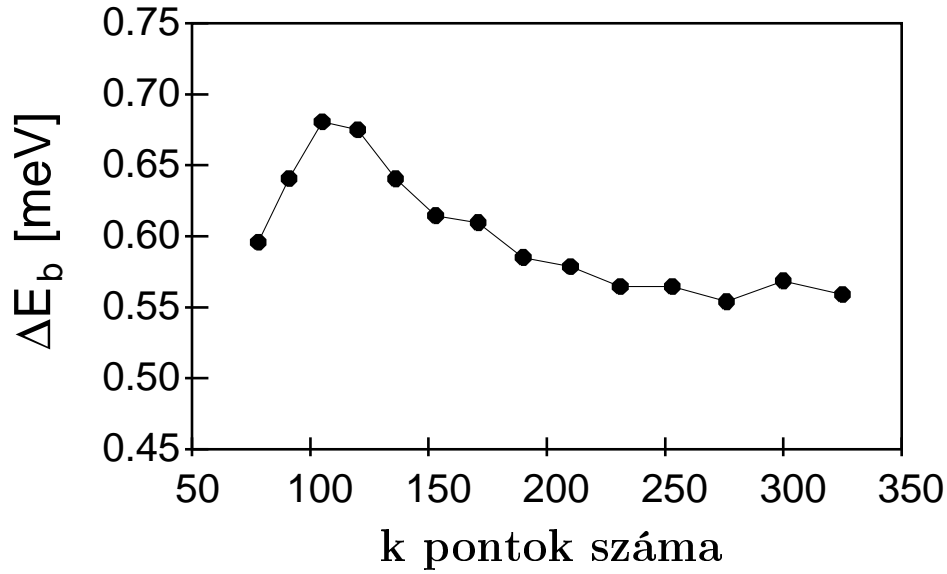
$$\Delta E_b = \sum_{p=1}^N \sum_{\alpha=1}^{n_p} c_{\alpha}^p \Delta E_{\alpha}^p , \quad (2.38)$$

$$\Delta E_{\alpha}^p = \int_{\epsilon_B}^{\epsilon_F} \Delta n_{\alpha}^p(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F) d\epsilon , \quad (2.39)$$

ahol $\Delta n_{\alpha}^p(\epsilon)$ az állapotsűrűség megváltozása a két irányra vonatkozóan. Fontos megjegyezni, hogy a 2. lépésben nem követeljük meg a töltésmegmaradást, ezért a (2.39)-es képletben a nagykanonikus potenciál változását kell számolnunk zérus hőmérsékleten.

A sávenergia anizotrópiájának (2.38)-as felbontása igen szemléletes rétegenkénti és komponensenkénti vizsgálatot tesz lehetővé. A (2.39)-es képletben szereplő energiaintegrál (2.10)-(2.12)-höz hasonlóan kontúr integrállá alakítható és különösebb numerikus nehézség nélkül elvégezhető. A számítás legkényesebb része a (2.27)-es Brillouin-zóna integrálás, melyet igen nagy precízitással kell elvégezni és minden rendszerre külön-külön kell tesztelni. Példaként bemutatom az Au(001) felületre helyezett Fe monoréteg sávenergia anizotrópiájának a felhasznált \vec{k}_{\parallel} -pontok szerinti konvergenciáját (2.1 ábra). Látható, hogy ΔE_b hozzávetőleg 0.57 ± 0.02 meV, tehát megbízhatóan 5%-os hibahatáron belül tudunk számolni. Számos esetben azonban

legalább 1000 \vec{k}_{\parallel} -pontot kellett vennünk, hogy hasonló pontosságot érjünk el.



2.1. ábra. A sávénergia anizotrópiájának konvergenciája a Brillouin-zóna irreducibilis szegmensében vett \vec{k}_{\parallel} -pontok száma függvényében Au(001)/Fe₁ monorétegre.

Az LSDA nem tartalmazza a relativisztikus áram-áram kölcsönhatást, így azt a (2.37)-es tag mellett külön figyelembe kell vennünk. Ehhez általában elegendő a klasszikus mágneses dipól-dipól kölcsönhatás, melyet 2D transláció invariancia esetén a következő egyszerű alakban írhatunk föl (Ryd egységben)

$$E_{dd} = \sum_{p,q=1}^N \frac{m_p m_q}{c^2} \hat{n}_p \underline{M}_{pq}^{dd} \hat{n}_q, \quad (2.40)$$

ahol m_p és \hat{n}_p a p -ik atomi réteg mágneses momentuma (μ_B egységekben) és annak iránya, valamint \underline{M}_{pq}^{dd} az ún. dipól-dipól Madelung konstans mátrix, melynek explicit kifejezését adtam meg Ewald összegzéssel. Megmutattam, hogy köbös rácsok (100) és (111) felületeire az

$$\underline{M}_{pq}^{dd} = M_{pq}^{dd} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

kifejezés érvényes, és ezáltal a mágneses dipól-dipól energia szögfüggése

$$E_{dd}(\Theta) = E_{dd}(\perp) + \Delta E_{dd} \sin^2(\theta), \quad (2.42)$$

ahol θ a mágnesezettség irányának a felület normálisával bezárt szöge és

$$\Delta E_{dd} = E_{dd}(\parallel) - E_{dd}(\perp). \quad (2.43)$$

Összefoglalva tehát a MAE két tagból áll:

$$\Delta E = \Delta E_b + \Delta E_{dd} , \quad (2.44)$$

ahol ΔE_b tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatásból eredő elektronszerkezeti járulékot, mely lehet pozitív és negatív előjelű is, míg a ΔE_{dd} mágneses dipól-dipól járulék mindig negatív (a síkbeli orientációt preferálja) és a rétegvastagsággal lényegében lineárisan nő. E két járulék versengése alakítja ki az adott rendszer alapállapotú mágnesezettségének irányát.

3. fejezet

A mágneses anizotrópia tanulmányozása egyszerűbb rendszerekben

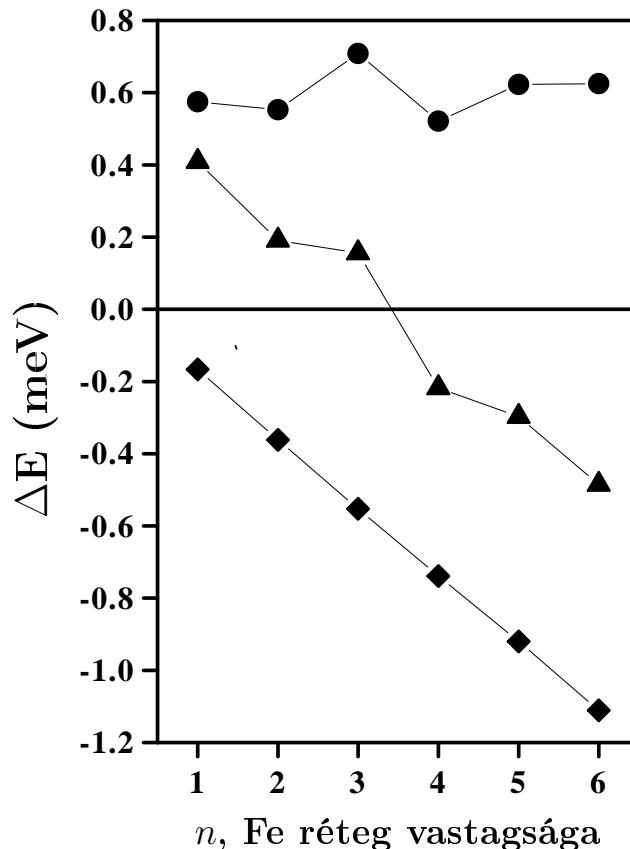
Ebben a fejezetben néhány olyan rendszerrel foglalkozom, melyben egy ultravékony mágneses (Fe vagy Co) vékonyréteg található valamely nemesfém (Au vagy Cu) feületén ill. a mágneses vékonyréteget egy újabb (általában nem-mágneses) fedőréteg zárja le. Ezek a rendszerek tehát csak egy vagy két határfelülettel rendelkeznek, így a felületi mágneses anizotrópiát befolyásoló tényezők, különös tekintettel a felületen és a határfelület(ek)en történő elektronszerkezeti módosulásokra, viszonylag tisztán tanulmányozhatók.

3.1. Au(001)/Fe

Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **51**, 9552–9559 (1995)

Az előző fejezetben leírt módszert először a lapon centrált köbös (fcc) Au szubsztrát (001) Miller indexű felületére felvitt vékony Fe filmek mágneses anizotrópia energiájának meghatározására alkalmaztuk. Tekintettel arra, hogy az fcc Au rácsállandója (7.68 a.u.) jó közelítéssel $\sqrt{2}$ -szöröse a bcc Fe rácsállandójának (5.42 a.u.), a bcc(001) Fe ultravékony réteg igen jó epitaxiális növekedést mutat fcc(001) Au felületen. Mivel azonban a vas jól oldódik aranyban, valamint alacsonyabb felületi energiája miatt az Au a felületen szegregálódik, kísérletileg elég nehéz tiszta Fe réteget előállítani Au szubsztráton, ill. a vékonyréteg termális stabilitása igen csekély. Felületi magneto-optikai Kerr effektus (SMOKE) méréssel Liu és Bader (1990) 100 K-en növesztett ultravékony Fe filmeknél 2.8 atomi réteg alatt a felületre

merőleges, annál nagyobb rétegvastagság esetén pedig síkbeli mágnesezettséget talált. Számításunkban a Fe réteg vastagságát 1 és 6 atomi réteg között változtattuk, miközben megtartottuk az fcc Au geometriáját. Természetesen így a kísérlettel csak trendjében összehasonlítható eredményeket várhattunk. A MAE-ra vonatkozó eredményeinket a 3.1 ábra szemlélteti.



3.1. ábra. Mágneses anizotrópia energia (háromszögek), sávenergia anizotrópia (körök) és mágneses dipól-dipól energia járulék (négyyszögek) az Au(001)/Fe_n vékonyrétegekben.

Mivel a ΔE_b sávenergia anizotrópia pozitív, megállapíthatjuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatásból eredő mágneses anizotrópia a rendszer merőleges mágnesezettségét preferálja. ΔE_b erősen változik $n \leq 4$ esetén, majd $n=5$ fölött 0.6 meV körül szaturálódik. A mágneses dipól-dipól járulék következtében $n=3$ és 4 között a mágneses tér iránya átfordul a síkba. Ez meglepően jó egyezés a kísérletileg tapasztalt átfordulási vastagsággal ($n_c \simeq 2.8$). *Ismereteim szerint a 3.1 ábra az irodalomban található első first principles szimuláció valamely mágneses vékonyréteg reorientációs átmenetére.*

A sávenergia anizotrópia és a pályamomentum anizotrópia rétegfelbontását a 3.1 ill. 3.2 táblázatok foglalják össze. A rétegek szerinti analízis azt

3.1. táblázat. ΔE_b atomi rétegenkénti járulécai meV egységekben az Au(001)/Fe $_n$ rendszerben. Fe(1) jelöli a felületi vas réteget (dőlt karakterek), Fe(n) (kövér karakterek) és Au(1) a két határfelületi réteget, míg Au(2) a határfelület alatti arany réteget.

n	Au(2) Au(1) Fe(n) ... Fe(2) Fe(1)							
1						-0.002	0.160	<i>0.454</i>
2				0.015	0.027	0.522	<i>0.034</i>	
3			0.025	0.078	0.585	-0.117	<i>0.168</i>	
4		0.028	0.087	0.514	-0.129	-0.088	<i>0.141</i>	
5		0.021	0.092	0.544	-0.123	-0.003	-0.086	<i>0.204</i>
6	0.021	0.085	0.543	-0.088	-0.033	-0.014	-0.031	<i>0.178</i>

3.2. táblázat. Számolt pályamomentum anizotrópiák, $\Delta m_{orb} = m_{orb}(\parallel) - m_{orb}(\perp)$, $10^{-3} \mu_B$ egységekben az Au(001)/Fe $_n$ rendszerben. A rétegek jelölése a 3.1 táblázattal megegyezők.

n	Au(2) Au(1) Fe(n) ... Fe(2) Fe(1)							
1					1.3	2.9	<i>-29.1</i>	
2				1.2	6.3	-37.3	<i>5.1</i>	
3			0.9	2.9	-30.2	-7.9	<i>8.3</i>	
4		1.2	1.7	-23.3	-1.3	0.3	<i>7.3</i>	
5		1.1	2.5	-25.2	2.1	-5.7	0.2	<i>4.3</i>
6	0.7	2.4	-26.3	-0.3	3.7	-2.2	0.5	<i>3.6</i>

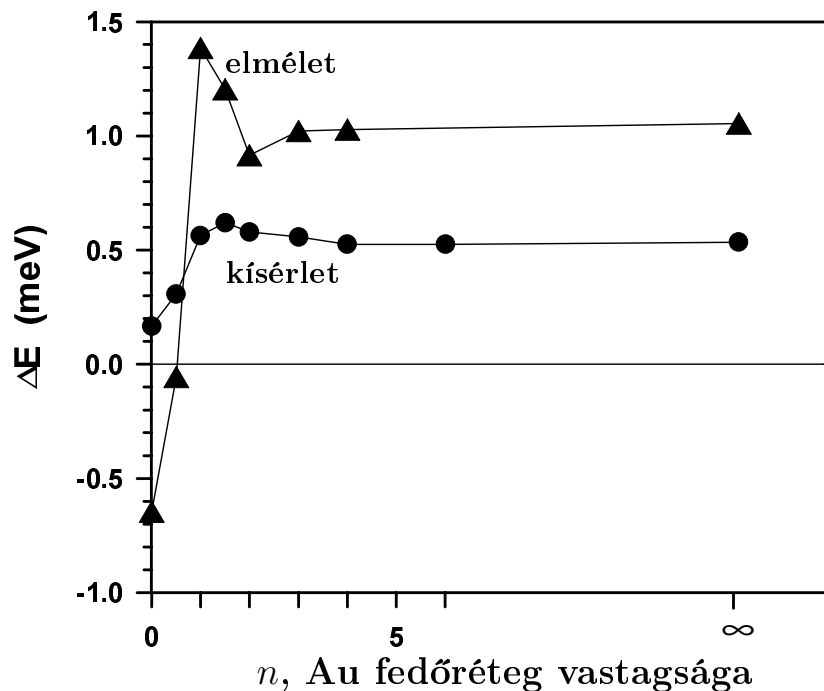
mutatja, hogy a nagy pozitív sávenergia anizotrópia túlnyomórészt az arany szubsztráttal közvetlenül szomszédos vas réteg, Fe(n), járuléka, és csak kisebb részben jön az Fe(1) felületi vas rétegből. A köztes vas rétegek járuléka ezekhez képest jóval kisebb. Az Fe(n) határréteg pályamomentum anizotrópiája (Δm_{orb}) a perturbációszámítás predikciójának megfelelően (l. az (1.3)-as képletet) ΔE_b -vel ellentétes előjelű, azaz negatív. Ez szemléletesen azt jelenti, hogy a mágnesezettség preferált irányában a pályamomentum nagyobb, mint az arra merőleges irányban. A felületi rétegen viszont éppen ennek ellenkezőjét tapasztaljuk: a pozitív sávenergia anizotrópiát ugyanolyan előjelű pályamomentum anizotrópia kíséri. *Ez tehát rámutat arra a tényre, hogy több atomi rétegből álló filmekben a perturbáció számításból levezetett (1.3)-as összefüggés lokálisan, azaz rétegfelbontásban, csak részlegesen teljesül.*

3.2. Au(111)/Co/Au

Újfalussy B., Szunyogh L., Bruno P., Weinberger P., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1805–1808 (1996)

Szunyogh L., Újfalussy B., Bruno P., Weinberger P., *J. Magn. Magn. Mater.* **165**, 254–257 (1997)

Már az előző eredmények is arra utaltak, hogy a mágneses film és a nem-mágneses szubsztrát közötti kölcsönhatás jelentős szerepet játszhat a MAE alakításában. A 90-es évek közepén igen nagy érdeklődés mutatkozott kísérleti oldalról az ún. *anomális merőleges mágneses anizotrópia* vizsgálatára ill. értelmezésére (Engel és mtsi. 1993; Wiedmann és mtsi. 1993; Ould-Mahfoud és mtsi. 1993; Beauvillain és mtsi. 1994). A jelenség lényege abban áll, hogy ha egy mágneses ultravékony filmre további nem-mágneses fedőréteget viszünk föl, akkor a rendszer mágneses anizotrópia energiája a fedőréteg vastagságával meredeken nő és egy-két atomi rétegnél maximumot mutat. Az Au(111)/Co₁/Au_n rendszerre végeztünk MAE számításokat *n* függvényében.

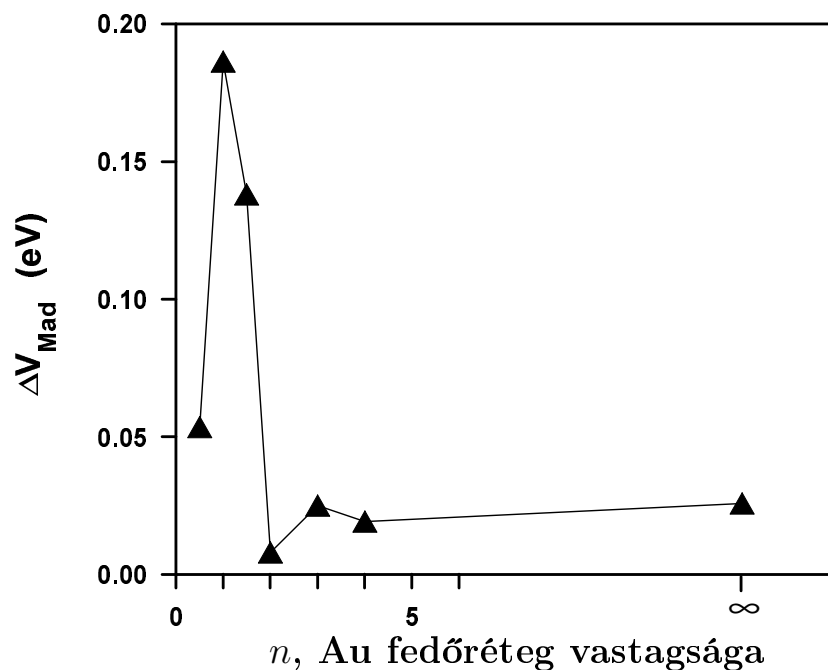


3.2. ábra. Mágneses anizotrópia energia az Au(111)/Co₁/Au_n rendszerben. Háromszögek: számolt értékek, körök: kísérleti eredmények (Beauvillain és mtsi. 1994).

Mint az a 3.2 ábrán látható, a számítások igazolták a MAE kísérletben tapasztalt, karakterisztikus viselkedését. A kvantitatív eltérések, elsősorban

az $n > 1$ fedettségek esetén kapott nagyobb MAE értékek, azzal magyarázhatók, hogy számításainkban nem vettük figyelembe a Co és Au atomok határfelületi keveredését: a rendezetlenség csökkenti a sávszerkezet elfajulásainak a spin-pálya kölcsönhatás által okozott felhasadását, mely az FMA egyik meghatározó elektronszerkezeti eredete.

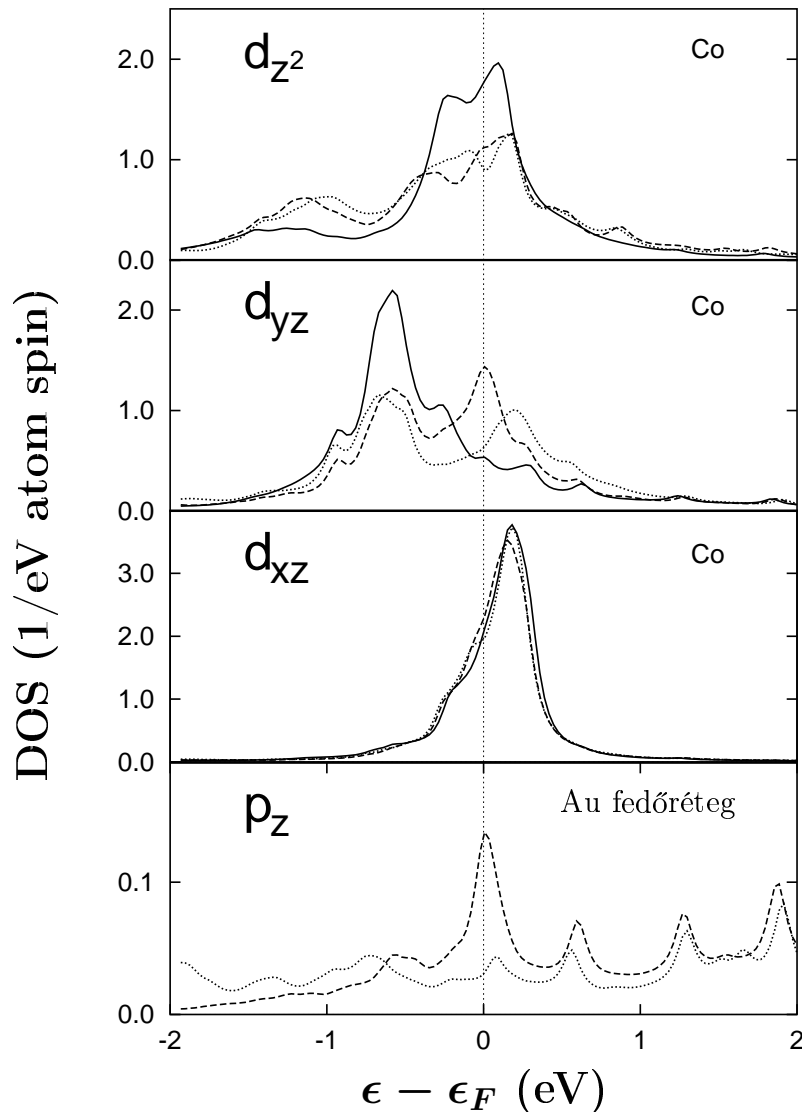
A másodrendű perturbációszámítás kvalitatív eredményeire támaszkodva (Stöhr, König 1995) megmutattuk, hogy a jelenség háttérében olyan elektronszerkezeti változások állnak, melyben a döntő tényező a kobalt és arany atomok elektronállapotai közötti hibridizáció. Ezen változások kiváltó oka pedig egyszerűen megfogalmazva az a tény, hogy a fedőréteg vastagságának függvényében a Co spin kisebbségi (minority) $3d$ sávjának és a vele hibridizáló szomszédos Au réteg sp sávjának relatív energetikai pozíciója változik.



3.3. ábra. A Co monoréteg és a fölötté elhelyezkedő Au atomi réteg Madelung potenciáljának különbsége, $V_{\text{mad}}^{\text{Au}} - V_{\text{mad}}^{\text{Co}}$, az Au(111)/Co₁/Au_n rendszerben az n függvényében.

A sávok eltolódását kvantitatíven jól leírhatjuk az egyes rétegek Madelung potenciáljának változásával. A Madelung potenciál egy egyszerű kristály belsejében konstans, de a felület felé közeledve egyösen fluktuál. A 3.3 ábrára a Co monoréteg és a fölötté lévő Au atomi sík Madelung potenciálja közötti különbséget rajzoltuk fel az Au fedőréteg vastagsága függvényében. Legnagyobb a különbség $n=1$ körül, ahol legnagyobb a mágneses anizotrópia energia is. Ebben az esetben helyezkednek ugyanis energetikailag legmagasabban a Co fölötti első Au monoréteg d ill. sp sávjai és ezáltal az Co minority

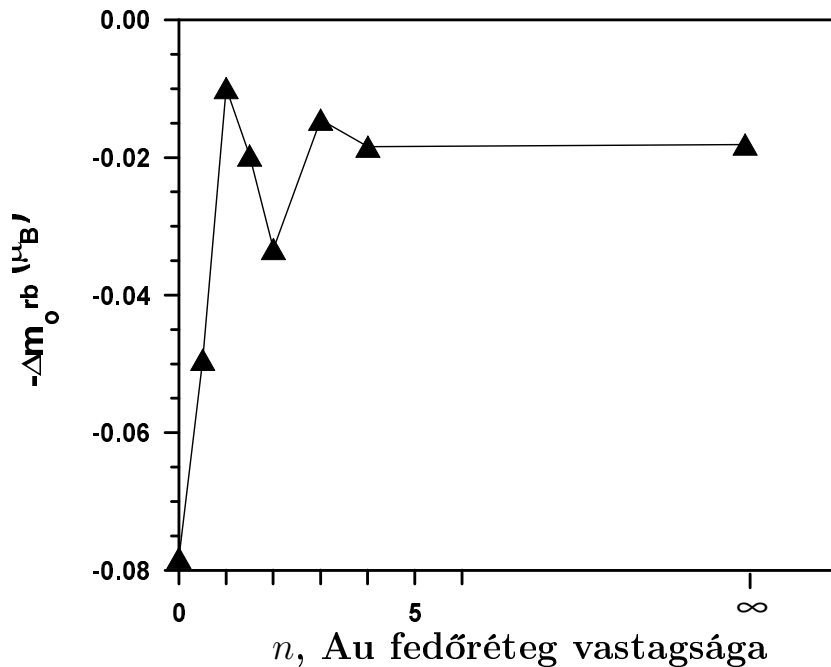
d -sávjával legnagyobb az átfedés ill. hibridizáció. Növelve n -et, ez az Au monoréteg mélyebbre kerül a felület alá és a Madelung potenciálja lecsökken, ami a Co-tal való hibridizációt ismét csökkenti. *Levonhatjuk a következtetést, hogy az anomális merőleges anizotrópiát a határréteg hibridizáción keresztül végsősoron a felületi töltés- és elektrosztatikai viszonyok szabályozzák.*



3.4. ábra. A Co monoréteg d_{z^2} , $d_{yz,xz}$ és a fölötte elhelyezkedő Au atomi réteg p_z karakterű kisebbségi spin állapotossűrűségei a Fermi szint közelében az Au(111)/Co₁/Au _{n} rendszerben. Folytonos vonal: $n = 0$, szaggatott vonal: $n = 1$, pontozott vonal: $n = 2$.

Az elektronszerkezeti változások illusztrálására a 3.4 ábrán bemutatom a Co kisebbségi spin állapotossűrűségének azon pályakomponenseit, melyek az MAE szempontjából lényeges szerepet játszanak: $n=0$ esetben a Fermi szint körül domináló d_{z^2} típusú állapotok a $d_{yz,xz}$ állapotokkal hatnak kölcsön a

spin-pálya csatolás következtében, mely a a síkkal párhuzamos spin-beállást eredményez; $n=1$ esetében a d_{z^2} karakterű DOS lecsökken a Fermi szint körül, a d_{zy} karakter erősödik, mely a d_{zx} állapotokkal kölcsönhatva a spin z irányú beállítását okozza; míg $n=2$ -re ez a tendencia a d_{zy} sáv kismértékű eltolódása miatt némileg csökken. Az ábrából világosan leolvasható, hogy a Co d_{yz} DOS változása az Au fedőréteg p_z DOS változásával korrelál ($n = 1$), ami a fent említett $sp-d$ hibridizáció következménye.



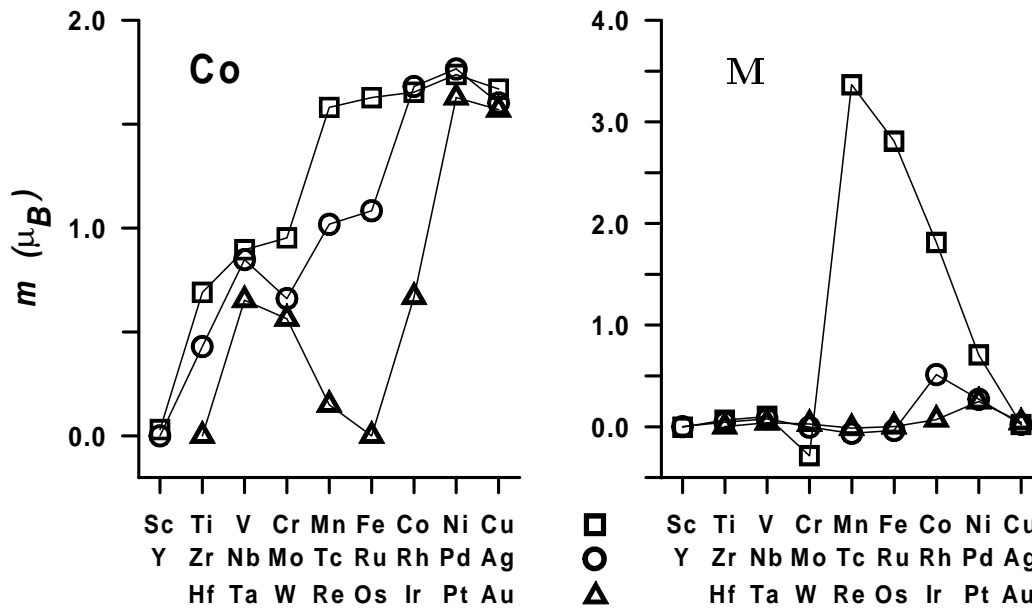
3.5. ábra. A Co monoréteg pályamomentum anizotrópiája az Au(111)/Co₁/Au_n rendszerben az n függvényében.

Érdeemes még megvizsgálni a MAE és a pályamomentum anizotrópia közötti kapcsolatot. A 3.5 ábrán a Co monoréteg pályamomentum anizotrópiáját (ill. annak ellentettjét) ábráztuk. Összehasonlítva a 3.2 ábrával, kiváló korreláció figyelhető meg a MAE változásával az n függvényében. Ez nem áll ellentétben az előző alfejezetben az Au(001)/Fe rendszer kapcsán tett állítással, hiszen itt a MAE egyetlen atomi réteg (Co) járuléka. Mindazonáltal az (1.3) képlet szigorúan véve itt sem alkalmazható, hiszen Δm_{orb} végig negatív, míg a MAE előjelet vált. Amennyiben mindkét mennyiséget pl. az $n=0$ -nál felvett (fedőréteg nélküli) értékükhöz viszonyítanánk, az (1.3)-as összefüggés jó közelítéssel fennállna, ami nem meglepő, hiszen first principles számításaink eredményeit valóban kiválóan tudtuk szemléltetni a perturbáció számítás segítségével.

3.3. Cu(001)/Co/M

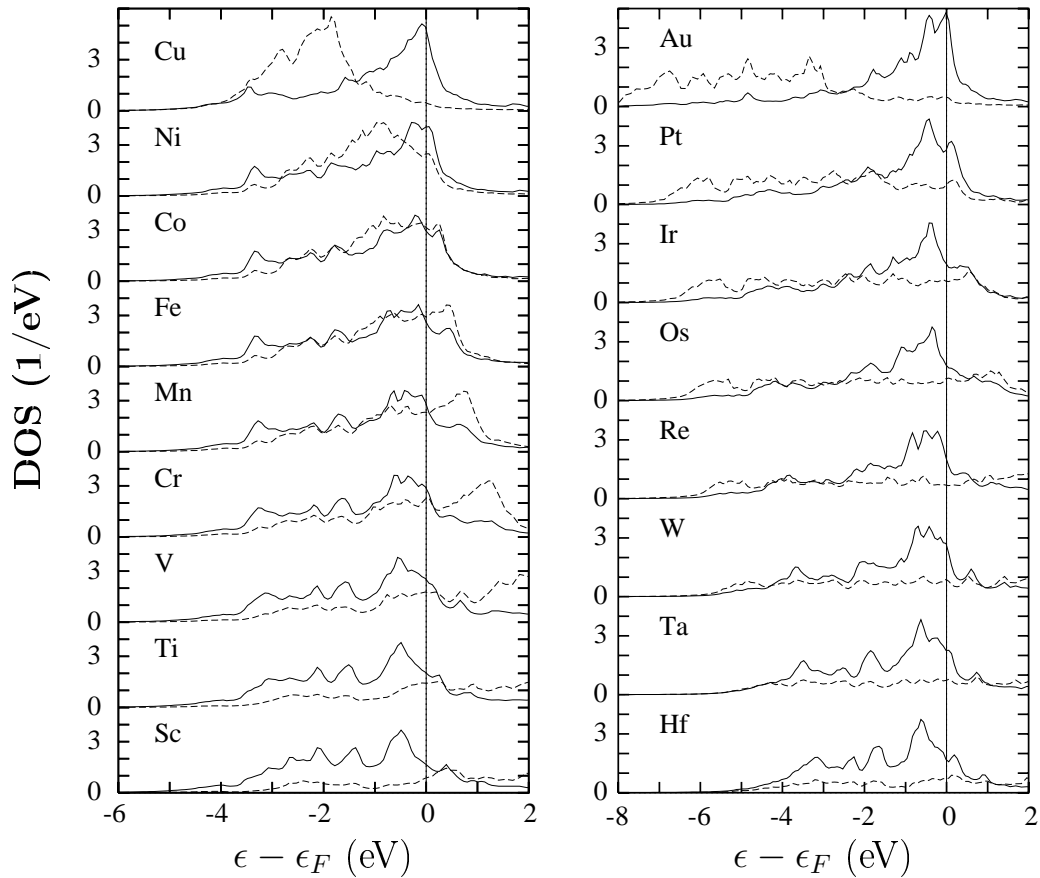
Szunyogh L., Újfalussy B., Pustogowa U., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **57**, 8838-8841 (1998)

Az anomális FMA-t kísérletileg főként Co vékonyrétegekben tanulmányozták valamely nemesfém valamint Pd és Pt fedőrétteg alkalmazásával. Ezekben a rendszerekben az effektus az elektronszerkezet finom részleteinek előző alfejezetben tárgyalt változásaival magyarázható ill. Pd és Pt esetében a fedőrétteg spin-polarizációja is szerepet játszhat. Kérdés, hogy más fedőréttegek is hasonló effektust váltanak-e ki, azaz használhatók-e az FMA növelésére vékonyrétegekben? Ennek megválaszolására szisztematikus vizsgálatot végeztünk az összes 3d, 4d ill. 5d átmeneti fém (M) fedőréttegre Cu(001)/Co₁ monoréttegen. Mivel nem vizsgáltuk az egyes rendszerek energetikai stabilitását (pl. az optimális geometriai szerkezet ill. mágneses rendeződés szempontjából), az általunk vizsgált rendszerek sok esetben hipotetikusak. Mindazonáltal az alapvető elektronszerkezeti változások és az azokból következő trendek mérvadónak tekinthetők.



3.6. ábra. A Co monorétteg és az M fedőrétteg mágneses momentuma a Cu(001)/Co₁/M₁ rendszerben.

Az 3.6 ábra az önkonzisztensen számított mágneses momentumokat mutatja be. Látható, hogy a Co mágneses momentuma a fedőrétteg szerinti sorokban lefelé haladva egy küszöb elérése után (3d: Mn, 4d: Rh, 5d: Pt)



3.7. ábra. A Co monoréteg (folytonos vonal) és a fedőréteg (szaggatott vonal) paramágneses állapotossűrűsége Cu(001)/Co₁M₁ rendszerben $M=3d$ (baloldali panel) és $M=5d$ (jobboldali panel) átmeneti fémekre.

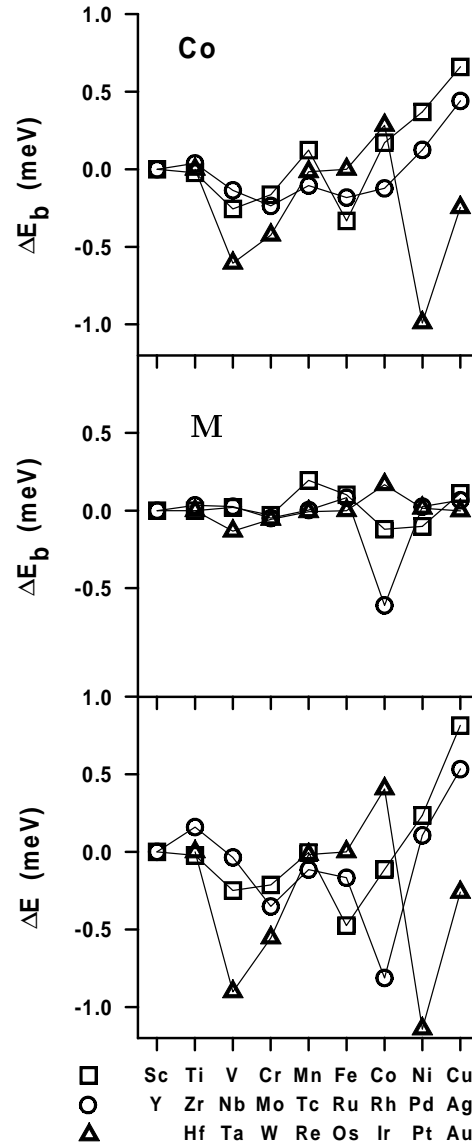
fokozatosan csökken és, jóllehet ezután még egy lokális maximumon halad át, a sorok alján eltűnik. A fedőréteg mágneses momentuma minden sorban karakterisztikus maximumot, melynek pozíciója megegyezik a Co mágneses momentumában megfigyelt küszöbvel.

Megmutattuk, hogy ezek a robusztus változások a rendszer mágneses viselkedésében konzisztensek az itineráns ferromágnesség egyszerű Stoner-mo-
deljével. Eszerint ugyanis a ferromágnesség létrejöttének feltétele

$$I n(\epsilon_F) > 1$$

ahol I az ún. Stoner-paraméter és $n(\epsilon_F)$ a paramágneses fázisban a Fermi szinten vett állapotossűrűség. A paramágneses állapotban számolt állapotossűrűségeket az $M=3d$ és $5d$ esetekre a 3.7 ábra szemlélteti. Innen leolvasható, hogy $n(\epsilon_F)$ változásai a fedőréteg függvényében összekapcsolhatók a mágneses momentumok 3.6 ábrán mutatott karakterisztikus változásaival. Különösen jól megfigyelhető az $5d$ sorozatban $n(\epsilon_F)$ minimuma Os-nál ill. utána a lokális maximum W-nál ill. Ta-nál, ami teljes mértékben korrelál a Co monoréteg

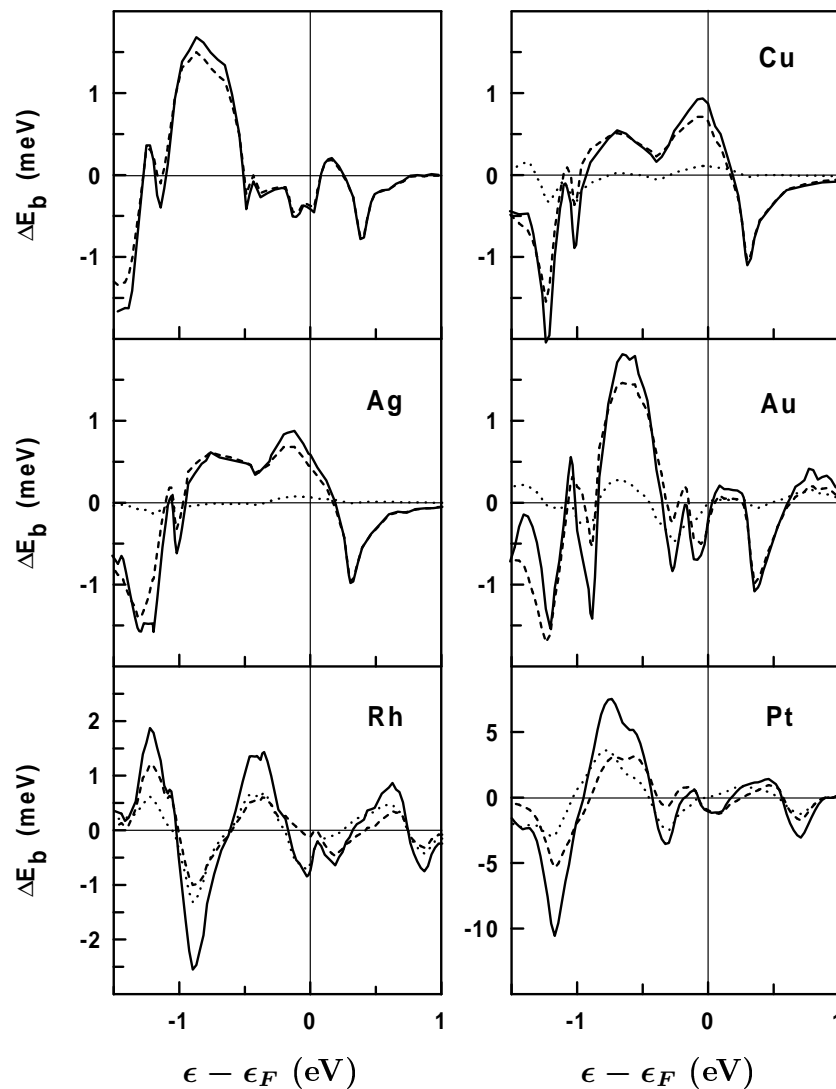
mágneses momentumának viselkedésével. A 3.7 ábrából az is nyilvánvaló, hogy egy adott sorban felfelé haladva, a fedőréteg d sávjának növekvő betöltődése miatt a d sáv fokozatosan lefelé tolódik el és emiatt a Co d sávjával való átfedése ill. hibridizációja megváltozik.



3.8. ábra. Mágneses anizotrópia energiák a Cu(001)/Co₁/M₁ rendszerben. A felső és középső panelek rendre a Co monoréteg és a fedőréteg sávenergia anizotrópiáját ábrázolják, míg az alsó panel a teljes MAE-t mutatja a mágneses dipól-dipól járulékkal együtt.

A 3.8 ábrából látható, hogy a MAE változása a fedőréteg függvényében sokkal bonyolultabb, mint a mágneses momentumok változása. Ez várható is volt, hiszen az elektronszerkezet kis változásai érzékenyen befolyásolhatják a MAE-t. Figyelembe véve, hogy fedőréteg nélküli Co monoréteg esetében

$\Delta E_b = -0.38$ meV adódott, a legtöbb fedőréteg növeli a MAE-t. Egy adott sorra jellemző, hogy a MAE többször is előjelet vált. A $3d$ és $4d$ sorban fentről (Cu és Ag) lefelele haladva, kb. a sor közepéig (Fe ill. Ru) a Co sávenergia anizotrópia járuléka egy nagy pozitív értékről fokozatosan lecsökken, majd alternálni kezd. Meglepő a Co monoréteg negatív járuléka Au és főként Pt fedőréteg esetén. A fedőréteg ΔE_b járuléka általában kicsiny, egyedül a Rh ad szignifikáns negatív járulékot a MAE-hoz.



3.9. ábra. Sávenergia anizotrópiák a legmagasabb betöltött energia függvényében a Cu(001)/Co₁ (balra fent) és a Cu(001)/Co₁/M₁ rendszerben ($M = \text{Cu, Ag, Au, Rh, Pt}$). Folytonos vonal: ΔE_b , szaggatott vonal: ΔE_b^{Co} , pontozott vonal: ΔE_b^M .

Világos, hogy ΔE_b fent megfigyelt változásaiban a Co ill. az M fedőréteg d sávjainak betöltöttsége játssza a fő szerepet. Ezért célszerű a legmagasabb

betöltött energiaszint változtatásával analizálni ΔE_b -t:

$$\Delta E_b(\epsilon) = \int_{\epsilon_b}^{\epsilon} d\epsilon' \Delta n(\epsilon') (\epsilon' - \epsilon). \quad (3.1)$$

A Fermi szint körül, lényegében a Co kisebbségi spin (minority) d sáv tartományában, ezt a függvényt ábrázoltam a Cu(001)/Co₁ monorétegre és néhány szelektált fedőréteg esetére a 3.9 ábrán, ahol a Co monoréteg ill. a fedőréteg járulékát is külön feltüntettem. Fedetlen Co monoréteg esetében $\Delta E_b(\epsilon)$ egy 1.5 meV-os maximumot ér el a Fermi szinthez viszonyítva -0.9 eV-nál, majd meredeken csökken és negatív értékeket vesz föl egészen a Fermi szint fölötti energiáig. $\Delta E_b(\epsilon)$ ezen viselkedése hasonlóan értelmezhető, mint az Au(111)/Co₁ esetben (l. a 3.4 ábrát): a $d_{xz,yz}$ állapotoknak minimumuk van közvetlenül a Fermi szint alatt, míg a d_{z^2} állapotok sűrűség maximális ϵ_F körül.

A Cu és Ag fedőrétegek esetén $\Delta E_b(\epsilon)$ ϵ_F alatti maximuma kiszélesedik és feljebb tolódik, ezáltal $\Delta E_b(\epsilon_F)$ viszonylag nagy pozitív értéket vesz föl. Ez az effektus teljes mértékben szinonim a Au(111)/Co₁/Au₁ rendszerben talált sávenergia anizotrópia növekedéssel és ugyancsak az $sp-d$ hibridizáció által létrejött Co $d_{xz,yz}$ és d_{z^2} állapotok sűrűség változásokkal magyarázható. Mint a 3.9 ábráról látható, Au fedőréteg esetén a $\Delta E_b(\epsilon)$ görbe igen hasonló a fedetlen Co monoréteg görbéjéhez, ami az Au és Co közötti gyenge hibridizációt jelzi ebben az esetben.

A Rh és Pt fedőréteg ΔE_b járuléka megközelítően azonos a Co monoréteg járulékával lényegében a teljes vizsgált energiatartományban. Ez elsősorban a Rh és Pt spin-polarizációjával magyarázható (l. a 3.6 ábrát). Különösen a Pt esetében figyelemre méltó, hogy $\Delta E_b(\epsilon)$ esetenként majd egy nagyságrenddel nagyobb értékeket vesz fel a nemesfém fedőréteg rendszerekhez képest. Jól lehet aktuálisan $\Delta E_b(\epsilon_F)$ negatív, nem meglepő, hogy más rendszerekben, pl. a Co/Pt multirétegekben, a merőleges mágneses anizotrópia erőteljes tendenciáját tapasztalták (Lin és mtsi. 1991), melyet számításokkal is igazoltunk (Pustogowa U., Zablouidil J., Uiberacker C., Blaas C., Weinberger P., Szunyogh L., Sommers C., *Phys. Rev. B* **60**, 414-421 (1999)).

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a különböző átmeneti fém monorétegekkel fedett Co monoréteg mágneses momentuma és anizotrópia energiája között nincsen szoros kapcsolat. Az anomális merőleges anizotrópia, a kísérleti tapasztalatoknak megfelelően, olyan rendszerekre jellemző, ahol a fedőréteget a periódusos rendszer átmeneti fém sorainak végén lévő elemek alkotják.

4. fejezet

A Cu(001)/Fe rendszer

A réz szubsztráton növesztett vas filmek ill. multirétegek talán a legkiterjedtebben vizsgált mágneses vékonyrétegek rendszerek. A kitüntetett érdeklődést elsősorban az indokolja, hogy ezek a vas filmek a majdnem tökéletes rácsállandó egyezés miatt megőrzik a lapcentrált köbös (fcc) struktúrát (γ -Fe), mely a vas tömb állapotában alacsony hőmérsékleten instabil. Elméleti számítások (Andersen és mtsi. 1977; Kübler 1981; Wang és mtsi. 1985; Pinski és mtsi. 1986) kimutatták, hogy a réz rácsállandóján a tömbi vas alapállapota antiferromágneses, de energetikailag közel van a ferromágneses állapothoz. Így nem meglepő, hogy elsősorban a vas film növesztési hőmérsékletétől függően a kísérletek gazdag mágneses struktúrát mutattak ki (Pescia és mtsi. 1987; Stampanoni és mtsi. 1988; Allenspach, Bischof 1992; Cheng és mtsi. 1993; Allenspach 1994; Detzel és mtsi. 1995; Baudalet 1995). A hőkezeléssel növesztett (HN) filmek két típusát különböztetjük meg: alacsony hőmérsékleten (90 K) növesztett majd 300 K-re hevített (AH) filmek (Allenspach, Bischof 1992), ill. szobahőmérsékleten (300 K) növesztett (SH) filmek (Thomassen és mtsi. 1992). Ezeket a filmeket alapjában véve három csoportba sorolhatjuk (Giergiel és mtsi. 1995) :

1. 2-5 atomi réteg vastagságú filmek: kb. +4 %-os tetragonális disztorziójú (fct) filmek, ferromágneses rendeződéssel és a film síkjára merőleges mágnesezettséggel. Meglehetősen nagy (több atomi rétegre kiterjedő) felületi durvaság mutatható ki. Alacsonyabb felületi szabad energiája miatt a réz felületi szegregálódása és Cu/Fe/Cu szendvics struktúra képződése valószínűsíthető (Detzel, Memmel 1994; Giergiel és mtsi. 1995). Az SH filmekben 4-5 atomi réteg vastagságnál kismértékű fcc-bcc struktúrális átrendeződés indul meg.
2. 5-10 atomi réteg vastagságú filmek: az AH filmek továbbra is fct struk-

túrájúak és ferromágneses rendeződésűek; az SH filmekben majdnem perfekt fcc struktúra mellett antiferromágneses rendeződés jelenik meg, viszont a felület közeli két atomi réteg ferromágnesesen csatolt és a filmre merőleges irányban tetragonálisan nyújtott. Az AH filmek 5-6 atomi réteg vastagságnál reorientációt mutatnak (Allenspach, Bischof 1992), míg az SH filmek az egész tartományban megőrzik merőleges mágnesezettségüket.

3. 10 atomi réteg feletti vastagságú filmek: Az SH filmeknél 10-12 atomi réteg vastagságnál fcc-bcc átalakulás történik, melyet $\perp \rightarrow \parallel$ reorientáció kísér.

A hőkezeléses növesztés (HN) mellett Jenniches és mtsi. (1999) sikerrel alkalmazták a pulzusos lézer növesztéses (PLN) módszert. Ezeknél a filmeknél kiváló réteges növekedést mutattak ki és a felületi durvaság szinte elenyésző volt. 2 és 5 atomi réteg vastagság között síkbeli mágnesezettséget észleltek, mely 5 és 7 atomi réteg vastagság között merőleges irányba fordult és legalább 10 atomi réteg vastagságig fennmaradt. Efölött itt is fcc-bcc átalakulás játszódott le $\perp \rightarrow \parallel$ reorientációval.

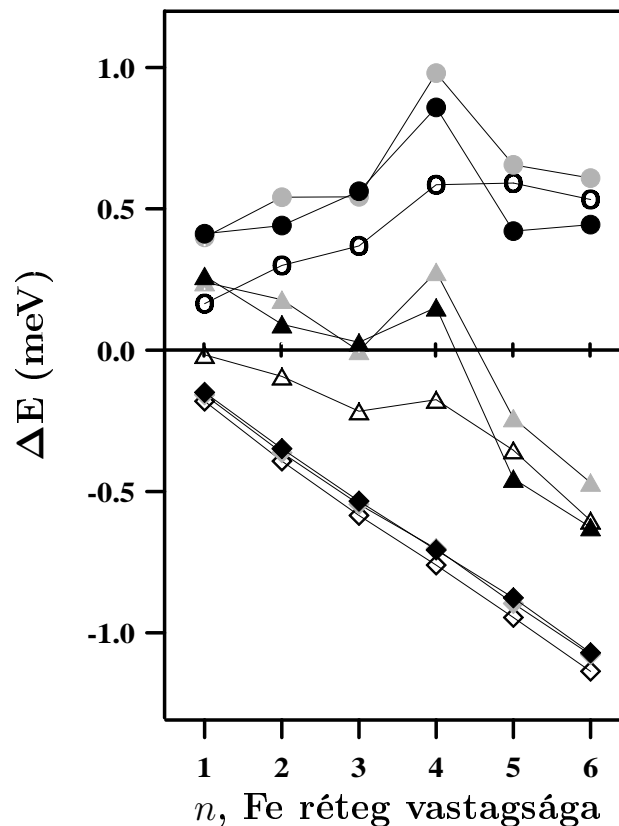
A bonyolult és sokszor ellentmondásos kísérleti tapasztalatok konzisztens elméleti magyarázata nyilvánvalóan nehéz feladat. Munkáinkban a ferromágneses valamint az antiferromágneses fázisokat külön-külön tanulmányoztuk, miközben a réz szubsztrát fcc geometriai struktúráját követő perfekt réteges növekedést feltételeztünk. Mindamellet, hogy több kísérleti vonatkozással jó egyezést tapasztaltunk, elsődlegesnek tekintettük azon effektusok tanulmányozását, melyek a mágnesez anizotrópiát alapvetően befolyásolják ezekben a filmekben. Mint kiderül, a Cu(001)/Fe rendszer kiváló lehetőséget nyújt a határréteg hibridizáció, a szubsztrát spin-pálya kölcsönhatása és a határréteg menti keveredés (interdiffúzió) vizsgálatára a MAE szempontjából. Kiemelt jelentőséget tulajdonítunk a mágnesez rendeződés (konfiguráció) szerepének a MAE alakításában.

4.1. A ferromágneses fázis

Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **54**, 9883–9889 (1996)

Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Properties of Complex Inorganic Solids* (ed. A. Gonis *et al.*, Plenum Press, New York, 1997), pp. 181–185

A ferromágneses Cu(001)/Fe_n/Cu_m rendszerek mágneses anizotrópia tulajdonságait vizsgáltuk $n = 1, \dots, 6$ valamint $m = 0, 1$ és ∞ esetekre. Az $m = 0$ eset nyilvánvalóan a szabad (vákuum) felülettel rendelkező vasréteget jelenti, melyre további réz atomi réteget helyeztünk ($m = 1$), míg az $m = \infty$ eset egy bal és jobb oldalról félvégtelen réz mátrixba szimmetrikusan beágyazott vas filmet jelöl. A számolt mágneses anizotrópia energiákat a 4.1 ábra mutatja. Valójában az $m = 2$ esetre is elvégeztük a számításokat, mely kvalitatíve kevésbé különbözött az $m = 1$ esettől.



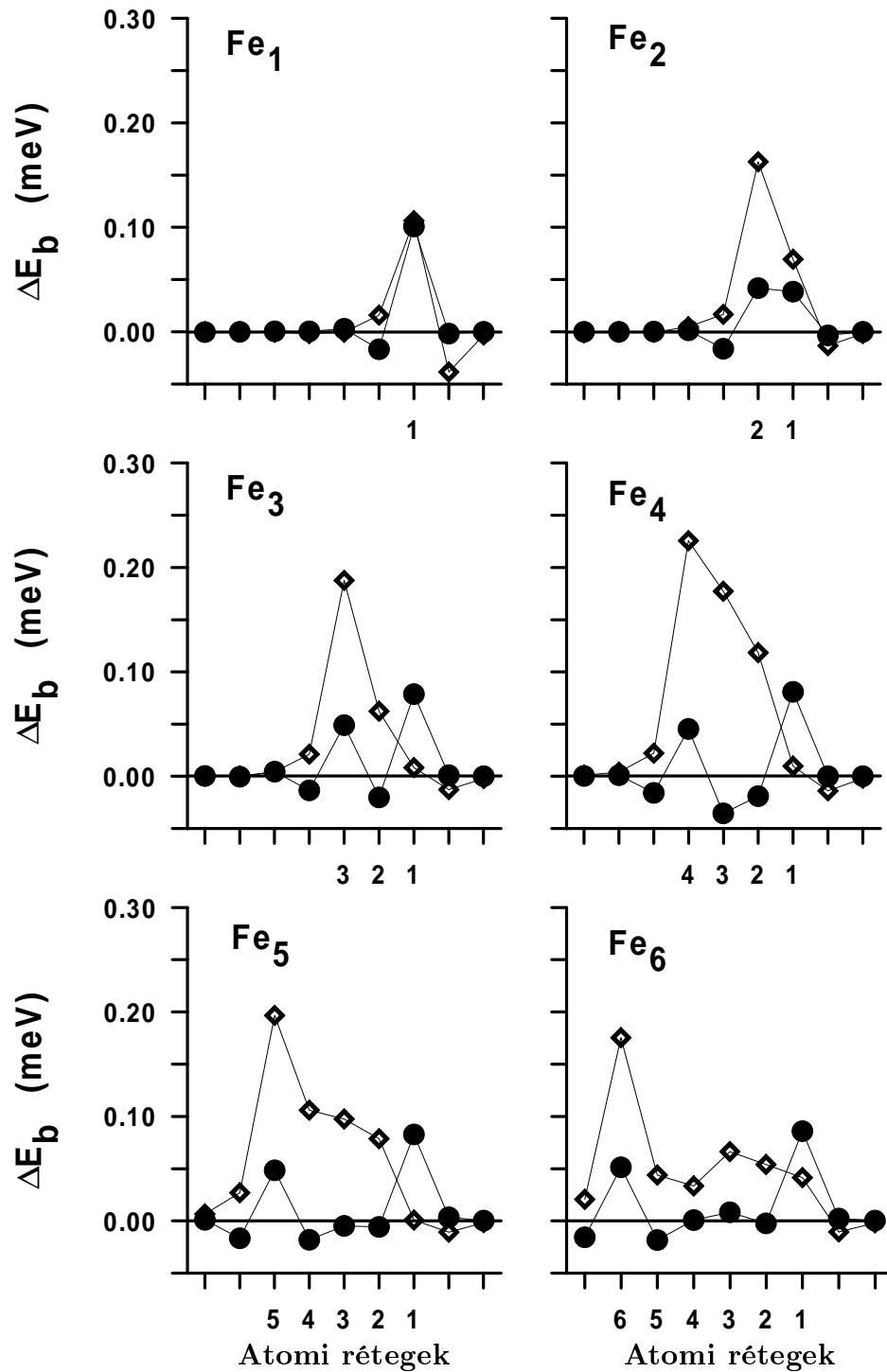
4.1. ábra. Mágneses anizotrópia energiák a Cu(001)/Fe_n/Cu_m vékonyrétegekben. Körök: ΔE_b sávénergia járulék, négyzetek: ΔE_{dd} mágneses dipól-dipól energia járulék, háromszögek: MAE, $\Delta E = \Delta E_b + \Delta E_{dd}$. Üres szimbólumok: $m = 0$, satírozott szimbólumok: $m = 1$, teli szimbólumok: $m = \infty$.

Hasonlóan az Au(001)/Fe rendszerhez, a sávenergia, azaz a spin-pálya kölcsönhatásból eredő, járulék mindig pozitív, tehát a mágnesezettség merőleges beállítását preferálja. Szabad felület esetén ($m = 0$) ez azonban még $n=1$ -re (Fe monoréteg) sem elegendő ahhoz, hogy a negatív mágneses dipól-dipól energia járulékot kompenzálja. Így ebben az esetben az alapállapotú mágnesezettség a vas film vastagságától (n) függetlenül a rétegekkel párhuzamos irányúnak adódik. Cu fedőréteg jelenlétében ($m = 1$ és ∞) az $n \leq 4$ atomi réteg vastagságú Fe filmek sávenergia anizotrópiája jelentősen megnő, minek következtében ezen filmek mágneses anizotrópia energiája pozitív lesz és csak 4 atomi réteg vastagság fölött következik be a reorientációs átmenet. Figyelemre méltó, hogy $n=4$ -nél ΔE_b éles maximummal rendelkezik.

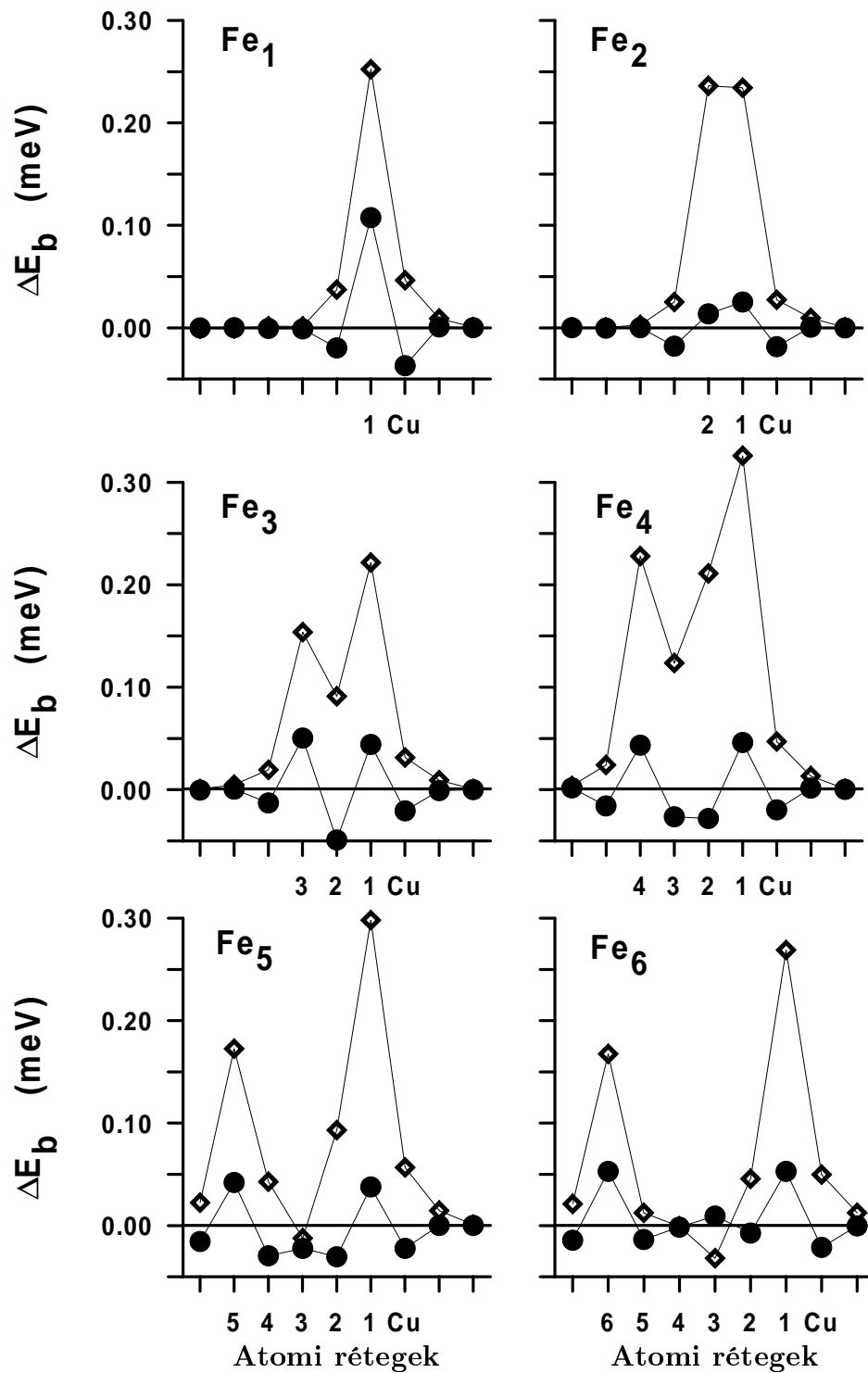
A sávenergia anizotrópia rétegenkénti felbontását az $m = 0$ és 1 esetekben a 4.2 és 4.3 ábrák mutatják. Ezekon az ábrákon külön feltüntettem a minority (kisebbségi) és majority (többségi) sávok járulékait. Ez a felbontás a megfelelő nem-relativisztikus (ℓ, m, σ) bázison ugyan formálisan megtehető, de – mivel a spin-pálya kölcsönhatás a kétféle spinállapotot összekapcsolja – csak közelítő jellegű szemléltetést tesz lehetővé. A szabad felülettel rendelkező Fe film sávenergia anizotrópiájához a réz melletti határréteg minority sávja járul legnagyobb mértékben. Ez a járulék a felület felé haladva fokozatosan csökken és a felületi rétegen lényegében eltűnik. A majority sáv járuléka viszont érdekes módon majdnem szimmetrikus térbeli eloszlású: a felületen némileg nagyobb mint a határrétegen, a kettő között pedig egyértelműen lecsökken. Ezt úgy magyarázhatjuk, hogy a film szélén fellépő töltésvesztés a majority sávokat a Fermi szint irányába tolja el, így azok – a másodrendű perturbáció számítás értelmében – hangsúlyozottabban járulnak hozzá a mágneses anizotrópiához. A határréteg minority sávjának erőteljes járulékát pedig a szomszédos réz atomokkal való hibridizáció okozza.

4.1.1. A határréteg hibridizáció hatása

Ez utóbbi effektus egészen nyilvánvalóvá válik a 4.3 ábrán ($m=1$). Itt ugyanis a Cu fedőréteg melletti Fe atomi réteg minority sávja még a határrétegnél is nagyobb járulékot ad. A jelenség analóg az Au(111)/Co₁/Au_n és Cu(001)/Co₁/M₁ rendszereknél tárgyalt anomális merőleges mágneses anizotrópiával, amit a 4.4 ábrán ismételtén a releváns állapotösszetételek Fermi szint körüli változásaival interpretálunk egy 6 atomi réteg vastagságú Fe film-ben. Itt jól megfigyelhető a Cu fedőréteg p -típusú állapotainak és a mellette lévő Fe réteg d -típusú állapotainak hibridizációja a minority sávban a Fermi

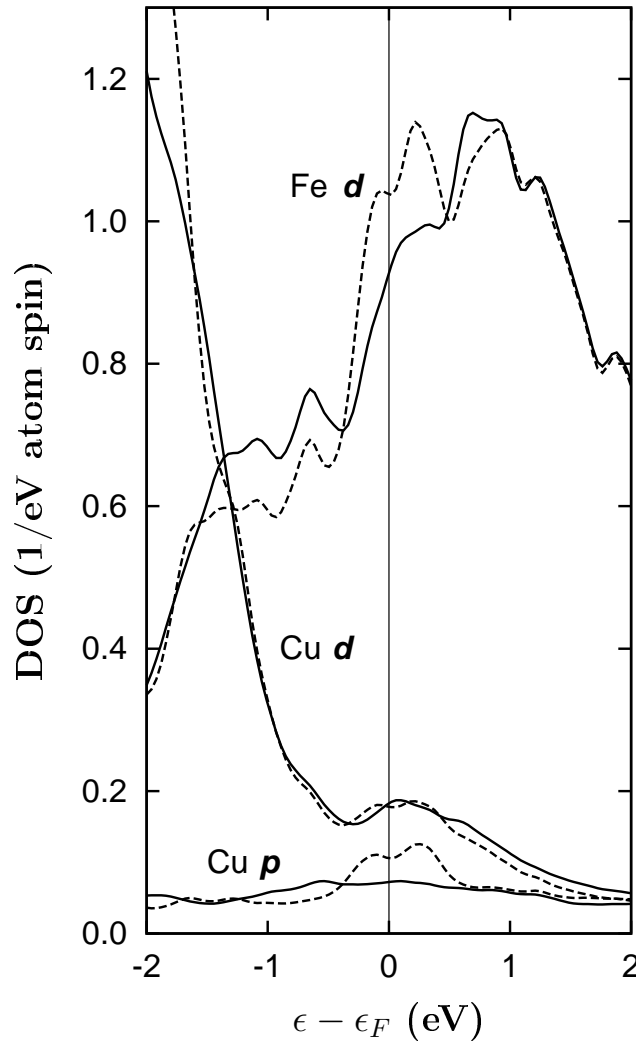


4.2. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása Cu(001)/Fe_n vékonyrétegekben. Üres négyszögek: minority sáv járuléka, teli körök: majority sáv járuléka. A vas atomi réteget a felülettől a réz szubsztrátig növekvő sorrendben számoztuk.



4.3. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása Cu(001)/Fe_n/Cu₁ vékonyrétegekben. Üres négyszögek: minority sáv járuléka, teli körök: majority sáv járuléka. A vas atomi rétegeket a Cu fedőrétegtől (Cu) a szubsztrátig növekvő sorrendben számoztuk.

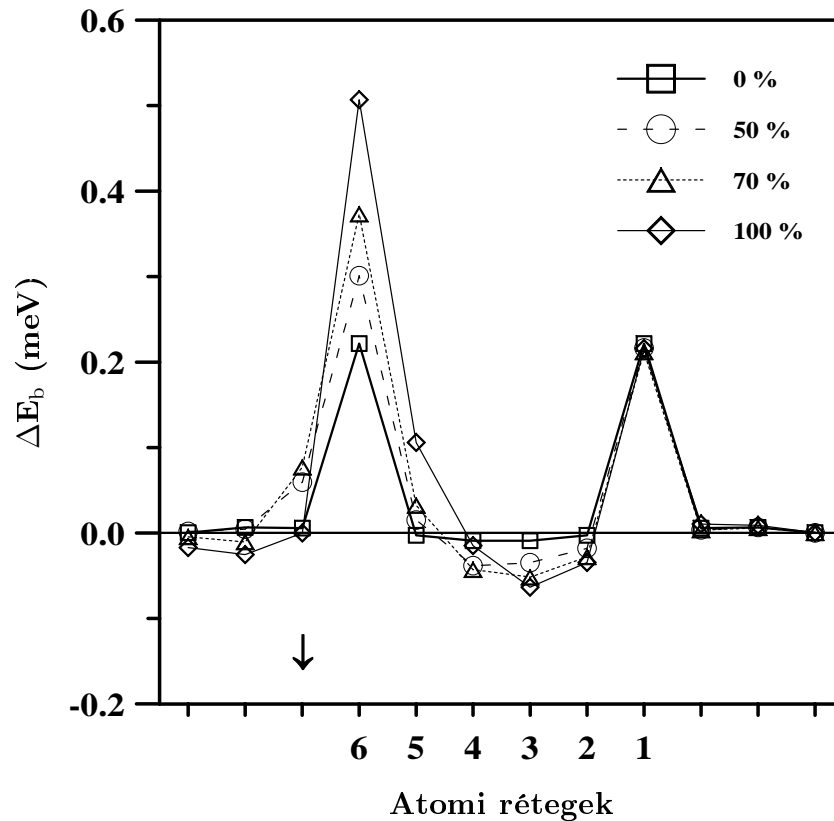
felület közelében. További analízis kimutatta, hogy a hibridizált Fe állapotok túlnyomórészt d_{xz-yz} pályakarakterűek, ami a merőleges anizotrópiát erősíti (l. 3.2 alfejezet).



4.4. ábra. Parciális minority-spin állapotsűrűségek a Cu(001)/Fe₆/Cu₁ vékonyrétegben. Folytonos vonalak: Cu és Fe határrétegek, szaggatott vonalak: Cu fedőréteg és szomszédos Fe réteg.

A 4.3 ábrából az is kitűnik, hogy $n > 5$ rétegvastagságnál a fedett filmek ($m \geq 1$) közepén elhelyezkedő Fe atomi rétegek elhanyagolható mértékben adnak anizotrópia járulékot, ugrásszerűen csökkentve a film teljes mágneses anizotrópia energiáját (l. 4.1), és vastagabb filmekre a sávenergia anizotrópia lényegében csak a két határrétegből származik. Szabad felületű vastagabb filmek esetén viszont a belső Fe atomi rétegek járuléka jóval lassabban csökken a vékonyréteg vastagságával, így a MAE nagyobb lehet mint a fedett vékonyrétegekben. Általánosan megállapíthatjuk tehát, hogy

a mágneses/nem-mágneses határfelületek kialakítása elsősorban igen vékony, néhány atomi réteg vastagságú mágneses filmek esetén növelheti a mágneses anizotrópiát.



4.5. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása a Cu(001)/Fe₆/Cu vékonyrétegben. Csak a vas atomi rétegeket számoztuk. A baloldali réz szubsztrát legfelső, nyíllal jelölt rétegét különböző koncentrációban arannyal ötvöztük.

4.1.2. A szubsztrát spin-pálya kölcsönhatásának szerepe

Az a tény, hogy az igen hasonló elektronszerkezetű Cu és Au szubsztráton növesztett vas filmek mágneses anizotrópia energiájában jelentős különbség tapasztalható (v.ö. a 3.1 ábrát és a 3.7 ábra $m=0$ értékhez tartozó görbéit), arra utal, hogy a határréteg hibridizáció mellett a szubsztrát spin-pálya kölcsönhatása is erősen befolyásolja a MAE-t. Annak érdekében, hogy ezt a hatást közvetlenül kimutassuk, egy 6 atomi réteg vastag szimmetrikus vas film, Cu(001)/Fe₆/Cu_∞, baloldali szubsztrátjának határrétegében a réz arannyal ötvöztük úgy, hogy ezen réteg atomi térfogatát nem változtattuk. A Cu_{1-c}Au_c kompozíciójú rétegben a 2.4 alfejezetben leírt CPA eljárást al-

kalmaztuk azzal a modelfeltevással, hogy az így nyert effektív médium a c koncentráció növekedésével egyre erősebb spin-pálya kölcsönhatással rendelkezik, viszont a vas film elektronszerkezete alapvetően nem változik.

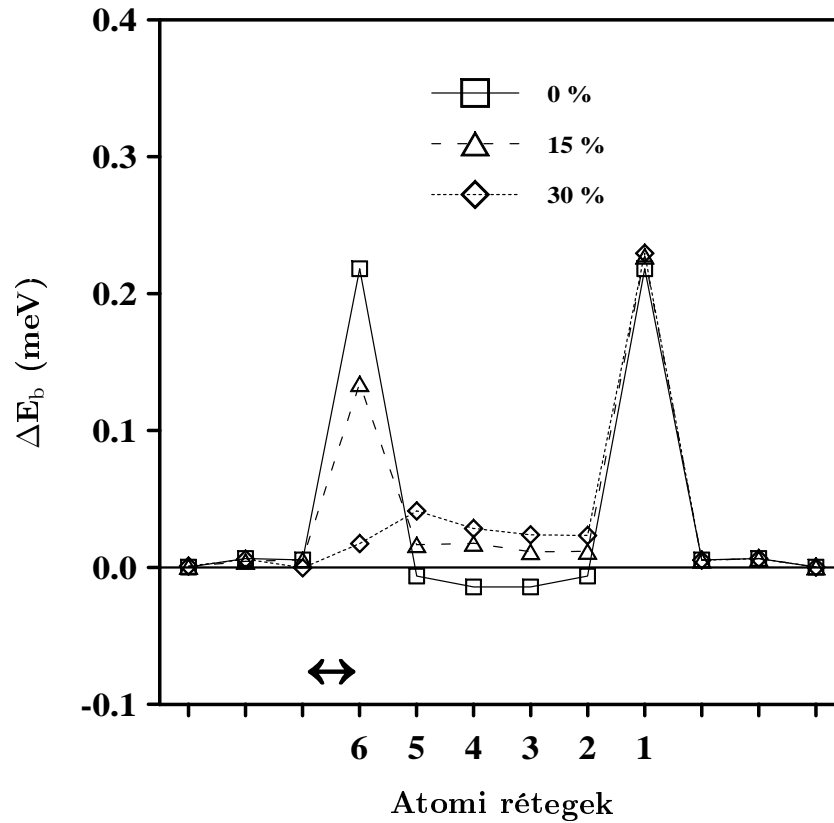
A 4.5 ábra fényesen igazolja előzetes elvárásainkat. Az ötvözött szubsztrátréteg melletti Fe atomi réteg anizotrópia járuléka markánsan emelkedik az Au mennyiségének növelésével. Fontos megfigyelés, hogy ez a növekedés jó közelítéssel négyzetesen arányos az Au koncentrációjával. A másodrendű perturbáció számítás alapján ez azt jelenti, hogy ezen Fe atomi rétegen a spin-pálya kölcsönhatás az Au koncentrációjával egyenes arányban nő. Az Fe mágneses anizotrópia járulékán keresztül tehát indirekt módon látható, hogy *az Au atomok spin-pálya kölcsönhatása az $sp-d$ hibridizáció következtében az Fe atomokra indukálódik.* Ez az indukált hatás kb. 4 atomi réteg távolságban a vas film belsejében is megfigyelhető, de a jobboldali határrétegig már nem ér el.

4.1.3. A határréteg keveredés hatása

Jóllehet alacsony hőmérsékleten a Fe és Cu keveredése a határréteg mentén elkerülhető (Detzel, Memmel 1994), elméleti szempontból ill. más vékonyréteg rendszerekre vonatkoztatható tanulságai miatt érdemes megvizsgálni az interdiffúzió hatását a MAE-ra. Mint arra már a 3.2 alfejezetben utaltam, a mágneses anizotrópia egyik alapvető mikroszkópikus magyarázata a nem-relativisztikusan elfajult sávok felhasadása a spin-pálya kölcsönhatás következtében, melyet a rendszerben fellépő statisztikus rendezetlenségek nyilvánvalóan csökkentenek. Ezért az interdiffúzió általános hatásaként a MAE csökkenése várható.

Vizsgálatunkat ugyancsak a Cu(001)/Fe₆/Cu_∞ szendvics rendszeren végeztük az előzőekhez hasonló stratégiát alkalmazva: a baloldali Cu határrétegbe egy bizonyos koncentrációval Fe atomokat, míg ugyanezen koncentrációval a mellette levő Fe atomi rétegbe Cu atomokat kevertünk. Így tehát a Cu ill. Fe mennyisége a rendszerben nem változott, azok bizonyos mennyisége csupán helyet cserélt a két (baloldali) határrétegben. Formálisan ez azt jelenti, hogy ezen rétegek összetétele rendre (Cu_{1-c}Fe_c) ill. (Cu_cFe_{1-c}), ahol c az interdiffúzió mértékét leíró koncentráció. Számításainkhoz, random keveredést feltételezve, most is a CPA eljárást használtuk.

A 4.6 ábra jól mutatja, hogy *a nem-mágneses szubsztrát és az Fe vékonyréteg interdiffúziója valóban drasztikusan csökkenti az Fe határréteg sávenergia anizotrópia járulékát.* A csökkenés ugrásszerű a keveredés mértékének (c)



4.6. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása a Cu(001)/Fe₆/Cu vékonyrétegben. Csak a vas atomi rétegeket számoztuk. A baloldali, kettős nyíllal jelölt Cu és Fe határrétegek 0, 15 és 30 %-ban keverednek.

növekedésével, tehát nem magyarázható csupán az Fe komponens mennyiségének csökkenésével ebben az atomi rétegben (l. a (2.38) egyenletet). Az, hogy a rendezetlenségnek egyértelműen destruktív szerepe van, onnan is nyilvánvaló, hogy a szubsztrát határréteg, mely c koncentrációban Fe komponenset tartalmaz, továbbra sem ad járulékot a MAE-hoz. Érdekes megjegyezni, hogy a film belsejében lévő Fe rétegek járuléka némileg növekszik a keveredés következtében. Ennek lehetséges okai a belső Fe atomi rétegek és a térben közelebb kerülő Cu atomok közötti hibridizáció ill. a Cu atomok által indukált spin-pálya kölcsönhatás (l. 4.1.1 és 4.1.2 szakaszokat).

4.2. Az antiferromágneses fázis

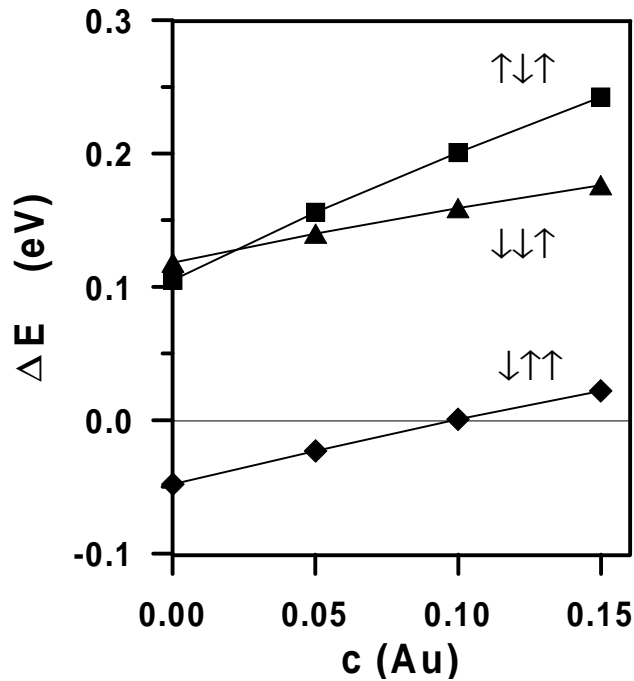
Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **55**, 14392–14396 (1997)

Az fcc tömb állapotú γ -Fe-ra történt számítások nyomában, melyek antiferromágneses rendeződést jósoltak, több elméleti munka született abból a célból,

hogy Cu szubsztráton epitaxiálisan növesztett Fe vékonyrétegek alapállapotát meghatározzák (Fu, Freemann 1987; Kraft és mtsi. 1994; Lorenz, Hafner 1996). Ezen számítások mindegyike arra az eredményre vezetett, hogy kb. 3 atomi réteg vastagság fölött a Fe film réteges antiferromágneses szerkezetű. A ferromágneses állapothoz képest nagymértékű elektronszerkezeti változás valószínűvé tette, hogy a Fe film mágneses anizotrópiája is jelentősen megváltozik.

Korábbi számításainkat kiterjesztettük oly módon, hogy megtartva az atomi rétegeken belüli ferromágneses csatolást, a rétegek közötti antiparallel csatolás lehetőségét is figyelembe vettük. Mivel a mágneses csatolást alapvetően a kicserélődési kölcsönhatás határozza meg és nem várható, hogy azt a spin-pálya csatolás befolyásolja, az alapállapot mágneses konfigurációkat a SOC eliminálásával nyert ún. skalár-relativisztikus módszerrel határoztuk meg, mely lényegesebben gyorsabb számítást tesz lehetővé. Ebben a közelítésben a mágneszettség abszolút iránya energetikailag irreleváns, és a rendszer energiáját csak a rétegenkénti mágneses momentumok relatív iránya szabja meg. A rendszer szimmetriáját is figyelembe véve a skalár-relativisztikus közelítésben csak olyan állapotok képzelhetők el, melyekben a mágneses momentumok 0 ill. 180°-os szöget zárnak be. A spin-pálya csatolás bekapcsolásával ugyan lehetséges nem-kollineáris rendeződés (Udvardi és mtsi. 1998), de ennek valószínűsége meglehetősen korlátozott. Így a rendszer mágneses konfigurációját jellemezhetjük \uparrow és \downarrow nyílak sorozatával, melyek a rétegenkénti mágneses momentumok relatív irányítottságára utalnak. Triviális, hogy egy szabad határfeltételekkel rendelkező n rétegű rendszernek összesen 2^{n-1} számú nem-ekvivalens mágneses konfigurációja van. Ezen lehetséges konfigurációkra önkonzisztens számításokat végeztünk és a legmélyebb teljes energiájú konfigurációt azonosítottuk az alapállapottal.

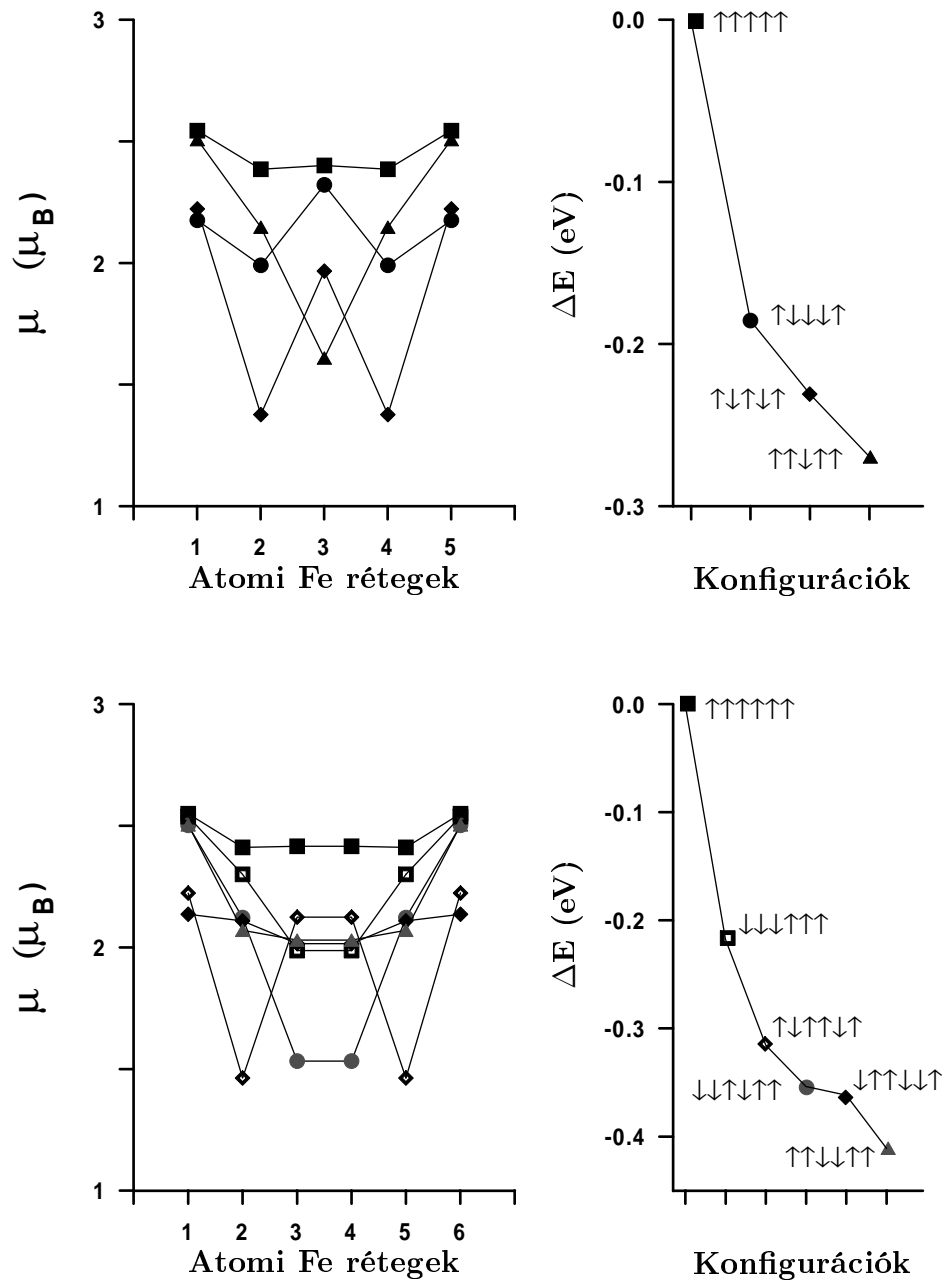
A Cu(001)/Fe $_n$ és a Cu(001)/Fe $_n$ /Cu $_\infty$ ($n \leq 7$) rendszereket vizsgáltuk. A korábbi elméleti munkákhoz hasonlóan $n \geq 3$ esetben valamely antiferromágneses konfigurációt kaptunk alapállapotnak. A Cu(001)/Fe $_3$ rendszerre külön megvizsgáltuk az atomi térfogat változtatásának hatását az alapállapotra. E célból olyan model számítást végeztünk, ahol szubsztrátként a Cu $_{1-c}$ Au $_c$ ötvözetet alkalmaztuk, melynek egyensúlyi rácsállandója a $0 \leq c \leq 0.15$ tartományban jól követi a Vegard-szabályt (Weinberger és mtsi. 1994), azaz lineárisan nő az Au koncentrációjával. A három különböző antiferromágneses konfiguráció teljes energiáját a ferromágneses állapothoz viszonyítva a 4.7 ábra ábrázolja az Au koncentrációja függvényében. Látható, hogy a



4.7. ábra. Teljes energia különbségek a $\text{Cu}_{1-c}\text{Au}_c(001)/\text{Fe}_3$ rendszer lehetséges antiferromágneses állapotai és a ferromágneses állapot között a c koncentráció függvényében.

$\uparrow\downarrow\uparrow$ és a $\uparrow\uparrow\downarrow$ konfigurációk energiája mindig nagyobb, mint a $\uparrow\downarrow\downarrow$ és a $\uparrow\uparrow\uparrow$ (ferromágneses) konfigurációk energiája valamint, hogy $c < 0.1$ esetén – így tiszta Cu szubsztrátra is – a $\uparrow\downarrow\downarrow$ antiferromágneses konfiguráció az alapállapot. Mivel ez a fordulópont mindössze 3.6 %-os növekedést jelent a Cu rácsállandójához képest, nyilvánvaló, hogy ilyen mértékű felületi rácsrelaxáció stabilizálni tudja a ferromágneses állapotot. Ezzel egybehangzóan, vékony Fe filmekre ($n \leq 4$) kísérletileg is ferromágneses állapotot találtak az atomi rétegek közötti távolságok mintegy 5 %-os növekedése mellett (Müller és mtsi. 1995; Zharnikov és mtsi. 1996).

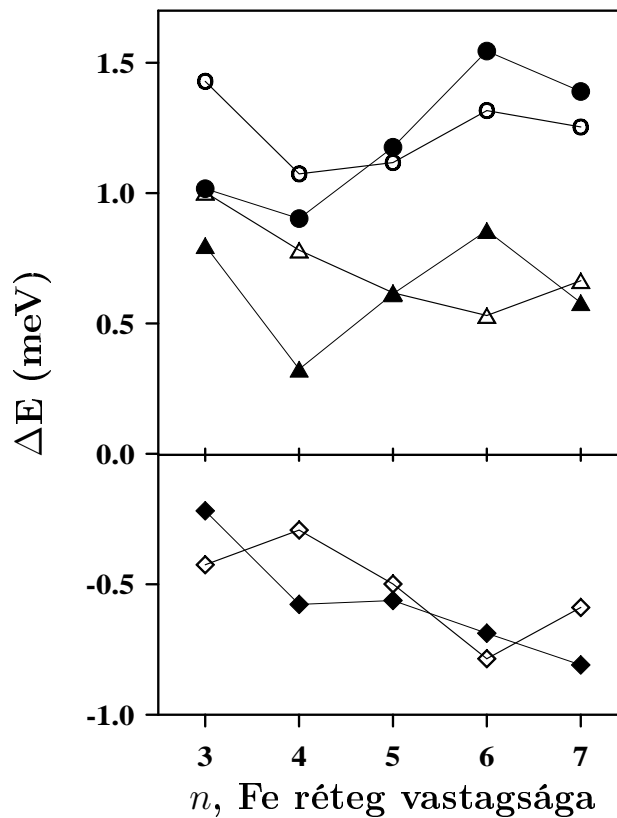
A 4.7 ábra másik tanulsága, ami az összes vizsgált vékonyrétegre igaznak bizonyult, hogy a felület melletti két Fe atomi réteg ferromágnesesen csatolódik. Ez korábban mind kísérletileg (Li és mtsi. 1994), mindpedig elméletileg (Fu, Freemann 1987; Kraft és mtsi. 1994; Lorenz, Hafner 1996) kimutatott tény volt. A jelenség következik abból az általános tényből, hogy a koordinációs szám csökkenése miatt a felületi rétegen a Fermi szinten vett állapotsűrűség általában megnő, ami a Stoner-model értelmében erősíti a ferromágnességre való hajlamot ill. a felületi rétegen a mágneses momentum növekedéséhez vezet. Jóllehet a réz szubsztráttal való hibridizáció csökkenti ezt a tendenciát, az $n=3$ esetet kivéve a szendvics rétegekre is igaznak talál-



4.8. ábra. Baloldalt: rétegenkénti mágneses momentumok a $\text{Cu}(001)/\text{Fe}_5/\text{Cu}$ (fent) és $\text{Cu}(001)/\text{Fe}_6/\text{Cu}$ (lent) különböző mágneses konfigurációira. Jobboldalt: A baloldali ábráknak megfelelő konfigurációk teljes energiája a ferromágneses állapothoz viszonyítva.

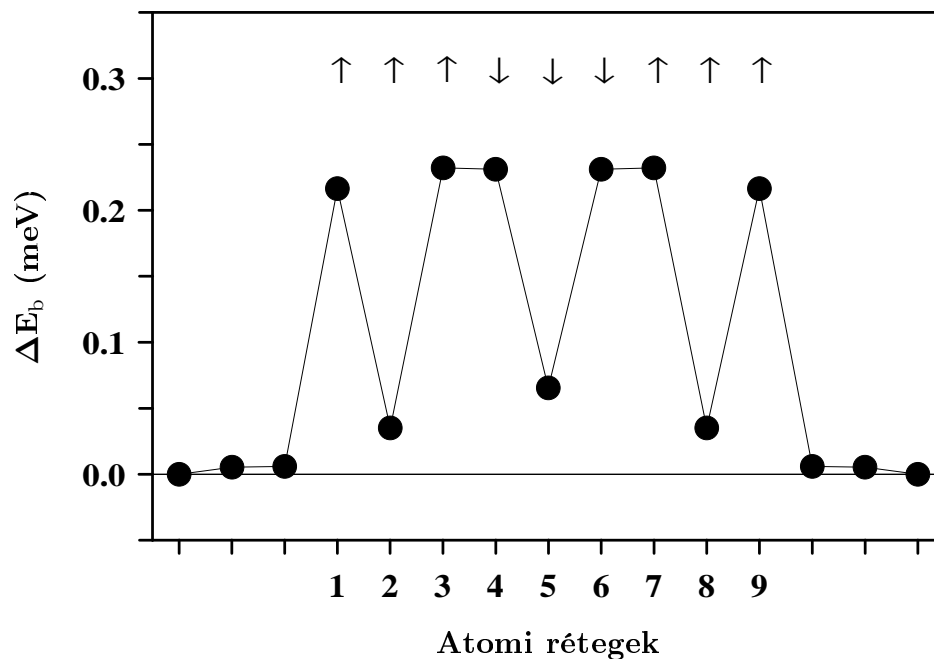
tuk a fenti tulajdonságot.

A 4.8 ábra illusztrációként mutatja az öt és hat atomi réteges szendvics rendszerben a mágneses momentumok eloszlását és a különböző konfigurációk energetikai viszonyait. A hat atomi réteges rendszerrel két energetikailag magasan fekvő konfigurációt nem ábrázoltam. Megállapítható, hogy minden konfigurációban a felületi ill. a ferromágneses környezetben elhelyezkedő ($\uparrow \boxed{\uparrow} \uparrow$) rétegek rendelkeznek a legnagyobb mágneses momentummal (~ 2.3 - $2.5 \mu_B$), míg az antiferromágneses környezetben elhelyezkedő $\downarrow \boxed{\uparrow} \downarrow$ rétegek mágneses momentuma jóval kisebb (~ 1.5 - $1.6 \mu_B$). Szisztematikus módon a $\uparrow \boxed{\uparrow} \downarrow$ környezetű rétegek mágneses momentuma a két tartomány között található (~ 2.0 - $2.2 \mu_B$). Ez arra utal, hogy egy adott atomi réteg mágneses momentumának nagyságát főként a réteg lokális környezete határozza meg. Figyelemre méltó, hogy az antiferromágneses állapotok között lévő energia-különbség több esetben csak néhány század eV, ami a réteg növesztésének körülményeitől függően metastabil állapotok kialakulásához vezethet.



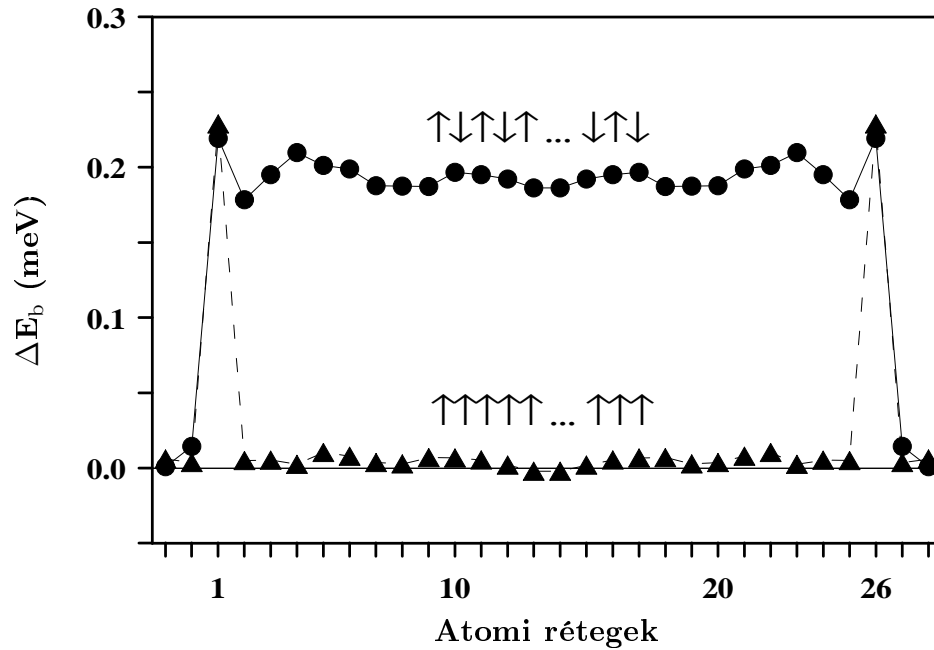
4.9. ábra. Mágneses anizotrópia energiák a Cu(001)/Fe_n (üres szimbólumok) és a Cu(001)/Fe_n/Cu (teli szimbólumok) vékonyrétegekben. Körök: ΔE_b, négyszögek: ΔE_{dd}, háromszögek: MAE, ΔE = ΔE_b + ΔE_{dd}.

Az alapállapotú konfigurációkra számolt mágneses anizotrópia energiákat a 4.9 ábra mutatja. Összehasonlítva a 4.1 ábrával feltűnő, hogy a sávenergia anizotrópia járulék az antiferromágneses konfigurációkban jóval nagyobb mint a ferromágnesesben. Ezenkívül nem tapasztalható lényeges változás a szabad felülettel rendelkező és a szendvics szerkezetű rendszerek között. A mágneses momentumok csökkenése miatt főként vastagabb rétegekre a mágneses dipól–dipól járulék kisebb mint a ferromágneses esetben. Következésképpen az antiferromágneses alapállapotú filmekre $n = 7$ atomi réteg vastagságig nem tapasztaltunk reorientációs átmenetet a filmre merőleges irányból a filmmel párhuzamos irányba. Ez összhangban van Detzel és mtsi. (1994) kísérleti eredményeivel, akik legalább 10 atomi réteg vastagságig merőleges mágnesezettséget tapasztaltak és az e fölött bekövetkező reorientációs átmenetet a vas film fcc-bcc típusú struktúrális fázisátalakulásának tulajdonították.



4.10. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása a $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ mágneses konfigurációjú Cu(001)/Fe₉/Cu vékonyrétegben. A vas atomi rétegeket 1 ... 9 számokkal jelöltük.

A sávenergia anizotrópia járulék rétegenkénti analízise azt mutatta, hogy az antiferromágneses állapotban elsősorban a film belsejében elhelyezkedő atomi rétegek járuléka nő meg szignifikánsan a ferromágneses állapothoz képest. Egy tanulságos példaként a 4.10 ábrán bemutatom a $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ konfigurációjú kilenc atomi réteges szendvics Fe film sávenergia anizotrópiájának



4.11. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása a Cu(001)/Fe₂₆/Cu rendszerben alternáló antiferromágneses (körök) és ferromágneses (háromszögek) konfiguráció esetén.

atomi rétegfelbontását. Jól látszik, hogy azok film belsejében lévő rétegek, melyek valamely szomszédos réteghez antiparallel csatolódnak, a határrétegekéhez hasonló nagyságú sávenergia anizotrópia járulékkal rendelkeznek, míg a ferromágneses környezetű rétegek kontribúciója a MAE-hez ennél jóval kisebb. Levonhatjuk azt a konzekvenciát, hogy *a belső atomi rétegek anizotrópia járuléka a szomszédos rétegekkel való mágneses csatolás függvénye.*

A fenti állítást megfogalmazhatjuk az atomi rétegek *lokális szimmetriájára* alapozva is. A lokális szó alatt most azt értjük, hogy egy atom legközelebbi szomszédait vesszük csak figyelembe, ugyanis a viszonylag lokalizált 3d elektronállapotokat túlnyomórészt ez a szűk környezet határozza meg. Ha egy belső réteg ferromágnesesen csatolódik a szomszédos rétegekhez, akkor ezen réteg atomjai jó közelítéssel köbös lokális szimmetriát tapasztalnak, míg az antiferromágneses környezet uniaxiális lokális szimmetriát indukál. A MAE és szimmetria kapcsolata alapján (l. az 1. Fejezetben) jól értelmezhető a 4.10 grafikon. Hogy érvelésemet teljessé tegyem, a 4.11 ábrán egy 26 atomi réteg vastagságú szendvics film sávenergia anizotrópia járulékait ábrázoltam alternáló antiferromágneses ill. ferromágneses konfigurációkra. Nyilvánvaló, hogy az ilyen vastag film belsejében lévő rétegek már jó közelítéssel tömbszerűnek tekinthetők, és a modelszámítás eredménye jól extrapolálható a valódi

tömb állapotra. Egyedül a hosszú ható távolságú, kis amplitúdójú Friedel-oszcillációk (l. később) jelzik a határfelületek jelenlétét. Az ábra szemléletesen mutatja, hogy a réteges antiferromágneses filmben az összes (többszerű) atomi réteg közel azonos mértékben járul hozzá a MAE-hoz ($\sim 0.2 \text{ meV}$), míg a ferromágneses esetben ezen rétegek járuléka lényegében zérus.

4.3. $\text{Cu}(001)/(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})$

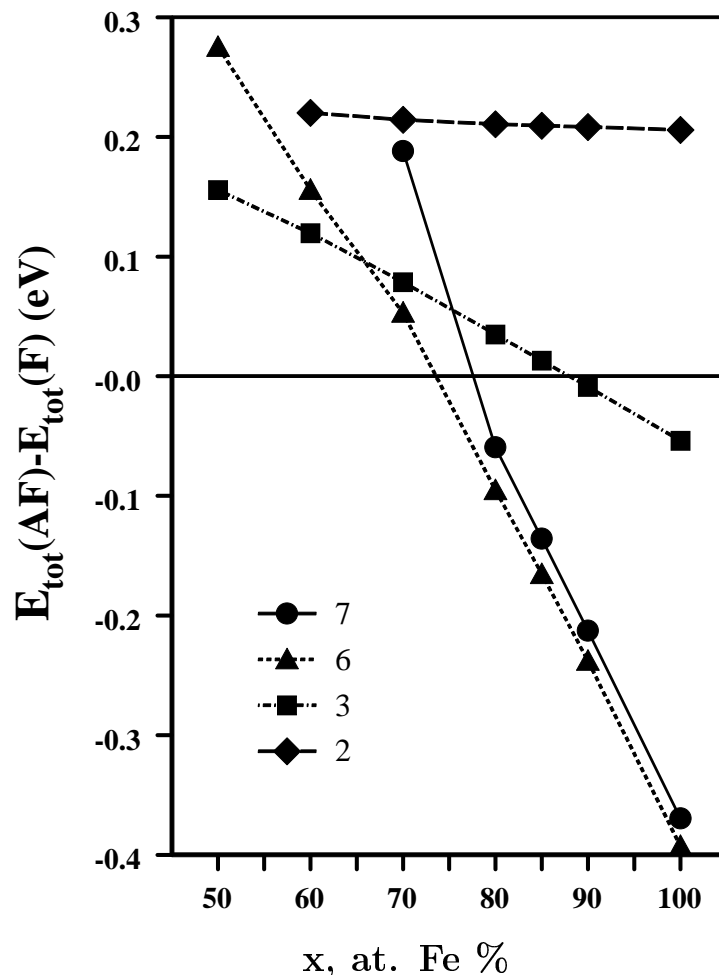
Zablouidil J., Szunyogh L., Pustogowa U., Uiberacker C., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **58**, 6316–6320 (1998)

Zablouidil J., Uiberacker C., Pustogowa U., Weinberger P., Szunyogh L., *Phil. Mag. B* **78**, 597-602 (1998)

A tiszta vas filmeknél Dittschar és mtsi. (Dittschar és mtsi. 1998) vas-kobalt ötvözet vékonyrétegeit is vizsgálták, elsősorban annak a kérdésnek az eldöntése céljából, hogy a kétkomponensű ötvözet koncentrációjának változtatása mennyiben befolyásolja a MAE-t ill. a spin-reorientáció kritikus vastagságát. Vizsgálataikat 2-4 atomi réteg vastagságú filmekre végezték, ahol az fct szerkezetű, ferromágneses tiszta vas filmek a film síkjára merőleges mágneses orientációt mutatnak. A kobalttal való ötvözés során strukturális változást nem észleltek és a mért átlagos mágneses momentum a vas koncentrációjának csökkenésével a vas és a kobalt mágneses momentuma között lineárisan csökkent ($m_{\text{Fe}} \simeq 2.5 \mu_B$, $m_{\text{Co}} \simeq 1.6 \mu_B$). A reorientációs átmenetet vizsgálva azt tapasztalták, hogy a 2-4 atomi réteg vastagságú filmek 80 és 90 % Fe koncentráció között $\perp \rightarrow \parallel$ spin-átfordulást szenvednek. A kritikus Fe koncentráció a rétegvastagság növelésével lényegében lineárisan nőtt: 2 atomi rétegnél ~ 80 at. Fe %, 3.5 atomi rétegnél ~ 90 at. Fe %. Dittschar és mtsi. ezt a trendet az ötvözés során bekövetkező elektronszerkezeti változásokkal, elsősorban az Fe d -sáv betöltöttségének változásával, magyarázták.

Tekintettel arra, hogy ilyen vastagságú tiszta vas filmekre a ferromágneses fázisban a merőleges mágnesezettséget nem sikerült elméletileg reprodukálnunk (l. 4.1. alfejezet), a fenti kísérlet magyarázatát az ab-initio számítások szintjén csak részlegesen, a koncentráció változásával bekövetkező trendeken keresztül kísérlelhetjük megadni. Vizsgálatainkat kiterjesztettük az antiferromágneses fázisra, melyek 3 atomi réteg vastagság fölött alapállapotnak adódtak. Ezáltal valójában a vastagabb (5-10 atomi réteg) vas-kobalt ötvözet rétegek spin-reorientációs mechanizmusára adtunk elméleti predikciót. Számításainkat 2-7 atomi vastagságú filmekre végeztük a vas koncentrációját

50 és 100 % között változtatva. A mágneses film minden atomi rétegét homogén $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ kompozíciójúnak feltételeztük és a rendezetlenséget a 2.4. alfejezetben leírt CPA módszerrel vettük figyelembe.



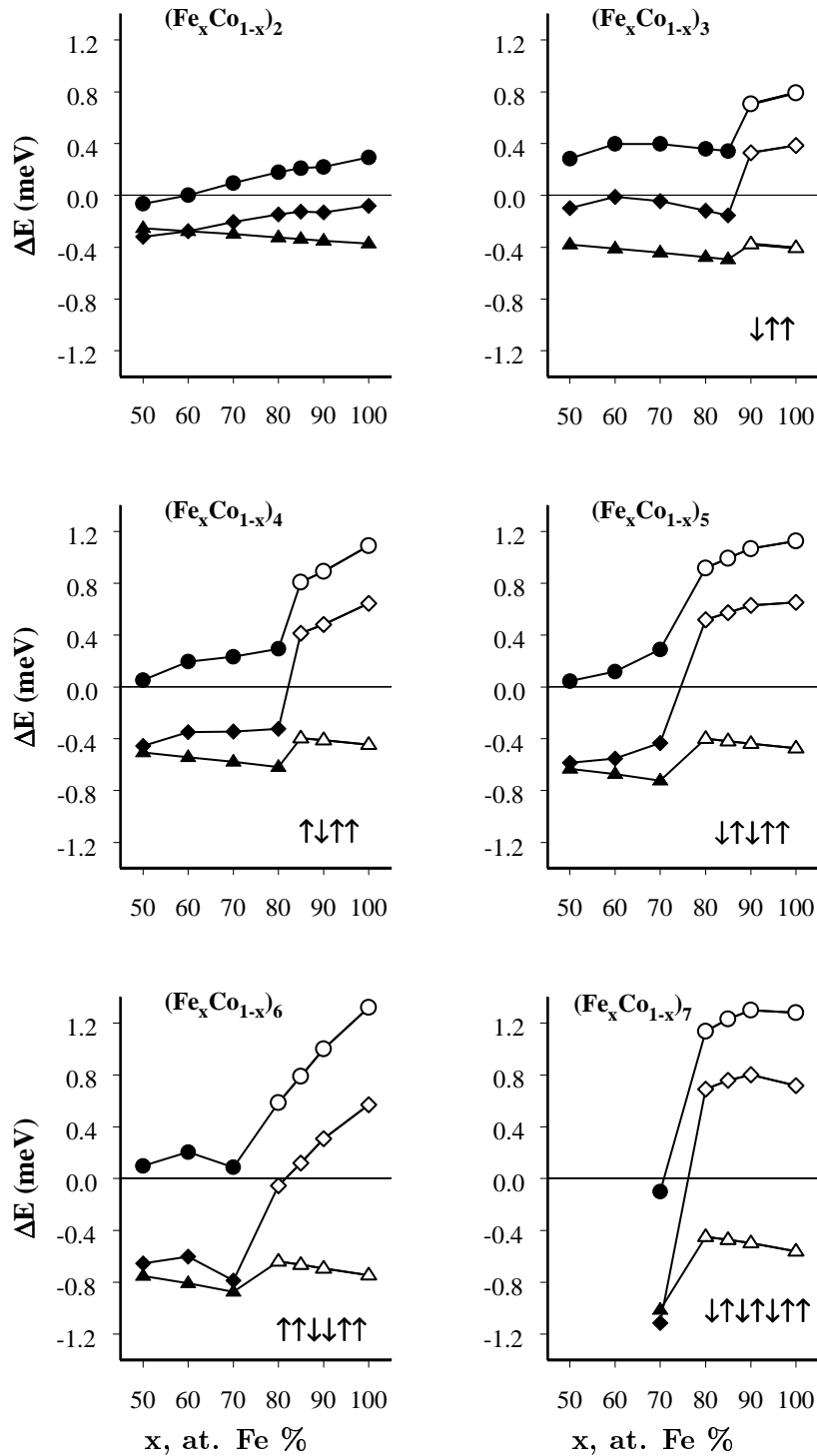
4.12. ábra. Az antiferromágneses (AF) és ferromágneses (F) állapotok közötti teljes energia különbség $\text{Cu}(001)/(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})_n$ vékonyrétegekben az $n=2, 3, 6$ és 7 esetekre az Fe koncentráció függvényében.

Az alapállapot energiákra vonatkozó eredményeinket a 4.12 ábra közli. Meg kell azonban jegyezni, hogy csak két konfiguráció teljes energiáját hasonlítottuk össze: a ferromágneses állapotét és azon antiferromágneses konfigurációjét, mely a tiszta vas film esetén az adott rétegvastagságnál alapállapotnak adódott (kivéve az $n=2$ esetet). Újabb számítások azt mutatják (Uiberacker 1999), hogy vastagabb rétegekre (pl. $n = 5$), ahol a tiszta Fe filmben több, az alapállapothoz közeli energiájú állapotok léteznek (l. a 4.8 ábrán), a vas koncentráció csökkenésével az antiferromágneses konfiguráció változhat az alapállapotban. A 4.12 ábrából világos, hogy a két atomi ré-

teg vastagságú minta a koncentrációtól függetlenül mindig ferromágneses, a vastagabb minták pedig a valamely vas koncentráció alatt ferromágnesessé válnak. Ez a kritikus koncentráció 75 és 90 % közé esik és a rétegvastagsággal tipikusan csökken. A mágneses momentumok és a kicserélődési kölcsönhatások (Szunyogh, Udvardi 1998) vizsgálatából a következő magyarázat adható a 4.12 ábrán megfigyelt tendenciára: a Co-Co és az Fe-Co kicserélődési kölcsönhatások ferromágnesesek, és különösen a Co-Co kölcsönhatás abszolút értékben jóval nagyobb, mint a Fe-Fe kölcsönhatás, melyet az antiferromágneses jelleg dominál. Így relatív kevés kobalt mennyiség elegendő ahhoz, hogy a filmben ferromágneses rendeződést indukáljon.

A rétegvastagság és koncentráció függvényében kapott alapállapotokra ezek után MAE számítást végeztünk. Az eredmények a 4.13 ábrán láthatók. $n=2$ esetben a MAE, valamint a sávenergia és mágneses dipól-dipól járulék folytonosan változik a koncentráció függvényében, ami nem meglepő, hiszen a film végig ferromágneses fázisban van. Mint azt a 3.3. alfejezetben említettem, a Co monoréteg réz szubsztráton síkbeli mágneszettségű, tehát $\Delta E_b^{Co} < 0$. Ezért tehát várható, hogy növekvő kobalt tartalom csökkenti ΔE_b -t. Az átlagos mágneses momentum csökkenése miatt ΔE_{dd} ugyan abszolút értékben valamelyest csökken, de a MAE így is határozottan csökken az Fe koncentráció csökkenésével. A MAE ezen folytonos változása arra utalt és ΔE_b komponensek szerinti felbontása is ténylegesen igazolta, hogy a Fe és Co komponensek ΔE_b járulécai nem változnak lényegesen a koncentráció függvényében. *A Fe_xCo_{1-x} vékonyrétegek elektronszerkezete a ferromágneses fázisban következésképpen jól leírható az ún. merev sáv (rigid band) közelítéssel.* Ugyan az $n=2$ esetben a MAE a teljes koncentráció tartományban negatív, tehát spin-reorientációról nem beszélhetünk, ez a kép felel meg a $2 \leq n \leq 4$ rétegvastagságokra végzett kísérletek (Dittschar és mtsi. 1998) elméleti interpretációjának. Amennyiben a film (> 4 %) tetragonális megnyúlását is figyelembe vesszük, úgy két atomi réteg tiszta vasra merőleges mágneszettséget, 10 % kobalt koncentrációnál pedig reorientációs átmenetet kapunk (Uiberacker 1999).

Vastagabb rétegekre ($n \geq 3$) kvalitatívan más kép olvasható le a 4.13 ábráról. Ezeken a grafikonokon a MAE és mindkét összetevőjének görbéjét éles szakadás jellemzi az antiferromágnes-ferromágnes átmenetnél. A mágneses dipól-dipól energia járulék abszolút értékben megnő, mivel a ferromágneses fázisban a vas (átlagos) mágneses momentum ($\sim 2.5 \mu_B$) lényegesen nagyobb mint az antiferromágneses fázisban ($\sim 1.5-2 \mu_B$). A Fe koncentráció

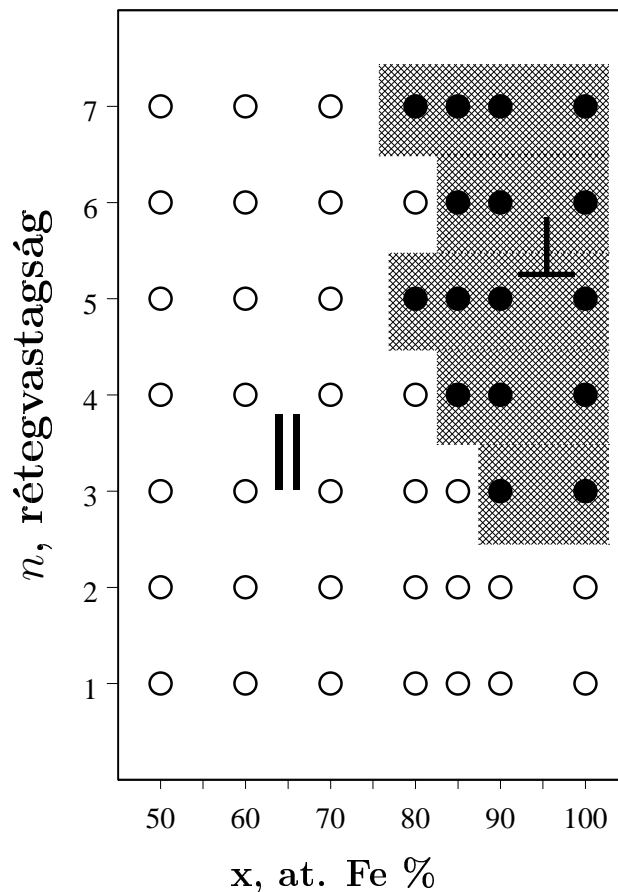


4.13. ábra. Mágneses anizotrópia energiák a $\text{Cu}(001)/(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})_n$ vékonyrétegekben. Körök: ΔE_b sávenergia járulék, háromszögek: ΔE_{dd} mágneses dipól-dipól energia járulék, négyszögek: MAE, $\Delta E = \Delta E_b + \Delta E_{dd}$. Teli szimbólumok: ferromágneses alapállapot, üres szimbólumok: a nyílakkal ábrázolt antiferromágneses alapállapot.

további csökkenésével ΔE_{dd} nagysága természetesen lassan csökken úgy mint az $n = 2$ esetben. A sávenergia anizotrópia ugrásszerűen csökken a fázisátalakulásnál. Ennek magyarázata a Fe komponens járulékának változására vezethető vissza: az antiferromágneses állapotban ΔE_b szignifikánsan nagyobb mint a ferromágneses fázisban (l. 4.1 és 4.2 alfejezeteket). Az $n = 6$ rétegvastagságú mintától eltekintve ezeket a vékonyrétegeket tehát az jellemzi, hogy *az atomi rétegek közötti mágneses csatolás változása, melyet a növekvő kobalt tartalom idéz elő, indukálja a reorientációs átmenetet.* Érdekes, hogy az $n = 6$ esetben a kobalt tartalom növekedése az antiferromágneses fázisban a sávenergia anizotrópia olyan mértékű csökkenését okozza, hogy a reorientáció már az antiferromágnes-ferromágnes átalakulás előtt megtörténik. Ez annak a ténynek tulajdonítható, hogy ebben az esetben az alapállapotú antiferromágneses konfiguráció típusa eltér a többi rétegvastagságnál kapott – a két felületi réteg ferromágneses csatolásától eltekintve – alternáló réteges antiferromágneses csatolástól.

Eredményeinket a mágnesezettség könnyű irányának alapállapotú fázisdiagramján foglalhatjuk össze a rétegvastagság és Fe koncentráció függvényében (4.14 ábra). Dittschar és mtsi. (1998) kísérleti fázisdiagramjával ez a diagram annyiban rokon, hogy a síkra merőleges könnyű irány csak kb. 75 % Fe koncentráció fölött található. Nyilvánvaló különbség viszont, hogy míg a kísérletet jellemző ferromágneses fázisban növekvő rétegvastagsággal a MAE csökken, ezért egyre kisebb kobalt koncentráció elég a reorientációhoz, addig a számításokban ($n \geq 3$ és $n \neq 6$) az antiferromágneses-ferromágneses átalakulás kritikus Co koncentrációja szabja meg a könnyű irány váltását és ez a $3 \leq n \leq 5$ tartományban a rétegvastagsággal fokozatosan növekszik, majd lényegében 75 % Fe koncentrációnál szaturálódik.

Két tényezőt említhetünk még meg, amit a kísérleti és elméleti reorientációs fázisdiagrammok összehasonlításánál feltétlenül figyelembe kell vennünk. A méréseket átlagosan 200 K-on végezték, míg számításaink 0 K hőmérsékletre vonatkoznak. A hőmérséklet csökkentése a spin mozgásából származó entrópia csökkenése révén a felületre merőleges mágnesezettség tendenciáját növeli, így adott kompozíció (vas-kobalt arány) mellett 0 K felé közeledve a reorientáció kritikus vastagsága nő, azaz a kísérleti \perp - \parallel fázishatár felfelé toródása várható, ami növelné az egyezést az elméleti fázisvonallal. Másrészt pedig ezen számításainkban nem vettük figyelembe a 2-4 atomi réteg vastagságú filmekre jellemző kb. +4 %-os merőleges rácsrelaxációt. Uiberacker (1999) későbbi számításai tetragonálisan relaxált filmekre valóban némileg a



4.14. ábra. A síkbeli (||) és merőleges (\perp) mágnesezettség alapállapotú fázisdiagramja a $\text{Cu}(001)/(\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x})_n$ rendszerben az x Fe koncentráció és n rétegvastagság függvényében. Üres és teli körök jelölik azokat (x, n) pontokat, melyekre a számítások || ill. \perp mágnesezettségi irányt eredményeztek. A \perp tartományt satírozás indikálja.

fázishatár lefelelé tolődását és ezáltal a kísérlettel való jobb egyezést mutatták. Mindazonáltal az elmélet igazolása szempontjából érdekes lenne hasonló kísérletsorozatot végezni $n \geq 5$ vastagságú mintákra, ahol tiszta vas esetén az alapállapot antiferromágneses.

5. fejezet

A Cu(001)/Ni rendszer

Az eddig tanulmányozott vékonyréteg rendszerekben olyan típusú spin-reorientációval találkoztunk, mikor a film mágneses momentumainak iránya egy kritikus vastagságnál a felületre merőleges irányból a felület síkjába fordulnak. Ezt a jelenséget, mely tipikusnak mondható a legtöbb ultravékony mágneses filmre nézve, a (határ)felületi merőleges anizotrópia energia és a rétegvastagsággal lineárisan növekvő nagyságú, de ellentétes előjelű mágneses dipól-dipól energiajárulék kölcsönösen alakítják ki. A réz (001) (és (111)) felületén növesztett Ni filmeknél ettől eltérő viselkedést tapasztaltak. Cu(001)/Ni_n filmekben $n=6$ alatt síkbeli mágnesezettséget figyeltek meg, mely $n \simeq 6.7$ -nél a filmre merőleges irányba fordult (Huang és mtsi. 1994; O'Brien, Tonner 1994; Schulz, Baberschke 1994; O'Brien és mtsi. 1996; Farle és mtsi. 1997a, 1997b, 1999). Ezt nevezzük *inverz reorientációnak*. A mágnesezettség merőleges iránya melepő módon igen nagy, közel 40 atomi réteg vastagságig fennmaradt (O'Brien és mtsi. 1996, Farle és mtsi. 1997a), majd ismét a felülettel párhuzamos irányba fordult.

Mivel a Ni film K^s felületi mágneses anizotrópia energiája a kis vastagságnál talált síkbeli mágnesezettség miatt értelemszerűen negatív, fel kellett tételni, hogy a vastagabb Ni filmekben létezik egy, az n rétegvastagsággal lineárisan arányos térfogati anizotrópia, $K^v \cdot n$, mely pozitív, tehát a merőleges orientációt preferálja. Fenomenológikusan a mágneses dipól-dipól energiát egy $-2\pi M^2 \cdot n$ taggal vehetjük figyelembe, ahol M az átlagos mágneses momentum. Így a vékonyréteg anizotrópia energiája a

$$\Delta E(n) = K^s + K^v \cdot n - 2\pi M^2 \cdot n \quad (5.1)$$

képlettel adható meg. Amennyiben $K^v > 2\pi M^2$, $n < -K^s/(K^v - 2\pi M^2)$ esetben ΔE negatív (síkbeli irány), az $n > -K^s/(K^v - 2\pi M^2)$ esetben pedig ΔE pozitív (merőleges irány) és az inverz reorientáció magyarázható. Schulz

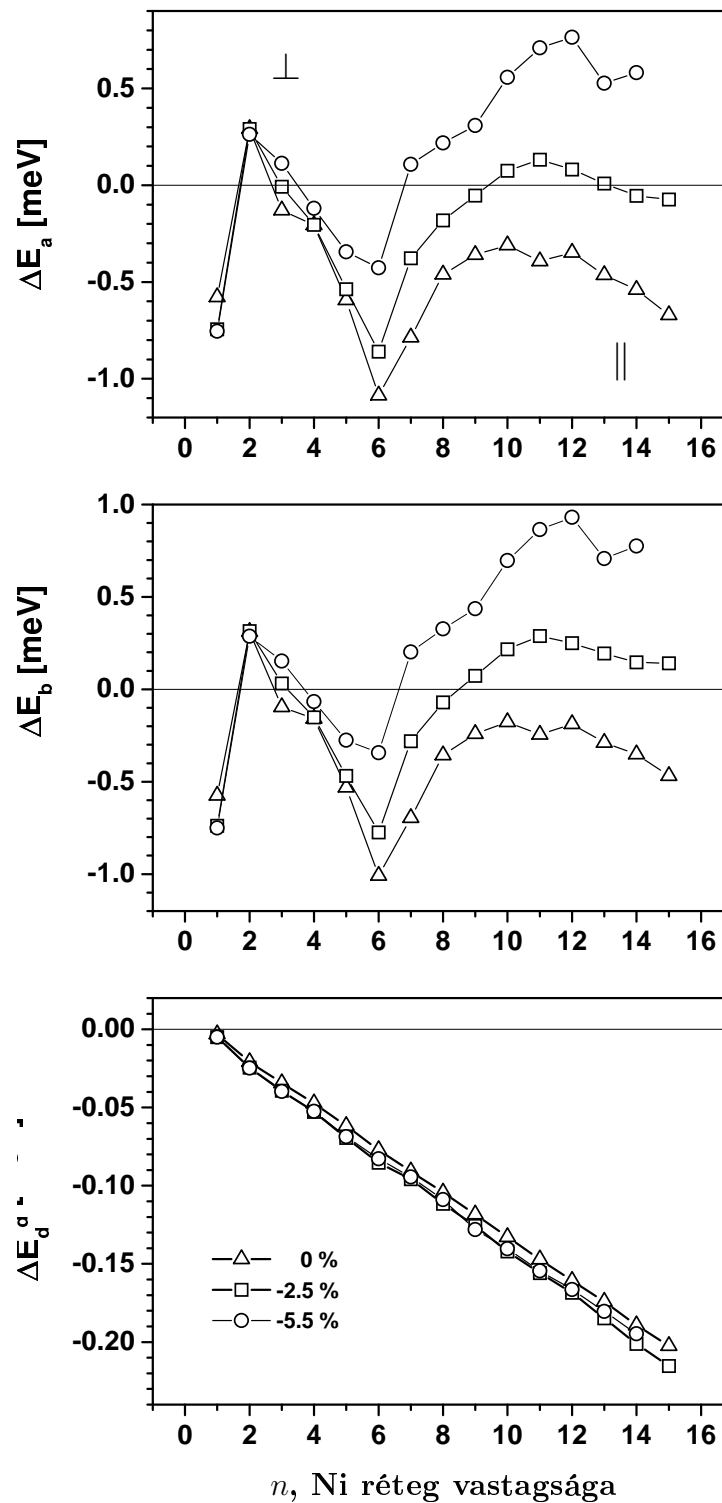
és Baberschke (1994) feltételezte először, hogy a réz szubsztráton növesztett Ni réteg tetragonális kontrakciója lehet a mikroszkópikus oka térfogati anizotrópiatag megjelenésének. LEED kísérletek valóban mintegy -5.5 %-os merőleges kontrakciót mutattak ki a Ni rétegben (Müller és mtsi. 1996, Platow és mtsi. 1999). Hjortstam és mtsi. (1997) ab initio számításokat végeztek tetragonálisan összenyomott bulk Ni-re és valóban azt találták, hogy az fct szerkezetű Ni-ben a könnyű tengely a kontrakció irányába (c tengely) mutat. Nyilvánvaló azonban, hogy a Ni vékonyrétegekben a MAE aktuális értéke bonyolultabb struktúrális és elektronszerkezeti tényezőktől függ (határfelület és felület jelenléte, véges rétegvastagság stb.), ezért nyitott kérdés maradt, hogy az adott vékonyréteg rendszerre végzett first principles számítások igazolni tudják-e az inverz reorientáció fenti elméletét.

5.1. Az inverz reorientáció

Uiberacker C., Zabloudil J., Weinberger P., Szunyogh L., Sommers C.,
Phys. Rev. Lett. **82**, 1289-1292 (1999)

Mint azt a 2.3 alfejezetben említettem, módszerünk lehetőséget nyújt arra, hogy a rétegek (merőleges) rácsrelaxációját figyelembe vegyük. Ehhez csupán az kell, hogy az árnyékolt struktúrakonstansokat a (2.24) egyenlet alapján számítsuk ki. A Cu(001)/Ni_n rendszerre (0 < n ≤ 15) ezt az eljárást alkalmaztuk a tetragonális kontrakció 0 %, -2.5 % és -5.5 %-os mértékére. Ugyan a kísérletileg mért $c/a=0.945$ hányados (Müller és mtsi. 1996, Platow és mtsi. 1999) az utóbbi értéknek felel meg, a többi, összehasonlító számítás elvégzésével az volt a célunk, hogy a rácsrelaxáció trendjét szemléletesebbé tegyük. Minden rétegre ugyanolyan mértékű, uniform relaxációt tételeztünk föl.

A mágneses anizotrópia energiákat az 5.1 ábra mutatja. Mindhárom vizsgált esetben a MAE görbék jellezetessége kis rétegvastagságnál a többszörös előjelváltás: monorétegre negatív, két atomi rétegre pozitív, majd 3 ill. 4 atomi réteg vastagságnál ismét negatív. Mivel a Ni kis mágneses momentuma (0.7-0.8 μ_B) miatt ΔE_{dd} is kicsi – valójában csak vastagabb rétegek esetében lesz számottevő szerepe –, ezt a viselkedést a sávenergia anizotrópiája határozza meg. A ΔE_b ilyen nagy változásai ultravékony rétegekben nem meglepő a (határ)felület indukálta elektronszerkezeti változások miatt (l. pl. a 3.2 alfejezetet). $n=6$ -nál a MAE minimumot ér el, majd kb. $n=12$ -ig növekszik. Tetragonális kontrakció nélkül ez azonban nem elegendő ahhoz, hogy a mágneszettség irányát a síkból merőleges irányba fordítsa. -2.5 %-os



5.1. ábra. Mágneses anizotópia energiák (ΔE), sávenergia anizotrópiák (ΔE_b) és mágneses dipól-dipól energia járulék (ΔE_{dd}) a Cu(001)/Ni_n vékonyrétegekben az n rétegvastagság függvényében. A háromszögekkel, négyzetekkel ill. körökkel jelzett görbék rendre a Ni film 0, -2.5 ill. 5 %-os tetragonális kontrahciójára vonatkoznak.

relaxáció esetén azonban $n=10$ -re ΔE már pozitív értéket vesz föl, azonban a növekvő mágneses dipól-dipól energijárulék miatt $n=14$ -nél ismét negatívvá válik. -5.5% -os kontrakció esetén ΔE_b minimuma $n=6$ -nál mindössze -0.4 meV, amit igen erőteljes növekedés követ $n=12$ -ig. Ennek következtében $n=7$ rétegvastagságnál inverz reorientációt kapunk és az 5.1 ábrából leolvasható, hogy a merőleges mágnesezettség még vastagabb rétegekre is fennáll. *Megállapíthatjuk tehát, hogy az inverz reorientáció valóban a tetragonális kontrakció következménye és a kísérleti -5.5% -os kontrakció alkalmazásával a reorientáció kritikus vastagságát ($n=6.7$) kiválóan reprodukáltuk.*

A továbbiakban azt vizsgáljuk meg, hogy a bevezetőben említett kvalitatív modelt (l. az (5.1) egyenletet) mennyire támasztják alá a first principles számítások. Az 5.1 ábra alapján első pillantásra elvethetnénk a fenomenológikus modelt, hiszen ΔE_b messzemenőig nem lineáris (mégcsak nem is monoton) függvénye n -nek. Mindazonáltal a relaxált mintáknál a $6 \leq n \leq 12$ tartományban, tehát ott ahol a reorientáció történik, ΔE_b monoton, megközelítően lineáris viselkedését látjuk. Ez arra utal, hogy a fenomenológikus model bizonyos közelítésben és megfelelő finomítással a first principles számításokhoz igazítható.

A mélyebb megértés kedvéért az 5.2 ábrán ΔE_b atomi rétegfelbontását ábrázoltuk az $n=6, 9$ és 12 esetekre különböző relaxációk mellett. Itt egyrészt jól megfigyelhető a Cu/Ni határfelületi, de főképpen a felületi Ni atomi réteg negatív anizotrópia járuléka. Ugyanakkor a határfelület ill. a felület alatti atomi rétegek pozitív járulékot adnak a MAE-hoz. Ezenkívül az egyes ΔE_b^p járulékok erősen függnak a rétegvastagságtól. Valójában az $n=12$ vastagságú mintánál különül el jól láthatóan egy belső, 4 atomi réteg széles tartomány, ahol az atomi rétegek járuléka megegyezik: 0% relaxáció esetén lényegében zérus (v.ö. a 4.11 ábrán a ferromágneses Fe filmmel), -2.5% relaxációnál ~ 0.04 meV/atom réteg és -5.5% relaxációnál pedig ~ 0.09 meV/atom réteg.

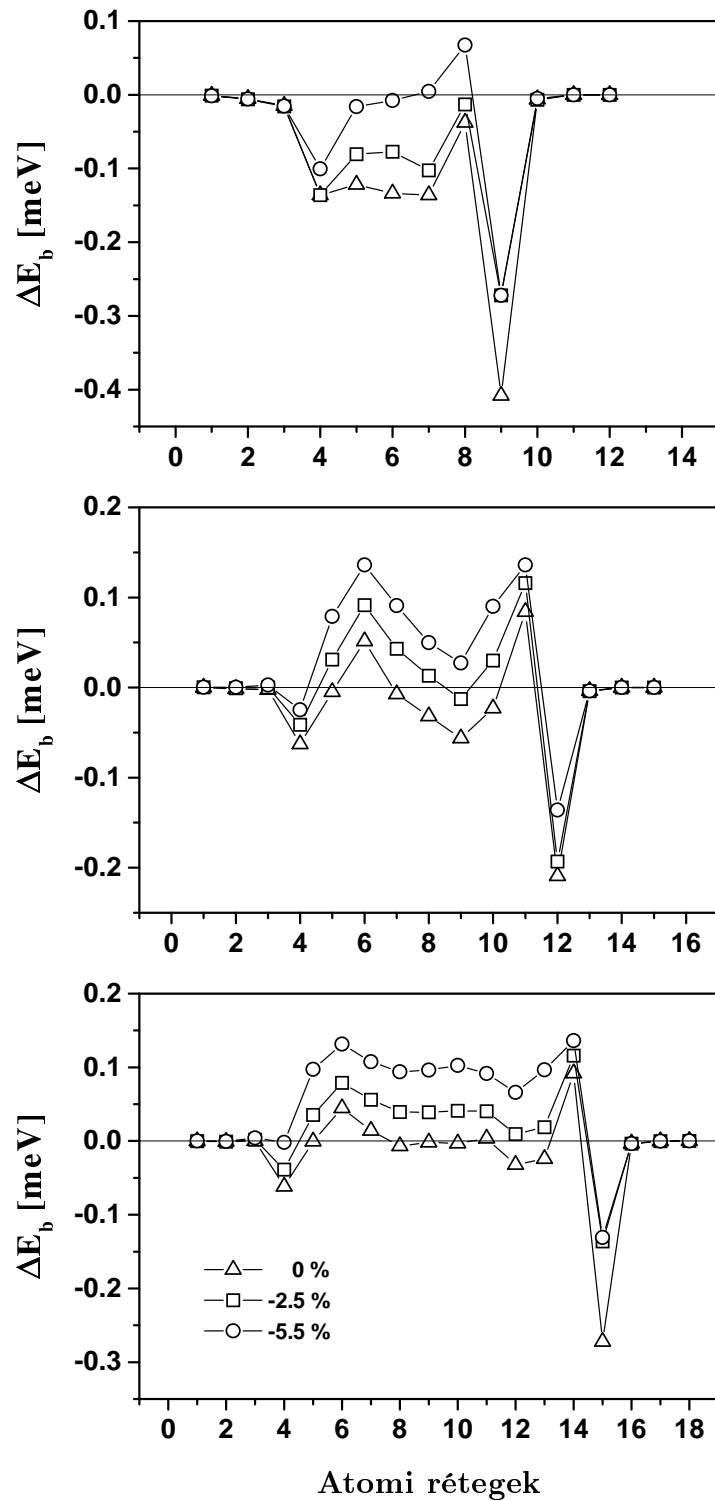
A kvantitatív analízis elvégzése céljából az $n \geq 9$ vastagságú filmekre tehát definiálhatjuk a

$$K^s = K^{s_1} + K^{s_2}, \quad K^{s_1} = \sum_{p=1}^4 \Delta E_b^p, \quad K^{s_2} = \sum_{p=n-3}^n \Delta E_b^p, \quad (5.2)$$

$$K^v = \frac{1}{(n-8)} \sum_{p=5}^{n-4} \Delta E_b^p, \quad (5.3)$$

mennyiségeket, melyekkel a sávenergia anizotrópiája a következőképpen fejezhető ki,

$$\Delta E_b = K^s + (n-8) K^v. \quad (5.4)$$



5.2. ábra. A ΔE_b sávénergia anizotrópia atomi rétegfelbontása 6 (fent), 9 (középen) és 12 (lent) Ni atomi rétegre Cu(001) szubsztráton 0 % (háromszögek), -2.5 % (négyzetek) és -5 % (körök) tetragonális kontrakció mellett. (A bal- és jobboldali három-három atomi réteg az önkonzisztensen kezelt puffer Cu ill. vákuum tartomány.)

K^{s_1} a határfelületi, K^{s_2} pedig a felületi anizotrópiát foglalja össze, míg K^v a belső tömbszerű atomi rétegek átlagos járuléka. Jóllehet az 5.1 ábra alapján ΔE_b viselkedése $n \geq 9$ esetén sem tekinthető lineárisnak (mind a felületi, mind a köztes atomi rétegek járulécai fluktuálnak n függvényében), a fenti model vastagabb rétegekre jó leírást ad. Az (5.2)-(5.3) egyenletek alapján számított paramétereink: $K^v = 80 \pm 20 \mu\text{eV}/\text{atomi réteg}$, $K^s = -100 \pm 20 \mu\text{eV}$. Figyelembe véve az 5.1 ábrából leolvasható, mágneses dipól-dipól energiából származó anizotrópia járulékot ($\sim -14 \mu\text{eV}/\text{atomi réteg}$), a reorientáció kritikus vastagságára $n_c = 10 \pm 1$ érték adódik. Ez jelentősen különbözik a first principles számításokból kapott kritikus vastagságtól ($n_c \simeq 6.7$), ami nem meglepő, hiszen az (5.4) egyenlet érvényességi tartománya eleve ezen érték fölött van. Az irodalomban található kísérleti anizotrópia paraméterek értékei igen nagy szórást mutatnak: $K^v = 20\text{--}40 \mu\text{eV}/\text{atomi réteg}$, $K^s = -60 \text{--} -160 \mu\text{eV}$ (l. Kuch és mtsi. 2000 és az ott található referenciákat). Amennyiben a Ni bulk mágneses momentumát és atomi térfogatát vesszük figyelembe $2\pi M^2 = 11.6 \mu\text{eV}/\text{atom}$ adódik. Példaként tekintsük a Jungblut és mtsi. (1994) által meghatározott paramétereket: $K^v = 38 \mu\text{eV}/\text{atomi réteg}$ és $K^s = -163 \mu\text{eV}$. Ekkor az (5.1) képlet alapján $n_c = 6.2$ adódik, ami igen közel van a kísérletileg mért értékhez. Nyilvánvaló azonban, hogy ez az egyezés más paraméter kombinációkkal is könnyen reprodukálható. A fenomenológikus model és first principles számítás összevetésének fenti példája leginkább abból a szempontból tanulságos, hogy *a fenomenológikus anizotrópia paraméterek definiálását és interpretálását megfelelő körültekintéssel kell végezni. Kétségtelen, hogy az inverz reorientáció alapvető fizikai magyarázata, miszerint hogy azt a tetragonális kontrakció okozza, helyes volt, de first principles számításaink arra utalnak, hogy az (5.1.) egyenletben megfogalmazott egyszerű fenomenológikus model nem alkalmas a kvantitatív kiértékelésre.*

5.2. Cu(001)/Ni/Co: a normál reorientáció

Uiberacker C., Zablouil J., Weinberger P., Szunyogh L., Sommers C.,
Phys. Rev. B **62**, 5305-5308 (2000)

Mint azt a fejezet elején említettem, a Cu(001)/Ni_n rendszerben 40 atomi réteg vastagság körül $\perp \rightarrow \parallel$ (normál) reorientációt észleltek (O'Brien és mtsi. 1996, Farle és mtsi. 1997a). Az (5.1) (vagy (5.4)) model alapján ez nem lehetséges, hiszen a $\Delta E(n)$ függvénynek csak egy zérushelye van. A kísérletek viszont rámutattak arra, hogy a Ni atomi rétegek tetragonális kontrakciója csak kb. $n=13$ rétegvastagságig terjed, ennél vastagabb rétegekben az Cu/Ni határfelületről számított hozzávetőleg 13. atomi rétegnél a felülettel párhuzamos irányú kontrakció indul meg (strain relaxáció) és a Ni film fcc szerkezetben nő tovább. Ebből az következik, hogy az fcc környezetű Ni atomi rétegek nem adnak további térfogati anizotrópia járulékot (l. 4.2 alfejezetet) és a rétegvastagsággal lineárisan növekvő mágneses dipól-dipól energia miatt a mágnesezettség iránya egy kritikus rétegvastagságnál a felülettel párhuzamos irányba fordul.

Kísérletileg intenzíven tanulmányozták, hogy a Ni filmre tett ultravékony Co film hogyan befolyásolja ezt a második reorientációs átmenetet. Mivel az fcc Co vékonyrétegekben a könnyű mágneses irány általában a felülettel párhuzamos, a Co fedőrétegtől a kritikus Ni rétegvastagság csökkenését várták. Vékony ($0 < n < 18$) Ni filmek esetében 2 atomi réteg Co felvitele mindig síkbeli mágneses irányt eredményezett (O'Brien és mtsi. 1996). Ezzel szemben Kuch és mtsi. (2000) Cu(001)/Ni_n/Co_m vékonyrétegekben ($11 \leq n \leq 14$ és $1.4 \leq m \leq 2.6$) a reorientációs rétegvastagságokra az $m_c = 0.116 n_c + 0.62$ összefüggést kapták. Ez utóbbi szerzők a két megfigyelés ellentmondását a Co fedőréteg felületén lejátszódó maradék gáz abszorpció hatásával magyarázták. Vastagabb Ni filmekre is végeztek hasonló kísérleteket. Dürr és mtsi. (1997) azt tapasztalták, hogy a Cu(001)/Ni₃₃ film könnyű mágneses tengelye 3 atomi Co réteg felvitelekor a merőleges irányból a síkba fordul. Lényegében hasonló megfigyelést tettek Lee és mtsi. (1997), akik 60 Å (~ 34 atomi réteg) Ni filmre 6 ± 1.5 Å (3.4 ± 0.8 atomi réteg) Co fedőréteg vastagságnál mutattak ki reorientációs átmenetet. Meg kell jegyezni azonban, hogy az utóbbi kísérletben a Co fedőrétegre még 30 Å (~ 17 atomi réteg) Cu réteget is felvittek, mely a tiszta Co felülethez képest valószínűleg a merőleges mágneses anizotrópiát erősítette (l. a 3.3 alfejezetet).

Számításokat végeztünk a Cu(001)/Ni_n/Co_m rendszer ($n > 20$, $m=0$,

1, ..., 5) mágneses anizotrópia energiájára abból a célból, hogy meghatározzuk a reorientációs átmenet kritikus vastagságainak ($n_c - m_c$) összefüggését. Mivel számítási módszerünk kizárólag két-dimenziós transláció invariáns rendszerekre alkalmazható (l. a 2.3 alfejezetben), a Ni réteg *strain* relaxációját nem tudtuk egzaktul kezelni, hiszen a megfelelő rétegtartományban a síkbeli rácsállandó atomi rétegenként különböző. Mivel azonban az fcc Ni – fcc Ni átmeneti tartomány feltehetőleg nem szélesebb mint néhány atomi réteg és a rácsállandó változása sem túl drasztikus ($2.56 \text{ \AA} \rightarrow 2.49 \text{ \AA}$), a valóságos rendszer különböző tartományait különböző modelrendszereken keresztül próbáltuk meg leírni és a MAE-t ezen tartományok járulékainak összegéből előállítani ("építőköcka" model). Arra a feltevésre alapoztuk ezt az eljárást, hogy a különböző modelrendszerek közös, átfedő tartományokban a fizikai mennyiségek (töltések, mágneses momentumok és sávenergia anizotrópia járulékok) jó közelítéssel megegyeznek egymással, tehát a valóságos rendszer folytonosan összeillő komponenseken keresztül modellezhető. Modelrendszereink a következők voltak:

$$A: \text{Cu}(001)/\text{Ni}(-5.5 \%)_{15}/\text{Ni}(0 \%)_{12}$$

$$B: \text{Cu}(001)/\text{Ni}(-5.5 \%)_{21}$$

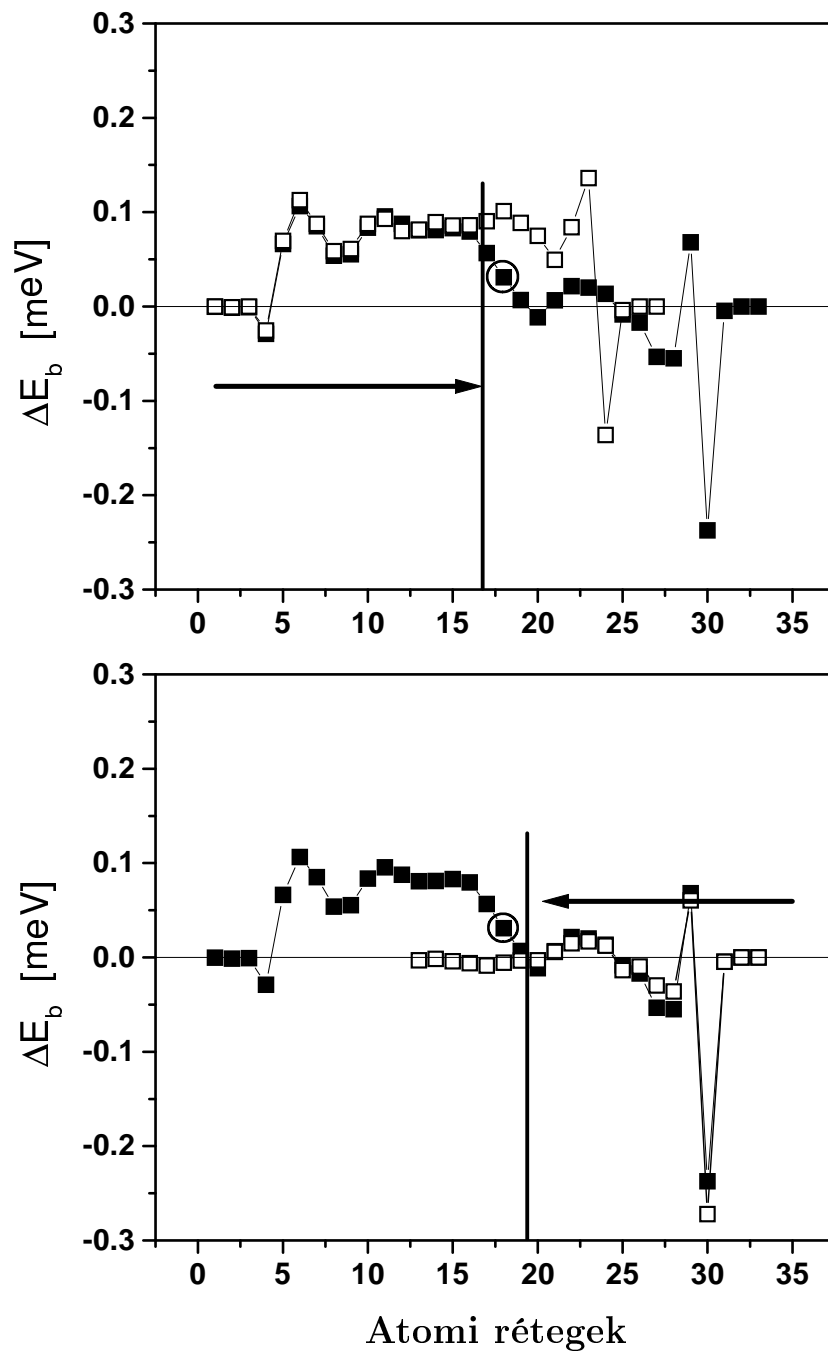
$$C: \text{Ni}(001)/\text{Ni}(0 \%)_{18}$$

$$D: \text{Ni}(001)/\text{Ni}(0 \%)_{12}/\text{Co}(0 \%)_m \quad (m=1, \dots, 5)$$

melyek az általunk vizsgált rendszer

$$E: \text{Cu}(001)/\text{Ni}(-5.5 \%)_{n_1}/\text{Ni}(0 \%)_{n_2}/\text{Co}(0 \%)_m$$

egy-egy karakterisztikus tartományának leírására szolgáltak. Az *A-D* rendszerekben, melyekre számításokat végeztük, az adott szubsztrát felület két-dimenziós rácsállandóját használtuk és a zárójelekben lévő százalékok a tetragonális relaxáció mértékét jelölik. Az *E* rendszer MAE-ját valójában az *A* és *D* rendszerek összeillesztéséből nyertük, míg a *B* és *C* rendszereket arra használtuk, hogy az *A* rendszerben a Ni rétegek fcc–fcc átmeneti tartományát illusztráljuk. Ez látható az 5.3 ábrán, ahol ΔE_b sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontását tüntettük fel az *A*, *B* és *C* rendszerekre.



5.3. ábra. A sávenergia anizotrópia rétegenkénti járulékainak összehasonlítása különböző modelrendszerekben. Teli négyzetek: Cu(001)/Ni₁₅(-5.5%)/Ni₁₂(0%) (*A* rendszer), üres négyzetek fent: Cu(001)/Ni₂₁(-5.5%) (*B* rendszer), üres négyzetek lent: Ni(001)/Ni₁₈(0%) (*C* rendszer). Az *A* rendszerben az utolsó relaxált atomi réteget karikával jelöltük meg. A nyílak arra utalnak, hogy a *B* rendszert balról, a *C* rendszert pedig jobbról illesztettük az *A* rendszerhez, és a jó közelítéssel átfedő tartományok határát függőleges vonal indikálja.

Valójában már az A rendszer grafikonja alapján jól definiálható a Ni atomi rétegek ΔE_b^p járulékainak következő csoportosítása:

Cu/Ni határfelület közeli tartomány – az első kb. 8 atomi réteg a Cu/Ni határfelület után,

relaxált közbenső Ni tartomány – a következő 5 Ni atomi réteg, melyet kb. 0.09 meV/atomi réteg konstans járulék jellemez,

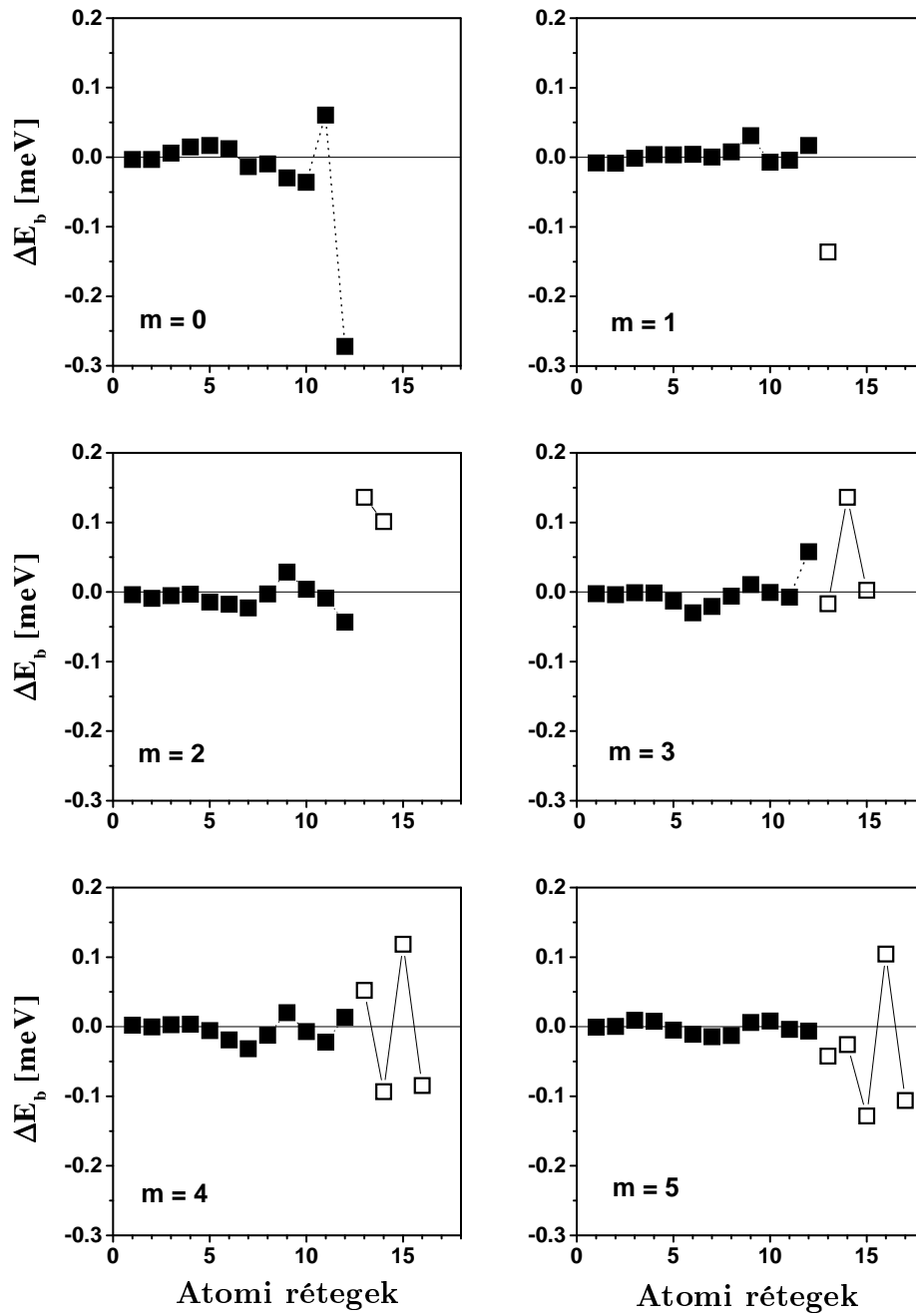
fcc–fcc átmeneti tartomány – a 14.-16. Ni atomi rétegek (az utolsó relaxált atomi réteg a 15.), ahol ΔE_b^p megközelítően nullára csökken, és a

felület közeli tartomány – az utolsó 11 Ni atomi réteg, tipikus negatív járulékkal a felületen.

A B rendszerrel való összehasonlítás szemléletesen igazolja eredeti feltevésünket, miszerint a két rendszer közös tartományában, azaz a Cu/Ni határfelület közeli tartományban és a relaxált közbenső Ni tartományban a ΔE_b^p járulékok igen jó közelítéssel átfedik egymást. Ugyanez mondható el az A és C rendszer összehasonlításánál is, ugyanis itt a felület közeli tartomány ΔE_b^p járulékai mutatnak kielégítő egyezést. Ezáltal az fcc–fcc átmeneti tartomány leválasztása egyértelműnek tekinthető. Meg kell azonban jegyezni, hogy struktúrálisan ezt a tartományt csak egy atomi réteg szélességgel vetjük figyelembe. ΔE_b^p sima viselkedéséből arra következtettünk, hogy ezen tartomány kiszélesedése során a sávenergia anizotrópiához való összjáruléka szignifikánsan nem változik.

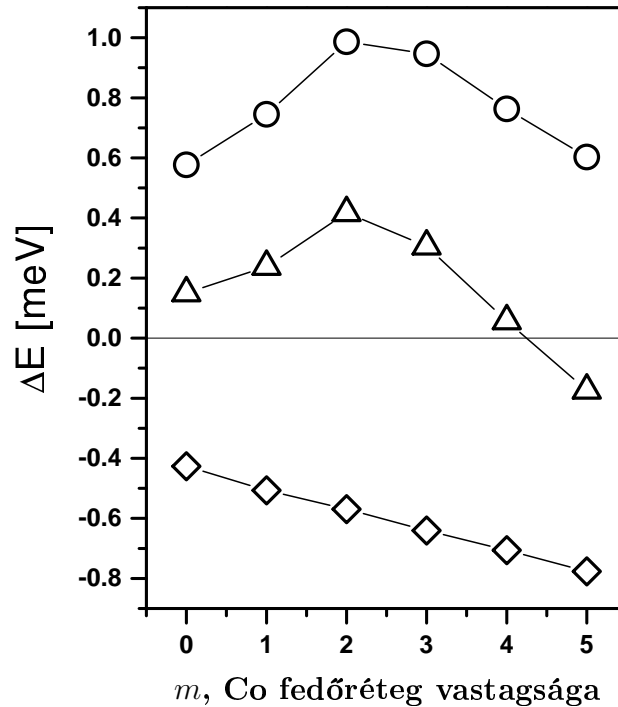
A relaxált rétegek n_1 számának csökkentésével először a közbenső tartomány járuléka csökken, méghozzá kb. 0.09 meV/atomi réteg mértékben. Így a $10 \leq n_1 \leq 15$ tartományban egy egyszerű lineáris becslést adhatunk ΔE_b -re. Ha viszont a relaxálatlan rétegek n_2 számát növeljük, akkor az újabb Ni atomi rétegek lényegében fcc tömbi környezetbe kerülnek, és az C rendszer ΔE_b^p grafikonja alapján nem adnak további járulékot ΔE_b -hez. A mágneses momentumokra ugyancsak fennáll, hogy értékük a relaxált közbenső atomi rétegekben ill. a relaxálatlan közbenső rétegekben konstans, sőt valójában – eltekintve a határfelületi ill. felületi atomi rétegektől – az egész filmben konstansnak tekinthető ($\sim 0.75 \mu_B$). Ezáltal a Cu(001)/Ni(-5.5%) $_{n_1}$ /Ni(0%) $_{n_2}$ rendszer MAE-ja jó közelítéssel megbecsülhető a $10 \leq n_1 \leq 15$ és $n_2 > 10$ értékekre. Mielőtt azonban ezekre az eredményekre rátérnénk, a Co fedőréteg hatásával foglalkozunk.

Az 5.4 ábra a Ni(001)/Ni(0%) $_{12}$ /Co $_m$, azaz a D modelrendszerben mutatja ΔE_b atomi rétegfelbontását. Egy Co monoréteg felvitele a legfelső Ni réteg anizotrópia járulékát drasztikusan megváltoztatja: a nagy negatív járulék he-



5.4. ábra. A sávenergia anizotrópia atomi rétegfelbontása a Ni(001)/Ni₁₂(0%)/Co_m ($m = 0, \dots, 5$) rendszerben. A teli ill. üres négyzetek rendre Ni ill. Co atomi rétegeket jelölnek.

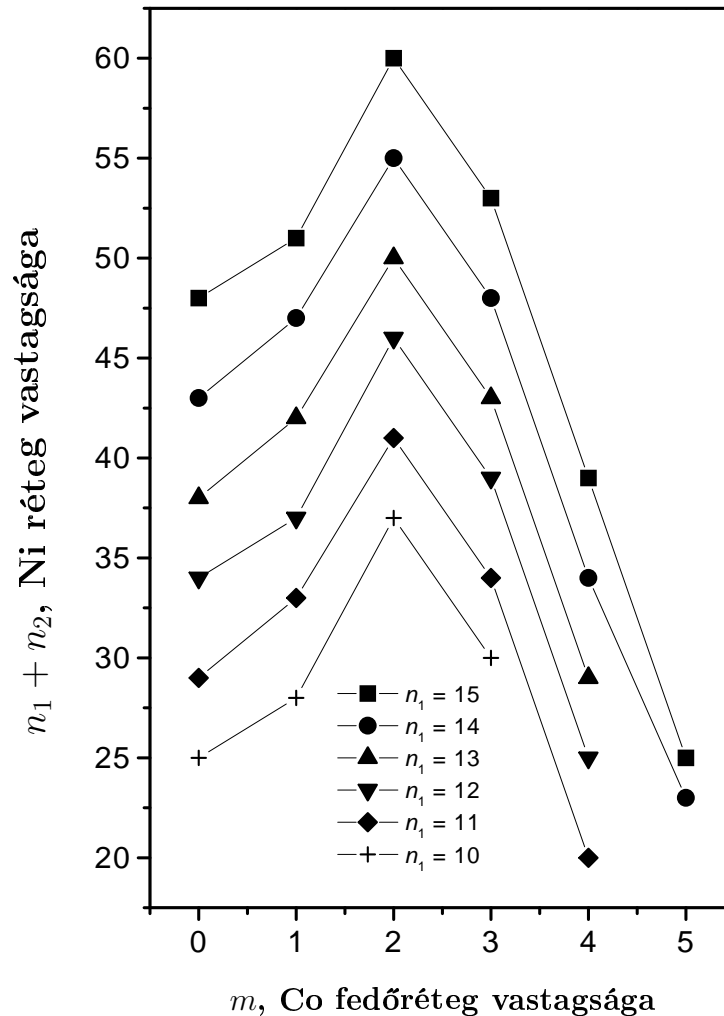
lyébe egy elhanyagolhatóan kicsiny sávenergia anizotrópia lép. További Co atomi rétegek felvitelével a Ni felületi anizotrópia járuléka, bár kisebb amplitudójú oszcillációk fellépnek, már nem sokat változik. A Co atomi réteg járulékanak változása szembetűnőbb: $m=1$ esetben negatív, $m=2$ -nél mindkettő Co atomi réteg pozitív járulékot ad, míg $m \geq 3$ esetekben egy alternáló viselkedés dominál. Amint az várható, kb. 8 atomi réteggel a Ni/Co határfeület alatt a Ni járulékok m -től függetlenül megközelítően zérus anizotrópia járulékot adnak, azaz lényegében a relaxálatlan tömbi Ni tartomány kezdődik el.



5.5. ábra. ΔE_b sávenergia járuléka (körök), ΔE_{dd} mágneses dipól-dipól energia járuléka (négyzetek) és $\Delta E = \Delta E_b + \Delta E_{dd}$ MAE (háromszögek) a Cu(001)/Ni₁₃(-5.5%)/Ni₁₇(0%)/Co_m vékonyrétegekben a Co fedőréteg vastagsága függvényében.

A fentiekben leírt eljárással (a C rendszer helyébe a D rendszert helyettesítve) az n_1 relaxált és n_2 relaxálatlan Ni atomi réteggel, valamint m Co atomi fedőréteggel rendelkező E rendszer MAE-ja könnyen approximálható. Példaként az 5.5 ábrán az $n_1=13$ és $n_2=17$ esetben a MAE-t és komponenseit ábrázoltam m függvényében. Mint az az 5.4 ábra alapján várható volt, ΔE_b $m=2$ -ig nő, majd csökken. Érdekes viszont, hogy ΔE_b még $m=5$ -nél is magasabb, mint Co fedőréteg nélküli esetben ($m=0$). A nagy Co mágneses momentum ($\sim 1.8 \mu_B$) miatt ΔE_{dd} abszolút értéke viszont $m=0$ -ról $m=5$ -re közel kétszeresére növekszik. A kísérleti eredményekkel összhangban

$m=0$ esetben a MAE pozitív, tehát a mágnesezettség merőleges irányú. Egy ill. két Co atomi fedőréteg növeli a MAE-t, de a fedőréteg vastagságának további növelésével a MAE meredeken csökken és ugyancsak a megfigyelésekkel konzisztens módon $m=4$ -nél reorientációs átmenet következik be.



5.6. ábra. A $\perp \rightarrow \parallel$ reorientációs átmenet kritikus Ni réteg vastagsága ($n_1 + n_2$) a Co fedőréteg vastagságának (m) függvényében. Egy adott görbe fölötti tartományban a mágnesezettség merőleges a felületre, alatta pedig a felülettel párhuzamos irányú.

Az 5.5 ábra alapján könnyű elképzelni, hogy a relaxált és relaxálatlan Ni rétegek n_1 és n_2 számának függvényében ($10 \leq n_1 \leq 15$, $n_2 > 10$) kiszámítható a Co fedőréteg azon m vastagsága, ahol a reorientációs átmenet lejátszódik, azaz $\Delta E = 0$. Az 5.6 ábrán ezt úgy ábrázoltam, hogy a vízszintes tengelyen m , a függőleges tengelyen pedig a Ni réteg teljes vastagsága ($n = n_1 + n_2$) szerepel és a különböző görbék különböző n_1 értékekhez tartoznak. A görbék

könnyebb értelmezése végett megjegyzem, hogy egy adott görbe feletti ill. alatti tartományban a film mágnesezettsége a felülettel párhuzamos ill. arra merőleges irányú. Mivel ΔE_b radikálisan emelkedik n_1 -gyel, egy relaxált Ni atomi réteg járulékát átlagban 4-5 relaxálatlan Ni atomi réteg dipól-dipól járuléka tudja kompenzálni. Az 5.6 ábrán ezért n_1 növelésével a görbék hozzávetőleg a fenti értékkel felfelé tolódnak el. Amennyiben n_1 -et fixáljuk, n (azaz valójában n_2) erősen nem-lineáris függését kapjuk m -tól. Mivel a MAE lineárisan függ n_2 -től, az egyes görbék lényegében a MAE 5.5 ábrán látható alakját követik m függvényében. A koercitív erő mérése alapján valószínűsített $n_1=13$ értéket figyelembe véve az $m=0$ -ra kapott $n=37$ kritikus Ni réteg vastagság kitűnő egyezést mutat a kísérlettel (O'Brien és mtsi. 1996). Ugyanezen n_1 érték és $n=33$ Ni réteg vastagság mellett kb. 3.5 Co atomi fedőréteg vastagságnál kapunk reorientációs átmenetet, ami ugyancsak jó egyezés a kísérletekkel (Dürr és mtsi. 1997, Lee és mtsi. 1997). Igen érdekes azonban, hogy olyan Ni rétegvastagságoknál, ahol Co fedőréteg nélkül a reorientáció már megtörtént, egy *vékony Co fedőréteg ($m < 2$) inverz ($\parallel \rightarrow \perp$) reorientációt okozhat*, majd a Co fedőréteg vastagságának további növelése fordítja a mágnesezettséget a felülettel párhuzamos irányba. Ez az 5.6 ábrán a görbék nem-monoton viselkedéséből nyilvánvaló (l. az 5.5 ábrát is). A Co fedőréteg által okozott inverz reorientációt, mely a first principles számítások igen szemléletes igazolása lenne, eddig még kísérletileg nem mutatták ki. Meg kell viszont említenem, hogy számításaink elsőrendű átmenetre vonatkoznak, míg a kísérletek másodrendű reorientációs fázisátalakulást mutattak széles átmeneti tartománnyal (O'Brien és mtsi. 1996).

6. fejezet

További vizsgálatok

6.1. A felület közeli szennyeződés mágneses anizotrópiája

Szunyogh L., Györfly B.L., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3765–3768 (1997)

Szunyogh L., Györfly B.L., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **475**, 457–462 (1997)

A 90-es évek elején intenzíven tanulmányozták a Kondo ellenállás minimum függését a minta méretétől és alakjától (Chen, Giordano 1991; DiTusa 1992; Blachly, Giordano 1994). A megfigyelések szerint a T_K Kondo hőmérséklet nem mutat méreteffektust, viszont a Kondo ellenállás, $\Delta\rho = -B \ln(T)$ ($T > T_K$), B együtthatója drámaian lecsökken az alkalmazott minta vastagságának csökkentésével. Újsághy és mtsi. mutattak rá először, hogy vékony filmben a mágneses szennyeződés spinjének mozgása a felület által indukált mágneses anizotrópia miatt befagyhat, ami kielégítő magyarázatot szolgáltat a kísérletileg észlelt anomális Kondo effektusra (Újsághy és mtsi. 1996; Újsághy, Zawadowski 1998a, 1998b). Számításaikban Újsághy és mtsi. egy effektív Kondo-Hamilton modellt használtak, kiegészítve a *host* anyag vezetési elektronjai és d -elektronjai közötti hibridizációval, valamint a d -elektronok spin-pálya csatolásával. A felületet úgy modellezték, hogy a spin-pálya kölcsönhatást a tér egyik félvégtelen részében nem vették figyelembe. A számítások arra az eredményre vezettek, hogy szennyeződés sajátenergiájának anizotróp része leírható egy

$$H_a(d) = K(d) (S_i^z)^2 \quad (6.1)$$

effektív Hamilton operátorral, ahol d a szennyeződés távolsága a felülettől, $K(d)$ a mágneses anizotrópia konstans és S_i^z a szennyező spin-operátorának

z komponense. Ezenkívül kiderült, hogy

$$K(d) > 0 \quad \text{és} \quad K(d) \sim 1/d \quad (k_F d \gg 0), \quad (6.2)$$

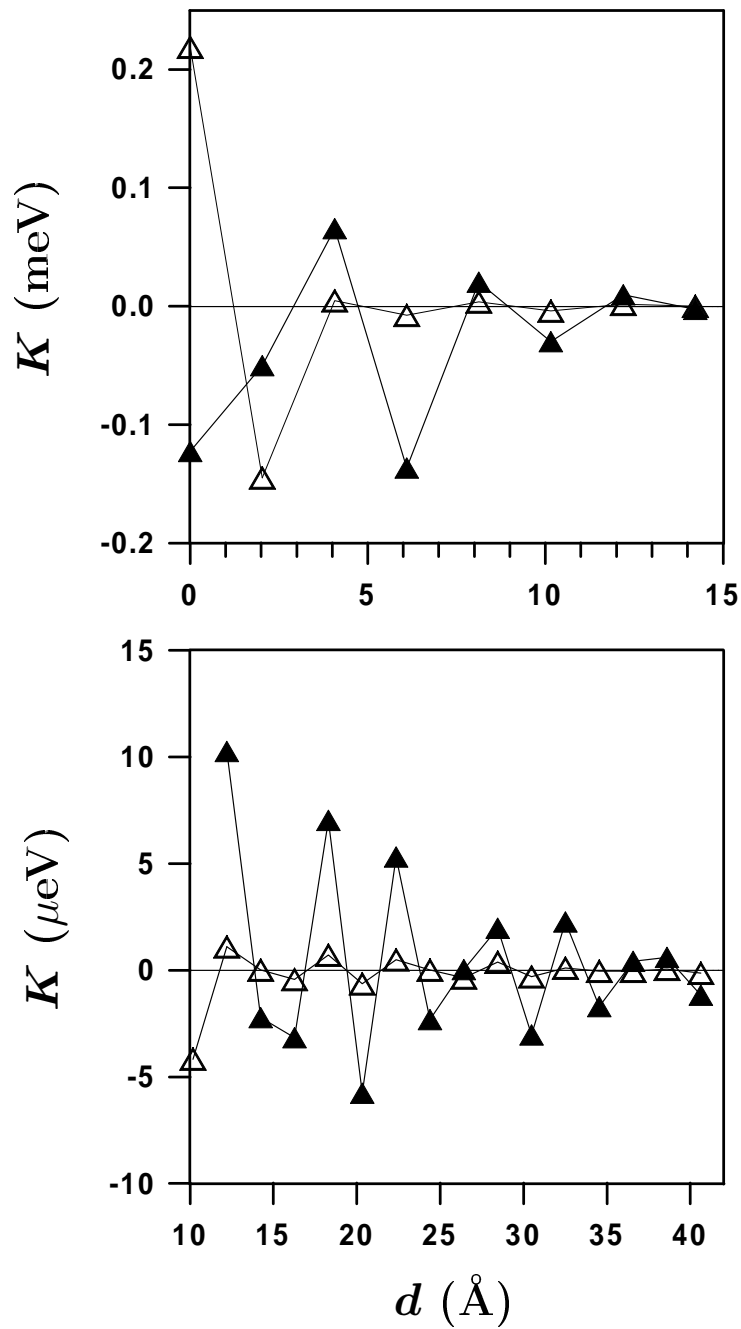
azaz a szennyező spinje a felülettel párhuzamos irányt preferálja és az effektus kielégítően lassú lecsengésű a d távolság függvényében. A K anizotrópia konstansra viszont csak elég tág határokon belül tudtak becslést mondani. További kérdés, hogy a felületet realiztikusabb figyelembe vétele mennyiben változtatja meg az eredményeket.

Annak érdekében, hogy az effektus nagyságáról pontosabb információt nyerjünk, anyagspecifikus first principles számítást végeztünk egy vas szennyező atomra az Au(001) felület közelében. A Fe potenciált az Au bulkban számoltuk ki, míg a potenciál felület közeli önkonzisztens változásait elhanyagoltuk. A vas atomot az Au(001) felület különböző atomi rétegeire helyeztük, és minden egyes esetben kiszámoltuk a sávenergia anizotrópiáját, melyet a $K(d)$ anizotrópia konstanssal azonosítottunk:

$$K = E_b^{Fe}(\perp) - E_b^{Fe}(\parallel). \quad (6.3)$$

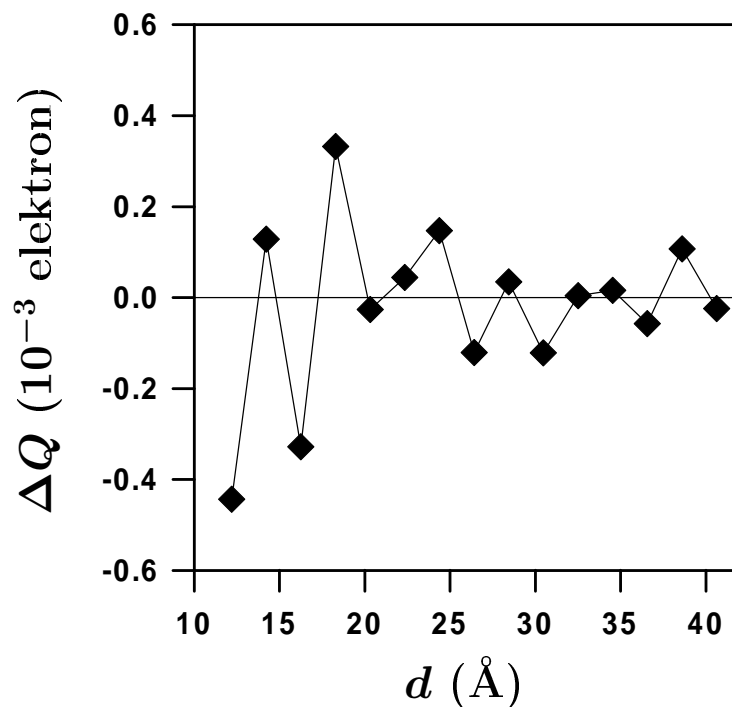
Újsághy és mtsi. által alkalmazott modellel való összehasonlítás kedvéért a számításokat megismételtük úgy, hogy az Au bulk egyik felében a spin-pálya kölcsönhatást zérusra skáláztuk (Ebert és mtsi. 1996). Ezekre a számításokra a következőkben *SOC-felület* számításokként hivatkozom.

A K anizotrópia konstansra vonatkozó számítási eredményeinket a 6.1 ábra mutatja. Függetlenül attól, hogy realiztikus vagy a SOC által indukált felületről van szó, a felület közvetlen közelében a vas szennyező viszonylag erős mágneses anizotrópiának van kitéve. A MAE előjele viszont már különbözik a két esetben, sőt a felülettől mért távolság függvényében is változik, ami az elektronszerkezet felület által indukált változásait tekintetbe véve nem meglepő. A d távolság növekedésével a SOC-felületbe ágyazott szennyeződés MAE-ja hirtelen lecsökken, míg a realiztikus felületbe ágyazott szennyezőnél ez a csökkenés jóval lassabb. Ez arra utal, hogy a felülettől távoli vasatom jóval kevésbé érzi a SOC-felület szimmetria törő hatását, mint a valóságos potenciálszórást végző felület esetében. Amint az a 6.1 ábra alsó paneljén megfigyelhető, a felülettől távolabb $K(d)$ szabályosnak tűnő, lecsengő oszcilláló viselkedést mutat. Az amplitúdó csökkenése gyorsabbnak tűnik, mint $1/d$. $K(d)$ ezen viselkedése nyilvánvalóan ellentmond a (6.2) tulajdonágoknak, melyet Újsághy és mtsi. állapítottak meg.



6.1. ábra. Fe szennyező mágneses anizotrópia konstansa (K) az Au(001) felülettől mért d távolság függvényében. Teli háromszögek: realiztikus felület, üres háromszögek: SOC-felület.

Elsődleges feladatunk az volt, hogy saját számítási eredményeinkre magyarázatot találjunk. A töltéssűrűségnek a felület által reprezentált potenciálszórás miatt fellépő hosszútávú oszcilláló viselkedése (Friedel-oszcillációk) már régóta ismeretes volt (Lang, Kohn 1970, 1971, 1973). Az elmélet szerint az oszcillációk periódusát a Fermi vektor nagysága határozza meg. A 6.2 ábrán a vas szennyező atom töltésének változását mutatjuk be az Au(001) felülettől való távolság függvényében a tömbi aranyba ágyazott vasatom töltéséhez viszonyítva (ΔQ). Ezen az ábrán ΔQ oszcillációi jól láthatók, valamint az is, hogy ezek az oszcillációk hasonló periodicitást mutatnak, mint $K(d)$ oszcillációi. Valószínűsíthető tehát, hogy $K(d)$ oszcilláló viselkedése a Friedel-oszcillációk következménye.



6.2. ábra. Extra töltés az Fe szennyezőn az Au(001) felülettől mért d távolság függvényében.

Azért, hogy a fenti állítást bizonyítsuk ill. pontosabban megfogalmazzuk, milyen tényezőktől függ $K(d)$ oszcilláló viselkedése, elvégeztük a *pontszerű szennyeződés és felület kölcsönhatásának aszimptotikus analízisét*. Az önkonzisztens hatások kizárásával a rendszer energiáját az Ω nagykanonikus potenciál adja meg, melyet a többszörös szóráselmélet keretein belül az integrált állapotsűrűségekre vonatkozó Lloyd formula segítségével (Lloyd 1967)

a következőképpen fejezhetünk ki véges hőmérsékleten,

$$\Omega = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \text{Tr} \ln(\boldsymbol{\tau}(\varepsilon)) , \quad (6.4)$$

ahol $f(\varepsilon)$ a Fermi-Dirac eloszlás és $\boldsymbol{\tau}(\varepsilon)$ a rendszer szórási úthossz operátora (l. a (2.6) és (2.7) egyenleteket). Analízisünkben egy olyan rendszerrel foglalkoztunk, ahol a tömbi hordozó anyag egyik félvégtelen részét vákuummal (pl. üres gömb potenciálokkal), a maradék féltér egy celláját pedig a szennyező potenciáljával cseréltük le. Néhány átrendezés után a (6.4) egyenletből leválasztható a tömbi hordozóba ágyazott szennyező és a felület járuléka, melyek mindegyike értelemszerűen független a pontszennyező és a felület relatív helyzetétől. A fennmaradó járulék,

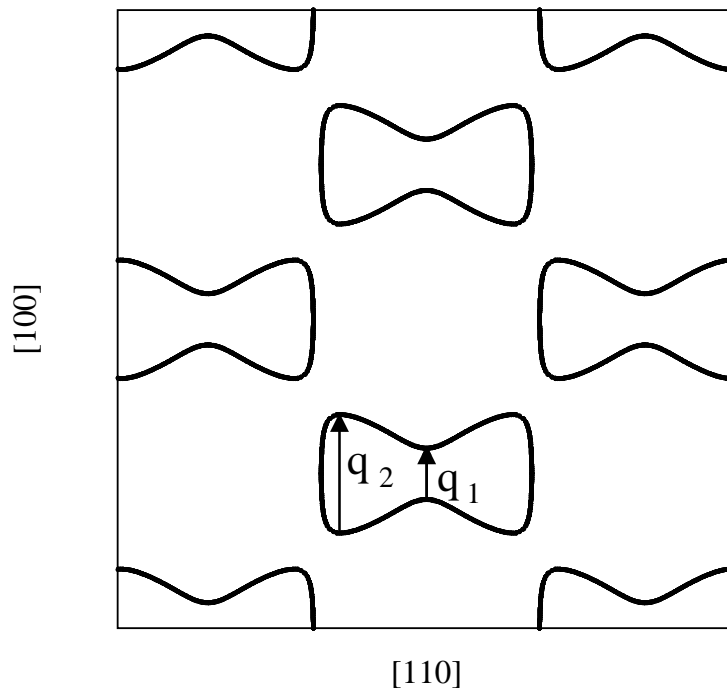
$$\begin{aligned} \Omega_{iS} &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \text{Tr} \ln [\mathbf{I} - \boldsymbol{\Delta}_i(\varepsilon) \boldsymbol{\tau}_b(\varepsilon) \boldsymbol{\Delta}_S(\varepsilon) \boldsymbol{\tau}_b(\varepsilon)] \\ &\simeq -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \text{Tr} [\boldsymbol{\Delta}_i(\varepsilon) \boldsymbol{\tau}_b(\varepsilon) \boldsymbol{\Delta}_S(\varepsilon) \boldsymbol{\tau}_b(\varepsilon)] , \end{aligned} \quad (6.5)$$

azonosítható a pontszennyező–felület kölcsönhatással. Itt $\boldsymbol{\tau}_b(\varepsilon)$ a tömbanyag szórási úthossz operátora és $\boldsymbol{\Delta}_i(\varepsilon)$ valamint $\boldsymbol{\Delta}_S(\varepsilon)$ a szennyező ill. a felület ún. interaktorai, melyek a tömbi anyagba ágyazott perturbáló közegen való szóródást írják le. A bulk 3D és a felület 2D transláció invarianciáját kihasználva a (6.5) egyenlet Brillouin-zóna integrál formájába írható át, ahol az integrandusban megjelenik egy $e^{-id(k_z - k'_z)}$ faktor, ahol d a pontszennyező és a felület távolsága, k_z és k'_z pedig az adott felületre merőleges irányban az 1D Brillouin-zóna (tehát egy véges tartomány) elemei. Nyilvánvaló, hogy $d \rightarrow \infty$ esetben ez a faktor igen gyorsan oszcillál. Így a k_{\parallel} -integrálás a stacionárius fázis (vagy nyeregpon) módszer segítségével elvégezhető és az energia szerinti integrálásban Lighthill tételét (Lighthill 1962) alkalmazhatjuk. A levezetés részleteinek közlése nélkül a pontszennyező és felület kölcsönhatásának aszimptotikus alakjára az alábbi kifejezést nyerjük

$$\Omega_{iS}(d) \simeq \sum_{\nu} I_{\nu} \sin(q_{\nu}d + \phi_{\nu})/d^2 , \quad (6.6)$$

ahol ν a Fermi-felületnek az adott geometriai felületre merőleges ún. extrémális vektorait indexeli, q_{ν} ezen extrémális vektorok hossza, $\phi_{\nu} \in \{-\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2}\}$ és I_{ν} egy viszonylag bonyolult kifejezés, mely a kölcsönhatástól és a Fermi felület alakjától függ. Példaként a 6.3 ábra egy tipikus nemesfém Fermi-felületének (100) irányú extrémális vektorait ábrázolja.

A (6.6) egyenlet tehát azt implikálja, hogy a pont-felület kölcsönhatás oszcillációi $1/d^2$ szerint csengenek le. A 6.4 ábrán a 6.1 ábra adatait ábrázoltuk

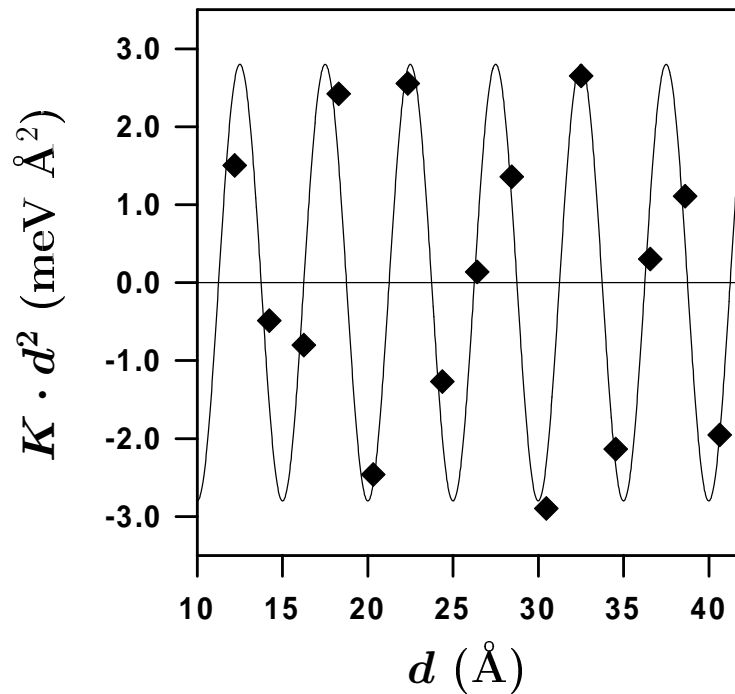


6.3. ábra. Egy tipikus nemesfém Fermi felületének (100) irányú két extrémális vektora.

d^2 -tel beszorozva. Az ábrán jól látható, hogy ezekre a pontokra kiválóan illeszthető az $I^* \sin(2\pi d/d^* + \pi/2)$ görbe az $I^* = -2.8 \text{ meV } \text{Å}^2$ és $d^* = 5 \text{ Å} \simeq 2.5d_0$ paraméterekkel, ahol d_0 az Au(001) felület atomi réteg-réteg távolsága. A d^* periódus valóban a bulk arany Fermi felületének (001) irányú hosszabb extrémális vektorának (q_2 a 6.3 ábrán) felel meg (Halse 1969).

Fontos megjegyezni, hogy a felület-felület kölcsönhatás aszimptotikus analízise a (6.6) egyenlethez formailag hasonló eredményre vezet (Bruno, Chappert 1991; Bruno, Györfly 1993; Újfalussy és mtsi. 1998). Ezenkívül formailag az sem lényeges, hogy milyen típusú kölcsönhatásról van szó, hiszen ez az információ az I_v mennyiségben van elrejtve. Így nem meglepő, hogy két, Au(001) spacerrel elválasztott, Fe film *oszilláló mágneses (vagy kicserélődési) határfelületi csatolásában* ugyanaz a periódus jelenik meg (Unguris és mtsi. 1994; Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Sommers C., *Phys. Rev. B* **54**, 6430–6436 (1996)), mint a Fe szennyeződés és az Au(001) felület kölcsönhatásánál.

A (6.6) képlettel megadott aszimptotikus alak viszont alapvetően különbözik $K(d)$ Újsághy és mtsi. által levezetett (6.2)-es viselkedésétől. A két eredmény közötti különbség oka valószínűleg abban áll, hogy az általunk használt lokális sűrűségfüggvény közelítés nem ad számot a vezetési elektronoknak a szennyeződés spinjén történő dinamikus szórásáról. Viszont a re-



6.4. ábra. Négyszögek: $K(d)d^2$ a 6.1 ábra alapján, folytonos vonal: $-2.8 \sin(2\pi d/5.0 + \pi/2)$.

alisztikus felületre ill. a SOC-felületre vonatkozó számítások összehasonlítása (l. 6.1 ábrán) azt mutatja, hogy a jelenség kvantitatív vizsgálatához szükség van egy anyagspecifikus first principles modelre, tehát feltehetőleg csak a két módszer kombinálása vezethet kielégítő eredményre.

6.2. A MAE oszcilláló viselkedése vékonyrétegekben

Szunyogh L., Újfalussy B., Blaas C., Pustogowa U., Sommers C., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **56**, 14036–14044 (1997)

Az előző alfejezet eredményei alapján felmerül az a kérdés, hogy hasonló oszcillációk a vékonyrétegek mágneses anizotrópia energiájában is megfigyelhetőek-e. Már korábbi eredményeinkben is tapasztaltuk a MAE kis amplitúdójú oszcillációit a vékonyréteg vastagsága függvényében ill. a sávénergia anizotrópia rétegfelbontásában (l. pl. a 4.11 és 5.4 ábrákon), melyek eredete valószínűleg a Friedel-oszcillációkra vezethető vissza. A mágneses kicserélődési határréteg csatolás mintájára két, Cu(001) mátrixba ágyazott Co monoréteg példáján tanulmányoztuk a MAE oszcillációit. Legyen a Co monorétegek közötti Cu (spacer) atomi rétegek száma m . Nyilvánvaló, hogy

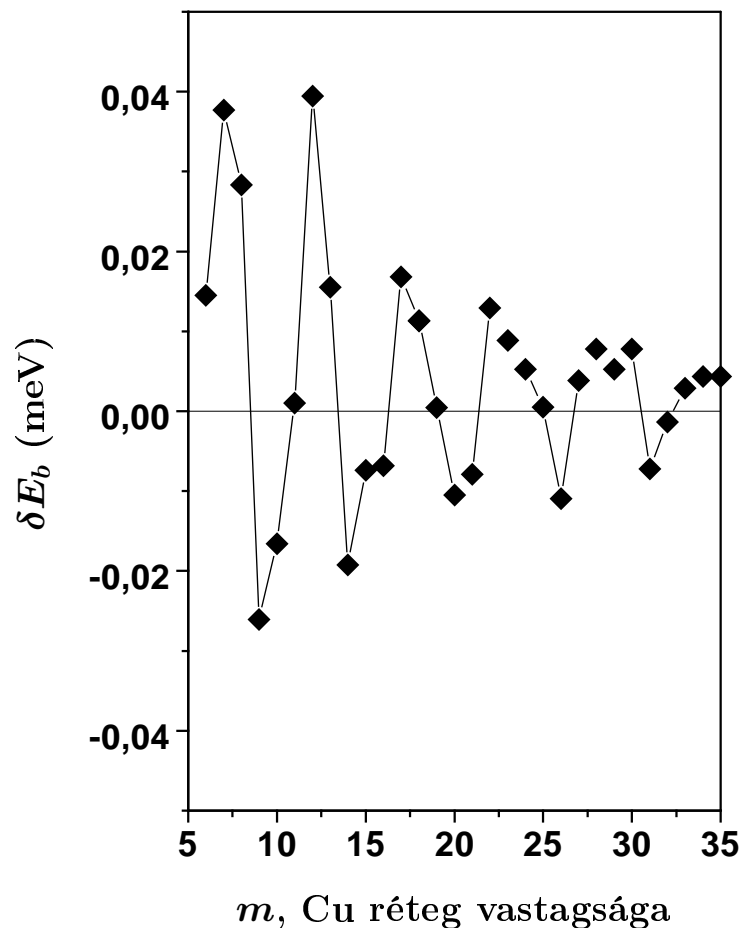
m növelésével a két Co réteg közötti kölcsönhatás lecsökken és határesetben a sávenergia anizotrópia a Co monoréteg járulékának a kétszerese,

$$\Delta E_b(m \rightarrow \infty) = 2 \Delta E_b(\text{Cu}/\text{Co}_1/\text{Cu}) \simeq 1.05 \text{ meV} .$$

Mi $\Delta E_b(m)$ relatív változását vizsgáljuk ehhez az értékhez képest:

$$\delta E_b(m) \equiv \Delta E_b(m) - \Delta E_b(\infty) ,$$

amit m függvényében a 6.5 ábra mutat. Az oszcilláló viselkedés jól kivehető, de valószínűleg több periódus szuperpozíciójáról van szó.

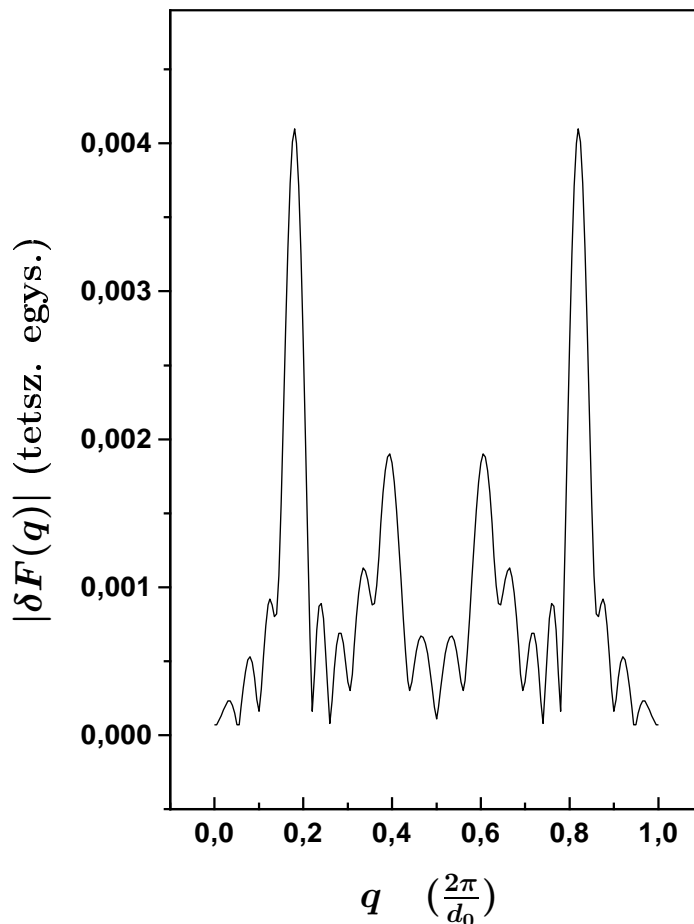


6.5. ábra. Relatív sávenergia anizotrópia, $\delta E_b(m) \equiv \Delta E_b(m) - \Delta E_b(\infty)$, Cu(001)/Co₁/Cu_m/Co₁/Cu vékonyrétegekben.

Ennek vizsgálatára célszerű képezni $\delta E_b(m)$ diszkrét Fourier transzformáltját,

$$\delta F(q) = \frac{1}{M-m_0} \sum_{m=m_0+1}^M e^{iqmd_0} \omega(m) \delta E_b(m) , \quad (6.7)$$

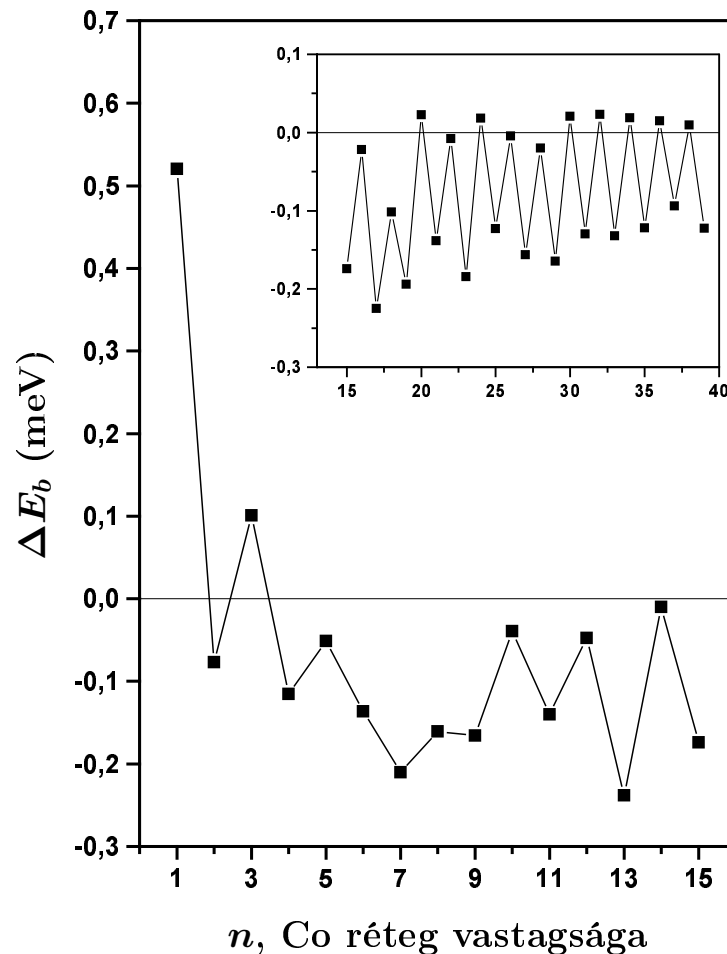
ahol az aszimptotikus tartományon kívül eső, m_0 -nál kisebb Cu rétegvastagságú mintákat kihagytuk az összegzésből és a lecsengésre vonatkozó $1/m^2$ -es elvárásainknak megfelelően az $\omega(m) = m^2$ prefaktorral besoroztuk az összeg tagjait. Triviális, hogy $\delta F(q)$ periódikus függvény $2\pi/d_0$ periódussal, ahol d_0 az atomi rétegek távolsága. Azonkívül, amennyiben $\omega(m) \cdot \delta E_b(m)$ valamely valós periódikus függvényt tartalmaz q_0 periódussal, akkor a $\delta F(q)$ függvényben q_0 és $2\pi/d_0 - q_0$ helyeken szimmetrikus csúcsokat kell látnunk. Természetesen az analízis annál megbízhatóbb, minél magasabb M -ig tudunk elmenni a fenti összegzésben.



6.6. ábra. A $\delta E_b(n)$ (6.5 ábra) diszkrét Fourier transzformáltja.

A 6.6 ábrán $\delta F(q)$ abszolút értékét ábrázoltam $m_0=10$ és $M=35$ paraméterek mellett. Az ábrán két karakterisztikus csúcsot lehet látni: $q_1 = 0.18 \cdot 2\pi/d_0$ és $q_2 = 0.40 \cdot 2\pi/d_0$ értékeknél. Ezek 5.56 ill. 2.5 atomi réteg hullámhosszú oszcillációknak felelnek meg, ami a Fourier-transzformáció adott pontossága mellett kiváló egyezés a Co/Cu/Co rendszer kicserélődési határréteg csatolásánál kapott elméleti és kísérleti értékekkel (Weber és mtsi. 1995; Bruno, Chappert 1991; Újfalussy és mtsi. 1998). *A fenti számítás az iro-*

dalomban elsőként bizonyította, hogy a határréteg csatolás a vékonyrétegek mágneses anizotrópiájában is kimutatható és ugyanazon elmélet keretén belül tárgyalható, mint az oszcilláló kicserélődési határréteg csatolás.



6.7. ábra. Sávenergia anizotrópia, ΔE_b , a $\text{Cu}(001)/\text{Co}_n/\text{Cu}$ vékonyrétegekben az n rétegvastagság függvényében. A belső ábra a görbe folytatását mutatja $15 \leq n \leq 39$ esetre.

A mágneses vékonyréteg vastagságának függvényében is karakterisztikus oszcillációk figyelhetők meg. Ezt a $\text{Cu}(001)/\text{Co}_n/\text{Cu}$ szendvics rendszeren tanulmányoztuk. Amint az a 6.7 ábrán látható, kb. $n > 15$ esetén ΔE_b lényegében csillapítatlan amplitúdóval, két atomi réteg periodicitással oszcillál. Meglepő, hogy igen nagy rétegvastagságokra sem állapítható meg egyértelműen ΔE_b határértéke, mivel páros atomi rétegszámra zérushoz közeli, páratlan atomi rétegszámra pedig $-0.1 - -0.15$ meV közötti értékeket kaptunk. ΔE_b atomi rétegfelbontásából kiderül, hogy a belső atomi rétegek ($3 \leq p \leq n-3$) járuléka szinte szabályos, két atomi réteges periodicitást mutat, tehát valószínűleg a mágneses film saját, a felülettől független tulajdonságáról van

szó. A (6.7) egyenlethez hasonló Fourier-analízis is pontosan $q=\pi/d_0$ hullám-számnál mutatott kiugró maximumot. Meggyőző módon, a Cu(001)/Co_n és a Cu(001)/Au₁/Co_n/Au₁/Cu(001) rendszerekre is ugyanilyen aszimptotikus viselkedést (két atomi réteges oszcillációt) találtunk.

Aristov (1997) nemrégiben a mágneses szuszceptibilitás analitikus vizsgálatából kimutatta, hogy mágneses rétegekben az RKKY kölcsönhatásnak a felületre merőleges irányban létezik egy pontosan két atomi réteges periódusú modulációja. A MAE két atomi réteg periódusú oszcillációja a Cu(001)/Co_n/Cu rendszerben feltehetőleg hasonló módon értelmezhető. Érdekes viszont, hogy a vastagabb Fe ill. Ni filmekben nem tapasztaltuk a MAE két monoréteges oszcillációit. A 4.11 és 5.3 ábrákon inkább ΔE_b^p Friedel-oszcillációi ismerhetők fel. Valószínű, hogy a két monoréteges RKKY-típusú ill. a határfelület jelenléte miatt fellépő Friedel-oszcillációk együttesen vannak jelen, de amplitúdójuk a különböző vékonyréteg rendszerekben változó lehet.

6.3. Ferromágnesek Bloch-falának elektron elmélete

Schwitalla J., Györfly B.L., Szunyogh L., *Phys. Rev. B* közlésre elküldve (2000)

A különféle nano- és mezoszkópikus mágneses rendszerek tanulmányozása technológiai és elméleti szempontból fontos kutatási terület. Ebbe a témakörbe tartozik a ferromágneses anyagok különböző mágneses irányítottságú doménjeinek vizsgálata. A kutatás itt valójában több méretskálát ölel fel: a doménfalak vastagsága kb. 10-1000 nm, az egyes domének mérete kb. 1-1000 μm , míg a domének által alkotott mágneses textúrák már a mm tartományban lehetnek. Már a doménfalak vastagsága is 1-3 nagyságrenddel nagyobb az atomi méretskálánál, ezért először a doménfal vizsgálatát tűztük ki célul magunk elé a relativisztikus elektron elmélet alapján. A több domént tartalmazó magasabb méretskálán feltehetőleg a first principles eredményekre alapozó mikromagnetikai számítási módszerek alkalmazására lesz szükség.

A fenomenológikus mikromagnetika (Brown 1963) számítási módszerei a szabad energia Ginzburg-Landau sorfejtéséből indulnak ki,

$$\mathcal{F}[\vec{M}] \approx \int d\vec{r} \left\{ \mathcal{A} \sum_{i=1}^3 |\vec{\nabla} M_i|^2 + \sum_{i,j=1}^3 \mathcal{B}_{ij} M_i M_j + \sum_{ijkl} \mathcal{B}_{ijkl} M_i M_j M_k M_l + \dots \right\}, \quad (6.8)$$

ahol i, j, k és l Descartes-koordinátákat jelölnek, $\vec{M}(\vec{r}, t)$ a mágnesezettséget leíró vektortér, az \mathcal{A} , \mathcal{B}_{ij} és \mathcal{B}_{ijkl} együtthatók pedig a hőmérséklettől és nyomástól függő anyagspecifikus paraméterek. Könnyen belátható, hogy a (6.8) egyenlet jobb oldalán szereplő első tag a kicserélődési kölcsönhatást, a további tagok pedig a másod- és negyedrendű mágneses anizotrópiát írják le. Az egyensúlyi mágnesezettséget a (6.8) egyenlet minimalizálásából nyerjük. A doménfal fenomenológikus elméletében feltételezzük, hogy a mágnesezettség nagysága térben állandó, így célszerű áttérni az $\vec{M}(\vec{r}, t)$ vektortér gömbi koordinátákkal való leírására,

$$M_x = M_0 \cos \phi \sin \theta, \quad M_y = M_0 \sin \phi \sin \theta, \quad M_z = M_0 \cos \theta \quad (6.9)$$

ahol M_0 a szaturációs mágnesezettség. Köbös rendszerben ($\mathcal{B}_{ij}=0$ és $\mathcal{B}_{ijkl} = \mathcal{B} \delta_{ij} \delta_{kl}$) a (6.8) egyenlet az

$$\mathcal{F}(\theta, \phi) = \int \left\{ \alpha \left((\vec{\nabla} \theta(\vec{r}))^2 + \sin^2 \theta(\vec{r}) (\vec{\nabla} \phi(\vec{r}))^2 \right) + \beta \left(\sin^2 \theta(\vec{r}) \cos^2 \theta(\vec{r}) + \sin^4 \theta(\vec{r}) \sin^2 \phi(\vec{r}) \cos^2 \phi(\vec{r}) \right) \right\} d\vec{r} \quad (6.10)$$

alakra hozható. Itt bevezettük az $\alpha = \mathcal{A}M_0^2$ ill. $\beta = \mathcal{B}M_0^4$ konstansokat. A továbbiakban fixáljuk a doménfal síkjára merőlegest irányt a z tengely irányának. *Bloch-falról* akkor beszélünk, ha a mágnesezettség a fal síkjában fordul, azaz $\theta = \frac{\pi}{2}$. Így a Bloch-falat egyértelműen leírhatjuk egy $\phi(z)$ függvénnyel és a (6.10) egyenlet a

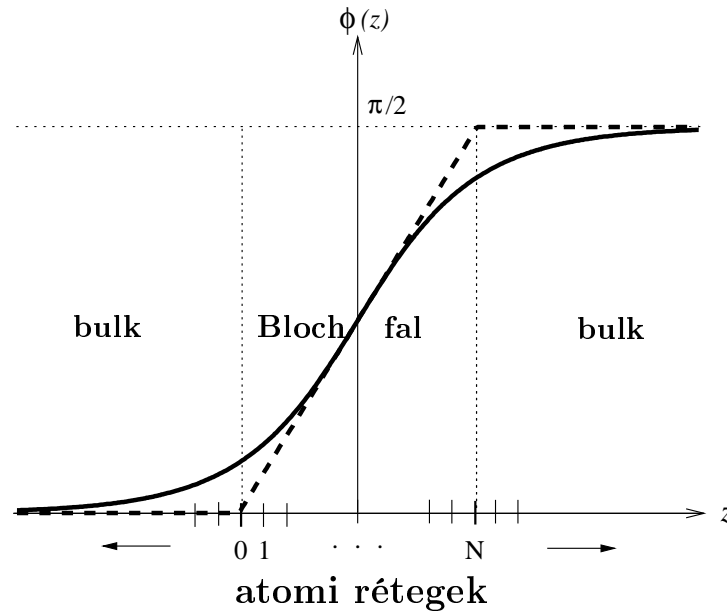
$$\mathcal{F}(\phi) = \int \left(\alpha (\vec{\nabla} \phi(\vec{r}))^2 + \beta \sin^2 \phi(\vec{r}) \cos^2 \phi(\vec{r}) \right) d\vec{r} \quad (6.11)$$

alakra redukálódik. A rácshiba nélküli köbös rendszerben a (001) irányban 90° -os Bloch-fal képződik. Belátható, hogy a $\phi(-\infty)=0$ és $\phi(\infty)=\frac{\pi}{2}$ határfeltételek mellett a

$$\phi(z) = \arctan e^{\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} z} \quad (6.12)$$

függvény (l. a 6.8 ábrát) minimalizálja a (6.11) funkcionált. A Bloch-fal szélességét a $z=0$ -ban húzott érintő egyenes $\phi=0$ -nál és $\phi=\frac{\pi}{2}$ -nél vett z metszeteinek távolságaként definiáljuk, melyre $\ell_{BF} = \pi \sqrt{\alpha/\beta}$ adódik. A spin-hullám spektrum alacsony frekvenciás tartományának vizsgálatából kiderül, hogy az α és β paraméterek rendre a D spin-hullám stiffness konstanssal ill. a K negyedrendű anizotrópia paraméterrel arányosak,

$$D = \frac{2\alpha\mu_B a^3}{M_0}, \quad K = \frac{a^3}{2}\beta, \quad (6.13)$$



6.8. ábra. Folytonos vonal: szoliton megoldás, (6.12); szaggatott vonal: lineáris mágnesezettségi profil.

ahol μ_B a Bohr-magneton és a a köbös rácsállandó.

A first principles számítások szemszögéből két megjegyzést kell tennünk: (i) az aktuális számításokban csak egy véges Bloch-fal szélességet (L) tudunk kezelni, attól balra és jobbra ideális bulkot feltételezünk, rendre $\phi=0$ ill. $\phi=\frac{\pi}{2}$ paraméterekkel. (ii) ugyan módszerünk megfelelő továbbfejlesztésével a mágnesezettség irányára vonatkozóan is önkonzisztens számításokat tudunk végezni, jelenleg *egy bizonyos* $\phi_0(z/L)$ profilt fixálunk le. Ekkor a szabad-energia egységnyi felületre eső sűrűsége felírható mint

$$f(L) = \alpha I_1 \frac{1}{L} + \beta I_2 L, \quad (6.14)$$

ahol

$$I_1 = \int \phi_0'(\xi)^2 d\xi \quad \text{s} \quad I_2 = \int \sin^2 \phi_0(\xi) \cos^2 \phi_0(\xi) d\xi. \quad (6.15)$$

A (6.14) egyenlet L szerinti minimalizálásából

$$L_{\min} \equiv \ell_{BF} = \sqrt{\frac{\alpha I_1}{\beta I_2}}, \quad (6.16)$$

adódik. Megnyugtató tény, hogy az egzakt szoliton megoldásra ($I_1/I_2 \simeq \pi^2$) a fenti képlet visszaadja a korábban definiált Bloch-fal szélességet.

A fenti megfontolások a Bloch-fal szélességének first principles meghatározásához a következő stratégiát sugallják:

- 1) Válassz egy alkalmas $\phi_0(\frac{z}{L})$ profilt,
- 2) Adott L -re számítsd ki az $\mathcal{F}(L)$ szabad energiát (termodinamikai potenciált),
- 3) Keresd meg $\mathcal{F}(L)$ minimumát!

A legegyszerűbb választás a lineáris profil (l. a 6.8 ábrán),

$$\phi_0(\xi) = \begin{cases} 0 & \xi < 0 \\ \xi\pi/2 & 0 \leq \xi \leq 1 \\ \pi/2 & \xi \geq 1 \end{cases}, \quad (6.17)$$

melyre $I_1 = \frac{\pi^2}{4}$, $I_2 = \frac{1}{8}$ és a (6.16) egyenlet alapján $\ell_{BF} = \sqrt{2}\pi\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}}$ adódik. Ez az érték $\sqrt{2}$ -szerese az egzakt szoliton megoldásra kapott Bloch-fal szélességnek.

Számításainkat a bcc szerkezetű vas (001) irányú 90° -os Bloch-falára végeztük. A számolt energiaértékek egy kétdimenziós elemi cella felületére (a^2) normáltak, így a fenomenológikus modellel való könnyebb összehasonlítás érdekében célszerű bevezetni az

$$\hat{\alpha} \equiv \frac{\alpha\pi^2 a}{4} = \frac{D M_0 \pi^2}{8 \mu_B a^2} \quad \text{és} \quad \hat{\beta} \equiv \frac{\beta a^3}{8} = \frac{K}{4} \quad (6.18)$$

paramétereket, melyekkel az a^2 felületre eső szabadenergia a

$$\mathcal{F}(L) \equiv f(L) a^2 = \hat{\alpha} \frac{1}{L} + \hat{\beta} L \quad (6.19)$$

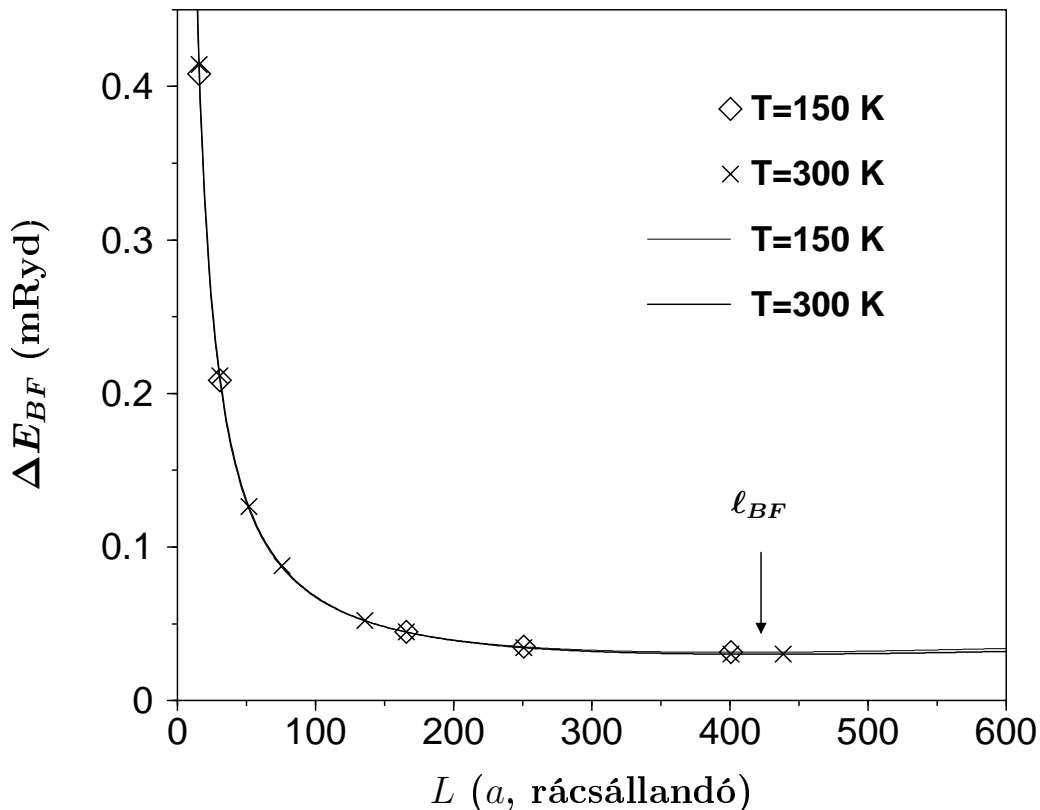
alakban adható meg, ahol most L -et a egységekben mérjük, ami az atomi rétegszám kétszeresét jelenti. Mivel a vas Bloch-falának szélessége igen nagy (több száz atomi réteg), a mágnesezettség irányának lassú változása miatt a töltések ill. mágneses momentumok igen kis változása várható a Bloch-falon keresztül. Ezért az ún. *frozen potential* közelítést alkalmaztuk: a bulk Fe potenciálját és effektív terét használtuk az összes atomi rétegben és csupán a mágnesezettség irányát változtattuk az előírt $\phi_0(\frac{z}{L})$ függvény szerint (l. a (6.17) egyenletet).

A (2.38)-(2.39) egyenletekhez hasonlóan, a Bloch-fal és a ferromágneses állapot közötti nagykanonikus potenciál változást számoltuk és azonosítottuk a Bloch-fal képződési energiájával (ΔE_{BF}). Tekintettel arra, hogy a Bloch-falban a mágnesezettség iránya folytonosan változik, a (2.27)-es egyenlettel kapcsolatos eljárás nem alkalmazható a Brillouin-zóna integrálásban. A 90° -os Bloch-fal speciális szimmetriája (együttes inverzió és 90° -os forgatás) miatt a BZ-integrálás mégis a felére csökkenthető. A bcc vas rácsállandójának az elméleti 2.753 \AA értéket vettük (Korhonen és mtsi. 2000), melyre $2.02 \mu_B$ tömbi mágneses momentumot kaptunk. Megjegyzésül, a kísérleti 2.866 \AA rácsállandóval $2.18 \mu_B$ mágneses momentum adódik.

A fenomenológikus modelből is könnyen látható, hogy az egy atomi rétegre normált Bloch-fal képződési energia a köbös anizotrópia energia, azaz $0.1 \mu\text{Ryd}$, nagyságrendjébe esik. Ennek számítása, főleg a Brillouin-zóna integrálás miatt, igen nehéz feladat. Ezért a (2.39) energia szerinti integrálást a Fermi-eloszlással 'simítottuk', majd azt a Fermi-függvény pólusait ($z_k = \epsilon_F + i(2k+1)\pi k_B T$, $k \in \mathbb{Z}$) figyelembe véve kontúrintegrállá alakítjuk. Belátható, hogy $\Delta n(z)$ elég gyorsan konvergál zérushoz, ha a felső komplex félsíkon végtelenhez tartunk, így az integrálból elegendő csupán néhány, tipikusan 20-40 Matsubara pólus járulékat megtartani. A módszer nagy előnye, hogy a Brillouin-zóna integrálás jól kontrollálható, mivel a konvergenciához szükséges k_{\parallel} -pontok száma z imaginárius részének növelésével drasztikusan csökken. Fontos megjegyezni, hogy ez az eljárás nem jelenti a nagykanonikus potenciál véges hőmérsékletű számítását, mert az entrópia tagot nem vettük figyelembe. Mi $T=300 \text{ K}$ és 150 K paraméterekkel számoltunk és – a Sommerfeld-sorfejtésnek megfelelően – kvadratikusan interpoláltunk $T=0$ -ra.

Számítási eredményeinket a 6.9 ábra mutatja. A Bloch-fal vastagságának növelésével ΔE_{BF} először meredeken csökken, majd egy igen lapos minimummal rendelkező görbébe megy át. A minimum helyének közvetlen megkeresése nehéz numerikus feladat. Ezért inkább a számolt ΔE_{BF} adatokra a (6.19) függvényt fitteltük a legkisebb négyzetek módszerével. Az ábráról is nyilvánvaló, hogy a fittelt görbék szinte tökéletesen illeszkednek a számított pontokra. A numerikus eljárás megbízhatóságát bizonyítja, hogy már az első három-négy számított pont elegendő volt az $\hat{\alpha}$ és $\hat{\beta}$ paraméterek igen pontos meghatározásához, és a további pontok figyelembe vétele nem növelte a fittelt paraméterek szórását. A $T=300 \text{ K}$ ill. $T=150 \text{ K}$ hőmérsékletekre fittelt paramétereket a 6.3 táblázat foglalja össze. Innen már pontosan kiszámolható az adott görbék minimuma ($\sqrt{\hat{\alpha}/\hat{\beta}}$): $424 a$ ($T=300 \text{ K}$) és $401 a$ ($T=150 \text{ K}$). Mivel $T=300 \text{ K}$ esetben $440 a$ (880 atomi réteg), tehát a minimum fölötti vastagságra is számoltunk, *a first principles számítások szintjén megvalósítottuk a nano- ill. mezoszkópikus tartományok közötti méretskála ugrást*. A 6.9 ábra görbéi a Bloch-fal fenomenológikus elméletének első, alapelveken nyugvó igazolásának tekinthetők. (Kéziratunk elküldése után értesültem arról, hogy V.P. Antropov és mtsi. (Ames Lab., USA) is végeztek hasonló tanulmányokat a ferromágneses CoPt Bloch-falára.)

A $T=0$ -ra interpolált $\hat{\alpha}$ és $\hat{\beta}$ paraméterekből a Bloch-fal vastagságára $394 a$, azaz 788 atomi réteg adódott. Mivel ez $\sqrt{2}$ -szöröse az azonos paraméterekkel jellemzett szoliton megoldásnak, a bcc Fe 90° Bloch-falának vastagságára



6.9. ábra. A bcc Fe 90°-os Bloch-falának energiája az L szélesség függvényében. A négyszögek ill. keresztek az energiaintegrálásban alkalmazott Fermi-eloszlás különböző paramétereire (T=150 K ill. T=300 K) tartoznak. A folytonos vonalak pedig az (6.19) egyenlet alapján fittelt függvények a 6.3 táblázatban megadott paraméterekkel. A függőleges nyíl a numerikusan kapott energiaminimum helyét jelzi T=300 K esetben.

az 560 atomi réteg elméleti becslést kapjuk. Ez az érték legalább kétszerese a kísérletileg becsült értéknek (Lilley 1950). Az eltérés elsősorban arra vezethető vissza, hogy az LSDA számítások jelentősen alábecsülik a köbös anizotrópia állandót.

A (6.18) képletek alapján a D spin-hullám stiffness állandót és a K anizotrópia állandót is ki tudjuk számítani: $D=262 \text{ meV}\cdot\text{Å}^2$ és $K=0.16 \mu\text{Ryd}$. A stiffness állandó kb. 10-15 %-kal alacsonyabb a kísérletileg mért értékekénél, melyek $300 \text{ meV}\cdot\text{Å}^2$ körül szórnak (Stringfellow 1968, Collins és mtsi. 1969). Elméleti számítások is hasonló értékeket eredményeztek (Lichtenstein és mtsi. 1987; Köhler és mtsi. 1991). Ezek a számítások viszont a spin-pálya kölcsönhatás nélküli, skalár-relativisztikus módszerrel történtek. Ugyanebben a közelítésben, a 'spin-flip technika' és ugyancsak az SKKR-kód felhasználásával Udvardi László közvetlenül ki tudta számolni a stiffness

T [K]	$\hat{\alpha}$ [mRyd]	$\hat{\beta}$ [μ Ryd]
300	6.41	0.0356
150	6.32	0.0392
0	6.29	0.0404

6.1. táblázat. A 6.9 ábra adatai alapján az (6.19) egyenlet legkisebb négyzetek módszerével illesztett paramétereit $T = 300$ K és 150 értékek mellett. Az utolsó sorban a kvadratikusan $T=0$ -ra interpolált értékek találhatók.

állandót, melyre $300 \text{ meV} \cdot \text{\AA}^2$ adódott. Ezen érték és a Bloch-fal energiájára való illesztésből kapott érték közötti különbségből arra következtettünk, hogy a spin-pálya csatolás kis mértékben befolyásolja (gyengíti) a D állandóval parametrizált spin-spin kölcsönhatást.

A fittelt és $T=0$ -ra interpolált $\hat{\beta}$ értékből $K=0.16 \mu\text{Ryd}$ anizotrópia konstans számítható. A MAE közvetlen számításából $K=0.158 \mu\text{Ryd}$ anizotrópia állandót kaptunk. A két érték kiváló egyezése megnyugtatóan bizonyítja módszerünk belső konzisztenciáját ill. azt, hogy igen nagy kiterjedésű (mezoszkópikus) rendszerekre azonos numerikus pontossággal használható, mint kisebb (nano-) méretű problémákra. Más LSDA számítások is közel hasonló eredményre vezettek (Razee és mtsi. 1997). Mint fentebb említettem, az LSDA számítások nyert anizotrópia állandó kb. 2-3-szor kisebb a kísérletileg mért értéknél ($\simeq 0.31 \mu\text{Ryd}$). A lokális sűrűség funkcionál közelítésből hiányzó pálya-pálya korrelációt a Brooks-féle pályapolarizációs taggal figyelembe véve (Brooks 1985) jó egyezés kapható a kísérleti értékkel (Trygg és mtsi. 1995, Lazarovits 2000).

A fenti eredmények a Bloch-fal fenomenológikus medeljének meggyőző bizonyítékát adták a mikroszkópikus elektronelmélet oldaláról. Módszerünk önkonzisztens vátozatával azonban sok olyan információhoz lehet jutni, melyek messze túllépik a fenomenológikus model határait. Meghatározható az elektronszerkezet és a mágneses momentumok változása a Bloch-falon keresztül valamint ezzel szimultán módon a mágneses orientáció profilja, mely különbözhet a (6.12) megoldástól. Különösen fontos a Bloch-fal szerkezetének vizsgálata valamilyen rácsdeformáció vagy szennyeződés jelenlétében. Ezek ugyanis nagymértékben befolyásolják a Bloch-falak mozgását, mely végsősoron a mágneszettségi (hiszterézis) görbe alakját meghatározza. Egy másik, technológiai szempontból fontos jelenség, melyre a Bloch-fal szerkezete hatással van, a mágneses (spin-függő) transzport. Ennek tanulmányozását is tervezem a jövőben.

7. fejezet

Összefoglalás

Értekezésemben a vékonyrétegek mágneses anizotrópiájára vonatkozó elméleti vizsgálataimat tárgyaltam. A témakör kutatását alapvetően a modern számítógépes anyagtudomány eszköztárával céloztam meg, ami azt jelenti, hogy a relativisztikus sűrűségfüggő elméletre épülő (first principles), nagy számítástechnikai igényű módszert alkalmaztam. Ez lehetővé tette, hogy különböző vékonyréteg rendszerekre szisztematikus, anyagspecifikus vizsgálatokat végezzek. Mivel a kísérleti szituációt leíró, realiztikus rendszerekre próbáltam meg számításaimat elvégezni, ezek a vizsgálatok elsősorban a valóságban megfigyelt jelenségek pontos, mikroszkópikus megértését volt hivatott elősegíteni. Másrészt viszont a számítógépes modellezés alkalmas nyújtott kísérletileg (még) nem vizsgált rendszerek vagy jelenségek tanulmányozására, melyek érdekes és fontos predikciókat jelenthetnek a kísérletek ill. technológiai alkalmazások számára.

A kutatás kezdeti stádiumában tehát a megfelelő, hatékony számítási módszer ill. komputerprogram kidolgozása volt a feladat. Redukált szimmetriájú rendszerek kezelése céljából bevezettük az árnyékolt Korringa-Kohn-Rostoker (SKKR) eljárást és kidolgoztunk egy programcsomagot, mely a két-dimenziós transláció invariáns rendszer 'fél-végtelen' geometriáját egzaktul képes figyelembe venni. A programot kiterjesztettük a relativisztikus spin-polarizált esetre és ezáltal a vékonyrétegek mágneses anizotrópiáját megbízható precíziással tudtuk számolni. Rendezetlen ötvözetek ill. az interdiffúzió vizsgálata céljából a módszert kombináltuk az inhomogén koherens-potenciál közelítéssel (CPA).

Mivel a számítási idő a rétegvastagsággal lineárisan skálázódik, az SKKR módszer egyik legfontosabb újonsága az volt, hogy a korábbiakban alkalmazott módszerekkel összehasonlítva lényegesen nagyobb rétegvastagságokra lehetett first principles számításokat végezni, így először vált elérhetővé a

mágnesszettség filmre merőleges ill. párhuzamos iránya közötti *reorientációs átmenet* tanulmányozása szinte tetszőleges rétegvastagság (n) esetén. Mivel a kritikus reorientációs rétegvastagság (n_c) jól mérhető mennyiség, annak a számított értékkel való összehasonlítása módszerünk elsődleges tesztje volt. Az Au(001)/Fe rendszerre kapott $n_c \simeq 3$, a Cu(001)/Ni rendszer $n_c \simeq 7$ inverz és $n_c \simeq 37$ normál reorientációs vastagsága a kísérletekkel való kiváló egyezést jelentett.

Míg a mágneses dipól-dipól energia a rétegvastagsággal lineárisan növekvő, negatív anizotrópia járulékot eredményez, melynek számítása viszonylag egyszerű feladat, a *spin-pálya kölcsönhatásból eredő sávenergia járulék* (ΔE_b), mely pozitív és negatív értéket is felvehet, igen sok tényező együttes függvénye. Ezen hatások vizsgálata volt az értekezés vezérfonala.

Azon meggondolás alapján, hogy a vékonyrétegek anizotrópia energiája a *felület szimmetria törő hatásának* következménye, a kísérletek fenomenológikus interpretációjában egy, a rétegvastagságtól független felületi mágneses anizotrópia járulékot tételeznek föl. Számításaink nem támasztották alá ezt az elképzelést! Még az Au(001)/Fe filmek esetében is, ahol mind a felületi, mind a határfelületi anizotrópia lényegében egy-egy atomi rétegre koncentráldik, ΔE_b észrevehetően változik kb. $n=4$ rétegvastagságig. ΔE_b erős függése a rétegvastagságtól leginkább a szabad felülettel rendelkező Cu(001)/Fe és Cu(001)/Ni vékonyrétegekre jellemző, ahol ΔE_b atomi réteg felbontása megmutatta, hogy *a felület hatása több atomi rétegre terjed ki*. A nem-mágneses szubsztráttal közös *határfelületnél* ΔE_b már *lokalizáltabb jelleget mutat*: a rézbe ágyazott szélesebb ($n \geq 5$) ferromágneses vas réteg sávenergia anizotrópiája kizárólag határfelületi atomi rétegek járuléka és a közbenső atomi rétegek lényegében zérus járulékot adtak. A Cu(001)/Ni filmeknél viszont csak $n > 9$ esetben lehetett elkülöníteni egy kb. 4-4 atomi réteg vastagságú határfelületi ill. felületi tartományt.

A *nem-mágneses szubsztráttal határos atomi réteg* a legtöbb esetben meghatározó szerepet játszik a vékonyrétegek mágneses anizotrópiájának alakításában. Az Au(001)/Fe és Cu(001)/Fe rendszer pozitív sávenergia anizotrópiájához ez a réteg lényegesebben nagyobb járulékot ad, mint a felületi réteg. A Cu(001)/Ni rendszerben pedig a Cu/Ni határfelület közeli tartomány mértékében jóval kisebb negatív anizotrópia járulékot ad mint a felületi tartomány. Ebből következően a mágneses vékonyrétegre helyezett ultravékony *nem-mágneses fedőréteg* általában a merőleges anizotrópia tendenciáját vonja maga után. A határrétegek elektronállapotai közötti hibridizáció ekla-

táns következménye az *anomális merőleges mágneses anizotrópia*, melyet az Au(111)/Co₁/Au_n és a Cu(001)/Fe_n/Cu_m ($n \leq 4$) rendszerek példáján az irodalomban az elsők között magyaráztunk first principles számítások alapján. A Cu(001)/Fe₆/Cu vékonyrétegen megmutattam, hogy a *szubsztrát spin-pálya kölcsönhatása* is jelentősen növelheti a merőleges mágneses anizotrópiát. Ugyanezen a rendszeren tanulmányoztam a *határrétegek közötti interdiffúziót*, mely viszont drasztikusan csökkenti a MAE-t.

A fenti hatások tanulmányozásában ill. értelmezésében nagy segítséget jelentett a mágneses anizotrópia perturbáció számításon alapuló elmélete, mely a *Fermi szint körüli elektronállapotok* finomszerkezetének modulációival magyarázza a MAE változásait. Különösen sikeres volt ez a szemléltetés az anomális merőleges mágneses anizotrópia jelenségénél. Tapasztalataink azonban azt mutatják, hogy a a MAE és a pályamomentum anizotrópia közötti egyszerű összefüggés csak korlátozott esetekben és többnyire csupán tendenciáját tekintve alkalmazható (l. az Au(001)/Fe film határfelületi rétege vagy Au(111)/Co₁/Au_n), de pl. az Au(001)/Fe film felületi rétegénél még az előjelre nézve sem találtunk egyezést.

Az antiferromágneses *Cu(001)/Fe* filmek vizsgálata az *atomi rétegek közötti mágneses (kicserélődési) csatolás* jelentőségét emeli ki. A kísérleti tényekkel konzisztens módon, a vas atomi rétegek közötti antiferromágneses csatolás drasztikusan növeli a MAE-t. A korábban tanulmányozott ferromágneses mintáktól eltérően itt a film belsejében lévő atomi rétegek is szignifikáns sávenergia anizotrópia járulékot adtak, amit a *lokális szimmetria* töréssel magyaráztunk. A Cu(001)/Fe_xCo_{1-x} homogén ötvözetű filmekben a reorientációs átmenet új mechanizmusára hívtuk fel a figyelmet, mely $n \geq 5$ rétegvastagságoknál lehet jellemző: a vas kobalttal való ötvözése *antiferromágneses-ferromágneses fázisátalakulást* indukál és a MAE ugrászerű csökkenését vonja maga után.

First principles számításokkal az irodalomban először igazoltuk, hogy a *Cu(001)/Ni rendszerben* észlelt *inverz reorientáció* oka a Ni atomi rétegek *tetragonális kontrakciója* miatt fellépő merőleges anizotrópia. Az antiferromágneses Cu(001)/Fe filmekhez hasonlóan itt is a belső atomi rétegek pozitív sávenergia anizotrópia járuléka okozza a MAE növekedését. Mivel módszerünkkel a felülettel párhuzamos (strain) relaxációt nem lehet kezelni, a vastagabb Ni filmek *normál reorientációját* több modelrendszer együttes vizsgálata ("építőköcka" model) alapján szimuláltuk. Az eljárás a mágneses anizotrópia járulékok térbeli csoportosíthatóságán alapult. A Co fedőréteg hatását

vizsgálva az elérhető kísérletekkel összeegyeztethető eredményekre jutottunk. Ezen felül viszont egy új elméleti predikciót is adtam arra vonatkozóan, hogy a normál reorientáció kritikus vastagságánál alig vastagabb Ni rétegre helyezett ultravékony Co fedőréteg ismételt inverz reorientációt okozhat.

Megmutattam, hogy a *nem-mágneses szubsztrát felületének közelében elhelyezett mágneses szennyeződés* is mágneses anizotrópiával rendelkezik. A felülettől mért d távolság szerinti aszimptotikus analízis arra az eredményre vezetett, hogy a szennyeződés MAE-ja d oszcilláló függvénye, melynek periódusát a szubsztrát Fermi felületének extrémális vektorai határozzák meg, amplitúdója pedig $1/d^2$ szerint csökken. A vékonyrétegek mágneses anizotrópia energiájában is kimutattunk hasonló *oszcilláló viselkedést*, melyet a Cu(001)/Co₁/Cu_m/Co₁/Cu rendszeren tanulmányoztam. Kiderült, hogy a kicserélődési határfelületi oszcillációk és a MAE oszcillációi egységes elméleti keretben tárgyalhatók, mivel mindkettő eredete a Friedel-oszcillációkra vezethető vissza. A Cu(001)/Co_n/Cu rendszerben egy tipikusan két monoréteg periódusú oszcillációt találtam a sávenergia anizotrópia n szerinti függésében, mely valószínűleg a réteges rendszerek RKKY kölcsönhatásában kimutatott, ugyancsak két monoréteg periódusú oszcillációval kapcsolatos.

Végezetül pedig a *ferromágneses anyagok Bloch-falának first principles elektron elméletét* írtam le és alkalmaztam a bcc Fe 90°-os Bloch-falára. A Bloch-fal energiája a fenomenológikus Ginzburg-Landau elmélet által jóslott módon változott a Bloch-fal vastagságának függvényében. A Bloch-fal energiájához fittelt spin-hullám stiffness konstans és köbös anizotrópia állandó kiváló egyezést mutatott a direkt számításokból nyert értékekkel. Ez a számítás többek között azt is bizonyította, hogy az SKKR módszer alkalmazható *mezoszkópikus mágneses rendszerek* vizsgálatára.

Köszönetnyilvánítás

Az értekezésemben foglalt tudományos munka nagy részében meghatározó szerepe volt annak a gyümölcsöző együttműködésnek, melyet Újfalussy Balázs kollégámmal együtt évek hosszú során át folytattunk. Ezért első helyen neki kell köszönetet mondanom.

Ugyanilyen meleg köszönet illeti Peter Weinberger professzort is, aki a kutatásnak megbízható háttérrel teremtett a Bécsi Műszaki Egyetemen és egy tehetséges, segítőkész kollektívát (Christoph Uiberacker, Jan Zabloudil, Claudia Blaas) nevelt ki.

Munkahelyem, a BME Fizikai Intézet Elméleti Fizika Tanszéke alkotó légköre nagymértékben hozzájárult kutatói munkám sikeréhez. Külön ki szeretném emelni Zawadowski Alfréd és Kertész János professzorok folyamatos támogatását, mellyel munkámat segítették és az Udvardi Lászlóval folytatott hasznos együttműködést.

Györffy Balázs professzor (Bristoli Egyetem) útmutató tanácsai, melyekkel új és érdekes kutatások folytatására ösztönzött, meghatározók voltak tudományos tevékenységem során.

Vernes Andrásnak a dolgozathoz fűzött észrevételeiért és értékes megjegyzéseikért mondok köszönetet.

Végül, de nem utolsósorban feleségemnek, Juditnak és egész családomnak tartozom hálával azért, hogy önzetlenül és teljes odaadással segítettek kutatói munkámat.

Irodalomjegyzék

- Allenspach R., Bischof A., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3385 (1992)
- Allenspach R., *J. Magn. Magn. Mater.* **129**, 160 (1994)
- Andersen O.K., Madsen J., Poulsen U.K., Jepsen O., Kollár J., *Physica B+C* **86-88**, 249 (1977)
- Andersen O.K., Jepsen O., *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2571 (1984)
- Aristov D.N., *Phys. Rev. B* **55**, 8064 (1997)
- Bader S.D., *Proc. IEEE* **78**, 909 (1990)
- Baudelet F., *Phys. Rev. B* **51**, 12563 (1995)
- Beauvillain P., Bobouh A., Chappert C., Ould-Mahfoud S., Renard J. P., Veillet P., Weller D., Corno J., *J. Appl. Phys.* **76**, 6078 (1994)
- Blachly M.A., Giordano N., *Phys. Rev. B* **49**, 6788 (1994)
- Brooks M.S.S., *Physica B* **130**, 6 (1985)
- Brown W.F., *Micromagnetics* (Wiley, New York, 1963)
- Bruno P., *Phys. Rev. B* **39**, 865 (1989)
- Bruno P., Chappert C., *Phys Rev. Lett.* **67**, 1602 (1991)
- Bruno E., Györffy B.L., *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 2109 (1993)
- Butler W.H., *Phys. Rev. B* **31**, 3260 (1985)
- Cheng S.F., Mansour A.N., Teter J.P., Hathaway K.B., Kabacoff L.T., *Phys. Rev. B* **47**, 206 (1993)
- Chen G., Giordano N., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 209 (1991)
- Collins M.F. *et al.*, *Phys. Rev.* **179**, 417 (1969)
- Curie P., *Ann. Chem. Phys.* **5**, 289 (1895)
- Daalderop G.H.O., Kelly P.J., Schuurmans M.F.H., *Phys. Rev. B* **42**, 7270 (1990); **44**, 12054 (1992a)
- Daalderop G.H.O., Kelly P.J., den Broeder F.J.A., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 682 (1992b)
- Detzel Th., Memmel N., *Phys. Rev. B* **49**, 5599 (1994)
- Detzel Th., Vonbank M., Donath M., Dose V., *J. Magn. Magn. Mater.* **147**,

L1 (1995)

- Dirac P.M., *Proc. Roy. Soc. Lond.* **117**, 610; **118**, 341 (1928)
- Dittschar A., Zharnikov M., Kuch W., Lin M.-T., Schneider C.M., Kirschner C.M., *Phys. Rev. B* **57**, R3209 (1998)
- DiTusa J.F., Lin K., Park M., Isaacson M.S., Parpia J.M., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 678 (1992)
- Dürr H.A., Guo G.Y., van der Laan G., Lee J., Lauhoff G., Bland J.A.C., *Science* **277**, 213 (1997)
- Ebert H., Freyer H., Vernes A., Guo G.Y., *Phys. Rev. B* **53**, 7721 (1996)
- Engel B.N., Wiedmann M.H., Van Leeuwen R.A., Falco C. M., *Phys. Rev. B* **48**, 9894 (1993)
- Farle M., Baberschke K., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 511 (1987)
- Farle M., Mirwald-Schulz B., Anisimov A.N., Platow W., Baberschke K., *Phys. Rev. B* **55**, 3708 (1997a)
- Farle M., Platow W., Anisimov A.N., Pouloupoulos P., Baberschke K., *Phys. Rev. B* **56**, 5100 (1997b)
- Farle M., Anisimov A.N., Platow W., Pouloupoulos P., Baberschke K., *J. Magn. Mater.* **198-199**, 325 (1999)
- Faulkner J.S., Stocks G.M., *Phys. Rev. B* **21**, 3222 (1980)
- Feder R. and Rosicky F., *Z. Phys. B – Condensed Matter* **52**, 52 (1983)
- Fu C.L., Freeman A.J., *Phys. Rev. B* **35**, 925 (1987)
- Gay J.G., Richter R., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2728 (1986); *J. Appl. Phys.* **61**, 3362 (1987)
- Giergiel J., Shen J., Woltersdorf J., Kirilyuk A., Kirschner J., *Phys. Rev. B* **52**, 8528 (1995)
- Godfrin E.M., *J.Phys.: Condens. Matter.* **3**, 7843 (1991)
- Gonis A., *Green functions for ordered and disordered systems*, Studies in Mathematical Physics Vol. 4. (eds. E. van Groesen and E.M. de Jager), (Elsevier, Amsterdam, 1992)
- Gradmann U., Korecki J., Waller G., *Appl. Phys. A* **39**, 101 (1986)
- Guo G.Y., Temmerman W.M., Ebert H., *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 8205 (1991); *J. Magn. Mater.* **104-107**, 1772 (1992)
- Györfly B.L., Stott M.J., *Band structure spectroscopy of metals and alloys*, ed. D.J. Fabian and L.M. Watson, Academic Press (1972)
- Györfly B.L., *Phys. Rev. B* **5**, 2382 (1972)
- Ising E., *Z. Phys.* **31** 253 (1925)

- Jenniches H., Shen J., Mohan Ch. V., Manoharan S.S., Barthel J., Ohresser P., Klaua M., Kirschner J., *Phys. Rev. B* **59**, 1196 (1999)
- Jungblut R., Johnson M.T., aan de Stegge J., Reinders A., den Broeder J.A., *J. Appl. Phys.* **75**, 6424 (1994)
- Halse M.R., *Philos. Trans. Roy. Soc. London A* **265**, 507 (1969)
- Heisenberg W., *Z. Phys.* **33**, 879 (1925); **40** 51 (1926)
- Heisenberg W., *Z. Phys.* **49**, 619 (1928)
- Hjortstam O., Baberschke K., Wills J.M., Johansson B., Eriksson O., *Phys. Rev. B* **55**, 15026 (1997)
- Hohenberg P., Kohn W., *Phys. Rev.* **136**, 864 (1964)
- Huang F., Kief M.T., Mankey G.J., Willis R.F., *Phys. Rev. B* **49**, 3962 (1994)
- Kambe K., *Z. Naturforschung.* **22a**, 322 (1967a); 422 (1967b); **23a**, 322 (1968)
- Kohn W., Rostoker N., *Phys. Rev.* **94**, 1111 (1954)
- Kohn W., Sham L.J., *Phys. Rev* **140**, 1133 (1965)
- Kollár J., Újfalussy B., *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 5391 (1992)
- Korhonen T., Settels A., Papanikolaou N., Zeller R., and Dederichs P.H., *Phys. Rev. B* **62**, 452 (2000)
- Korringa J., *Physica* **13**, 392 (1947)
- Köhler H., Sticht J., Kübler J., *Physica B* **172**, 79 (1991)
- Kraft T., Marcus P.M., Scheffler M., *Phys. Rev. B* **49**, 11511 (1994)
- Kuch W., Gilles J., Kang S.S., Imada S., Suga S., Kirschner J., *Phys. Rev. B* **62**, 3824 (2000)
- Kübler J., *Phys. Lett. A* **81**, 81 (1981)
- Lambrecht W.R.L., Andersen O.K., *Surf. Sci.* **178**, 256 (1986)
- Lang N.D., Kohn W., *Phys. Rev. B* **1**, 4555 (1970); **3**, 1215 (1971); **7**, 3541 (1973)
- Lazarovits B., *Diplomatézisek*, BME (2000)
- Lee J., Lauhoff G, Bland J.A.C., *Phys. Rev. B* **56**, R5728 (1997)
- Li Y., Baberschke K., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1208 (1992)
- Li D., Freitag M., Pearson J., Qiu Z.Q., Bader S.D., *J. Appl. Phys.* **76**, 6425 (1994)
- Lichtenstein A.I., Katsnelson M.I., Antropov V.P., Gubanov V.A., *J. Magn. Mater.* **67**, 65 (1987)
- Lighthill M.J., *Fourier Analysis and Generalised Functions*, (Cambridge University Press, 1962)

- Lilley B.A., *Phil. Mag.* **41**, 792 (1950)
- Lin C.J., Gorman L.G., Lee C.H., Farrow R.F.C., Marinero E.E., Do H.V., Notarys H., Chien C.J., *J. Magn. Magn. Mater.* **93**, 194 (1991)
- Liu C., Bader S.D., *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 2727 (1990)
- Lorenz R., Hafner J., *Phys. Rev. B* **54**, 15937 (1996)
- Mermin N.D., Wagner H., *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966)
- Müller S., Bayer P., Kinne A., Schmailzl P., Heinz K., *Surf. Sci.* **322**, 21 (1995)
- Müller S., Schulz B., Kostka G., Farle M., Heinz K., Baberschke K., *Surf. Sci.* **364**, 235 (1996)
- Neél L., *J. Phys. Radium* **15**, 225 (1954)
- Niu Q., Wang X., Kleinman L., Liu W.M., D. M. C. Nicholson D.M.C., Stocks G.M., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 207 (1999)
- O'Brien W.L., Tonner B.P., *Phys. Rev. B* **49**, 15370 (1994)
- O'Brien W.L., Droubay T., Tonner B.P., *Phys. Rev. B* **54**, 9297 (1996)
- Onsager L., *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
- Ould-Mahfoud S., Megy R., Bardou N., Bartenlian B., Beauvillain P., Chappert C., Corno J., Lecuyer B., Sczigel G., Veillet P., Weller D., *Mat. Res. Soc Symp. Proc.* **313**, 251 (1993)
- Pauli W., *Z. Phys.* **31**, 765 (1925)
- Pescia D., Stampanoni M., Bone G.L., Vateriaus A., Willis R.F., Meier F., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2126 (1987)
- Pinski F.J., Staunton J.B., Györffy B.L., Johnson D.D., Stocks G.M., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2096 (1986)
- Platow W., Bovensiepen U., Pouloupoulos P., Farle M., Baberschke K., Hammer L., Walter S., Müller S., Heinz K., *Phys. Rev. B* **59**, 12641 (1999)
- Razee S.S.A., Staunton J.B., Pinski F.J., *Phys. Rev. B* **56**, 8082 (1997)
- Rose M.E., *Relativistic Electron Theory*, Wiley, New York, 1961)
- Schrödinger E., *Ann. d. Phys.* **79**, 361, 489, 734 (1926); **80**, 437 (1926); **81**, 109 (1926)
- Schulz B., Baberschke K., *Phys. Rev. B* **50**, 13467 (1994)
- Soven P., *Phys. Rev. B* **2**, 4715 (1970)
- Stampanoni M., Vateriaus A., Aeschliman M., Meier F., Pescia D., *J. Appl. Phys.* **64**, 5321 (1988)
- Stocks G.M., Újfalussy B., Wang X., Nicholson D.M.C., Shelton W.A., Wang Y., Canning A., Györffy B.L., *Philos. Mag. B* **78**, 665 (1998)
- Stöhr J., König H., *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3748 (1995)

- Strange P., Staunton J., and Györfly B.L., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17**, 3355 (1984)
- Stringfellow M.W., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **1**, 950 (1968)
- Thomassen J., May F., Feldmann B., Wuttig M., Ibach H., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3831 (1992)
- Trygg J., Johansson B., Eriksson O., Wills J.M., *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 2871 (1995)
- Udvardi L., Király R., Szunyogh L., Denat F., Taylor M.B., Györfly B.L., Újfalussy B., Uiberacker C., *J. Magn. Magn. Mater.* **183**, 283-291 (1998)
- Udvardi L., Szunyogh L., Weinberger P., *kéziratban* (2000)
- Uiberacker C., *Ph.D. Thesis, TU-Wien* (1999)
- Újfalussy B. Lathiotakis N.N., Györfly B.L., Staunton J.B., *Phil. Mag. B* **78**, 577 (1998)
- Újsághy O., Zawadowski A., Györfly B.L., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2378 (1996)
- Újsághy O., Zawadowski A., *Phys. Rev. B* **57**, 11598 (1998a)
- Újsághy O., Zawadowski A., *Phys. Rev. B* **57**, 11609 (1998b)
- Unguris J., Celotta R.J., Pierce D.T., *J. Appl. Phys.* **75**, 6437 (1994)
- van Vleck J.H., *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1937)
- Wang C.S., Klein B.M., Krakauer H., *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1852 (1985)
- Wang D.S., Wu R., Freeman A.J., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 869 (1993); *Phys. Rev. B* **47**, 14932 (1993); *J. Magn. Magn Mater* **129**, 237 (1994)
- Weber W., Allenspach R., Bischof A., *Europhys. Lett.* **31**, 491 (1995)
- Weinberger P., *Electron Scattering Theory for Ordered and Disordered Matter*, (Clarendon, Oxford, 1990)
- Weinberger P., Drchal V., Szunyogh L., Fritscher J., Bennett B.I., *Phys. Rev. B* **49**, 13366 (1994)
- Weinert M., Watson R.E., Davenport J.W., *Phys. Rev. B* **32**, 2115 (1985)
- Weiss P., *J. de Phys.* **6**, 661 (1907)
- Wenzien B., Kudrnovský J., Drchal V., Šob M., *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 9893 (1989)
- Wiedmann M.H., Engel B.N., Van Leeuwen R.A., Mibu K., Shinjo T., Falco C. M., *Mat. Res. Soc Symp. Proc.* **313**, 531 (1993)
- Wilson K.G., Kogut J., *Phys. Rep. C* **12**, 75 (1974)
- Zharnikov M., Dittschar A., Kuch W., Meinel K., Schneider C.M., Kirschner J., *Thin Solid Films* **275**, 262 (1996)

Az értekezésben felhasznált saját publikációk

- Pustogowa U., Zabloudil J., Uiberacker C., Blaas C., Weinberger P., Szunyogh L., *Phys. Rev. B* **60**, 414-421 (1999)
- Schwitalla J., Györfly B.L., Szunyogh L., *Phys. Rev. B* közlésre elküldve (2000)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Kollár J., *Phys. Rev. B* **49**, 2721–2729 (1994):
- Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Kollár J., *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 3301–3306 (1994)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **51**, 9552–9559 (1995)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Sommers C., *Phys. Rev. B* **54**, 6430–6436 (1996)
- Szunyogh L., Györfly B.L., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3765–3768 (1997)
- Szunyogh L., Györfly B.L., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **475**, 457–462 (1997)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Bruno P., Weinberger P., *J. Magn. Magn. Mater.* **165**, 254–257 (1997)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **55**, 14392–14396 (1997)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Blaas C., Pustogowa U., Sommers C., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **56**, 14036–14044 (1997)
- Szunyogh L., Újfalussy B., Pustogowa U., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **57**, 8838–8841 (1998)
- Szunyogh L., Udvardi L., *Phil. Mag. B* **78**, 617–622 (1998)
- Uiberacker C., Szunyogh L., Újfalussy B., Weinberger P., Ernst A., Dederichs P.H., *Phil. Mag. B* **78**, 423–427 (1998)
- Uiberacker C., Zabloudil J., Weinberger P., Szunyogh L., Sommers C., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1289–1292 (1999)
- Uiberacker C., Zabloudil J., Weinberger P., Szunyogh L., Sommers C., *Phys. Rev. B* **62**, 5305–5308 (2000)
- Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., Kollár J., *NATO ASI Series E: Applied Sciences* **256**, 301–311 (1994)
- Újfalussy B., Szunyogh L., Bruno P., Weinberger P., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1805–1808 (1996)
- Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **54**, 9883–9889 (1996)
- Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Properties of Complex Inorganic Solids* (ed. A. Gonis *et al.*, Plenum Press, New York, 1997), pp. 181–185

- Weinberger P., Levy P.M., Banhart J., Szunyogh L., Újfalussy B., *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 7679-7690 (1996)
- Weinberger P., Turek I., Szunyogh L., *Int. J. Quant. Chem.* **63**, 165–188 (1997)
- Weinberger P., Szunyogh L., *Comp. Mat. Sci.* **17**, 414-437 (2000)
- Zabloudil J., Szunyogh L., Pustogowa U., Uiberacker C., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **58**, 6316–6320 (1998)
- Zabloudil J., Uiberacker C., Pustogowa U., Weinberger P., Szunyogh L., *Phil. Mag. B* **78**, 597-602 (1998)
- Zeller R., Dederichs P.H., Újfalussy B., Szunyogh L., Weinberger P., *Phys. Rev. B* **52**, 8807–8812 (1995)