

Zárójelentés
Mágneses nanostruktúrák elméleti vizsgálata
OTKA PD83353
Időtartam: 2011.04.01-2014.06.30. (39 hónap)
Vezető kutató: Palotás Krisztián (FTE: 2,67)

39-hónapos időtartamú posztdoktori pályázatunkban mágneses nanostruktúrák elméleti vizsgálatát végeztük hazai és nemzetközi együttműködés keretein belül, különös tekintettel az elektron transzport tulajdonságokra. Ennek érdekében több új számítógépes módszert fejlesztettünk ki, amelyekben a sűrűségfunkcionál elmélet felhasználásával kapott elektronállapotokra építettünk különböző szintű transzport elméleteket az elektromos vezetőképesség és áram meghatározására:

1) A lineáris válaszelméleten alapuló Kubo-Greenwood formalizmust építettük be a teljesen relativisztikus "komplex geometriájú" Screened Korringa-Kohn-Rostoker (SKKR) programcsomagba egy új, hatékony algoritmus felhasználásával.

2) 3D-WKB-STM néven egy új programcsomagot készítettünk, amely alkalmas pásztázó alagútmikroszkópia (STM) és -spektroszkópia (STS) számítására mágneses és nem-mágneses felületeken.

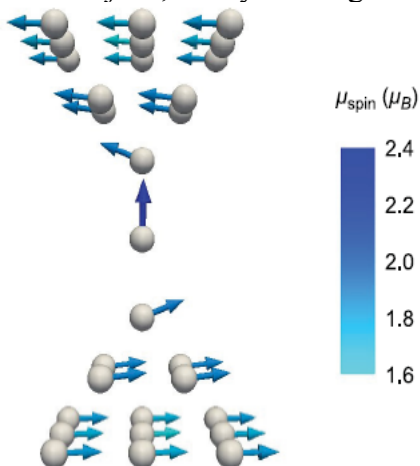
Az újonnan kifejlesztett módszerekkel az alap kutatás és a technológiai fejlesztések élvonalába tartozó jelenségeket tanulmányoztuk. Vizsgálatainkat és elért eredményeinket az alábbiakban ismertetjük. A cikkeket a beszámoló közleményjegyékében található sorszámok szerint idézzük.

1. Atomi kontaktusok

1. a) Mágneses szerkezet

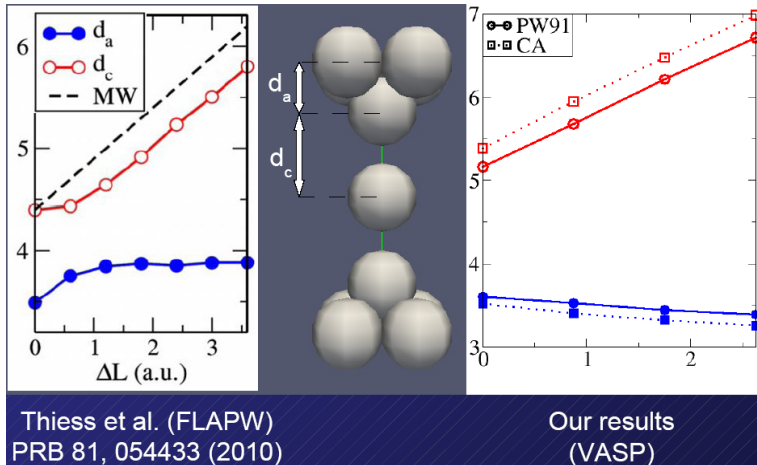
Publikációk: [4], [12]

Véges méretű mágneses nanoszerkezetek nemkollineáris mágneses alapállapotának vizsgálatára egy önkonzisztens módszert dolgoztunk ki kollégáimmal, mely a sávenergia spin-irány-szerinti deriváltjait használja, és egy Newton-Raphson módszerrel keresi az energiaminimumot. A módszert egy kobalt atomi kontaktusban kialakuló doménfal szerkezetének meghatározására és elméleti vizsgálatára használtuk [4]. Rámutattunk a relativisztikus kölcsönhatások jelentőségére, melynek következtében különbség adódik a helikális és cikloidális jellegű doménfalak energiája között. Alapállapotnak cikloidális jellegű doménfalat kaptunk (1. ábra). Az energia spinirány-függésének tanulmányozása során arra következtettünk, hogy a rendszert kellő pontossággal csak olyan spinmodell írja le, amelyben magasabb rendű több-spin kölcsönhatások szerepelnek.

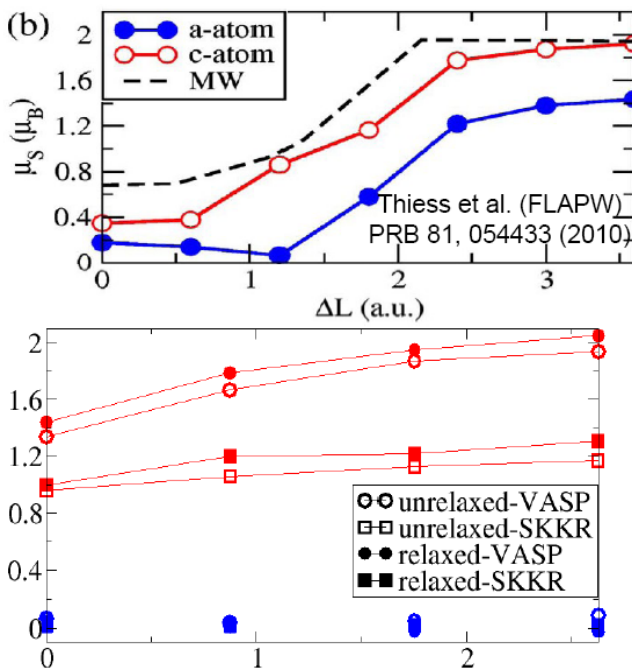


1. ábra: Az energetikailag legkedvezőbb cikloidális doménfal mágneses szerkezte a Co atomok spin momentumainak irányával és nagyságával. [4]

Olyan anyagokban, ahol a spin-pálya kölcsönhatás erős, számottevő igény van relativisztikus számításokra. Ennek példájára irídium atomi kontaktusokat vizsgáltam számos lokális geometriában (különböző hossz, orientáció, geometriai csatlakozás felülethez). Érdekes módon, míg a tömbi Ir nem mágneses, a redukált dimenziójú Ir rendszerben atomi mágnesség alakul ki. Megállapítható, hogy a geometriai relaxációnak rendkívül fontos szerepe van a mágneses struktúra kialakításában, és a mágneses anizotrópia energia meghatározásában.



2. ábra: Az energetikailag legkedvezőbb Ir atomi kontaktus geometriák (d_a és d_c távolságok) összehasonlítása korábbi irodalmi adatokkal és különböző kicserélődési-korrelációs potenciálokkal (Perdew-Wang 91, Ceperley-Alder) a széthúzás (ΔL) függvényében. [12]



3. ábra: Az Ir atomi kontaktusban kialakuló atomi spin momentumok (μ_S) összehasonlítása korábbi irodalmi adatokkal és általunk számolt kétféle módszerrel (Vienna Ab-initio Simulation Package: VASP és Screened Korringa-Kohn-Rostoker módszer: SKKR) a széthúzás (ΔL) függvényében [12]. c-atom: a kontaktus közepén lévő atom; a-atom: kapcsolódó atom a szubsztrátokhoz mindkét oldalon (a szimmetria miatt ekvivalens a-atomok).

A 2. ábrán látható, hogy szimmetrikus kontaktus geometriát feltételezve jó egyezést kapunk korábbi irodalmi geometria adatokkal a kontaktus széthúzásának függvényében. Az atomi spin momentumokat tekintve megállapítható, hogy míg a c-atomok (magyarázatért lásd a 3. ábra feliratát) spin momentumai tendenciában és nagyságban is (csak VASP) jól egyeznek korábbi irodalmi adatokkal, jelentős különbség van az a-atomok (magyarázatért lásd a 3. ábra feliratát) spin momentumai között az általunk számolt és az irodalomban közölt értékeket tekintve. Míg Thies és munkatársai növekvő spin momentumokról számoltak be, mi azt látjuk, hogy az a-atomok spin momentumai nem változnak a kontaktus széthúzásának függvényében. Az eltérés okát még vizsgáljuk, az mindenesetre biztos, hogy eltérő módszerekről van szó: VASP és SKKR 3-dimenziós rendszere (mi számításaink), FLAPW módszer 1-dimenziós rendszere (Thies és munkatársai).

Tovább vizsgálva az Ir atomi kontaktust, VASP teljes energia számításokból arra jutottunk, hogy az aszimmetrikus kontaktus energetikailag kedvezőbb a szimmetrikus elrendezésnél, és az energiakülönbség a széthúzással egyidejűleg nő.

1. b) Elektron transzport

Véges méretű atomi klaszter beágyazása lehetséges 2-dimenziós translációinvariáns környezetbe az SKKR programban. A klaszter ún. szórási-út (scattering path) operátora (SPO):

$$\underline{\tau}_{\text{clus}}(\varepsilon) = \underline{\tau}_{\text{host}}(\varepsilon) \left[\underline{I} - \left(\underline{t}_{\text{host}}^{-1}(\varepsilon) - \underline{t}_{\text{clus}}^{-1}(\varepsilon) \right) \underline{\tau}_{\text{host}}(\varepsilon) \right]^{-1}$$

ahol τ_{host} és τ_{clus} a környezet és a beágyazott klaszter SPO-a, valamint t_{host} és t_{clus} a megfelelő szórási mátrixok. A Kubo-Greenwood lineáris válaszmélet alapján a vezetőképesség (g) egy atomi kontaktusban:

$$g = \frac{\hbar}{2\pi d_{\perp}^2} \sum_i \sum_j \text{Tr} [J_z^{iI}(\varepsilon_F^-, \varepsilon_F^+) \underline{\tau}_{\text{clus}}^{iI,jJ}(\varepsilon_F^+) J_z^{jJ}(\varepsilon_F^+, \varepsilon_F^-) \underline{\tau}_{\text{clus}}^{jJ,iI}(\varepsilon_F^-)]$$

ahol d_{\perp} az áramra merőleges réteg-réteg távolság, J_z a relativisztikus áram mátrix, i és j atomi pozíciókat jelöl a kontaktus két oldalán lévő I és J rétegben, és az összegzések véges számú atomokra történnek. Amennyiben az I és J rétegek csak az összegzés miatt szükségesek és nem részei a valódi beágyazott klaszternek (ami a vákuumba beágyazott kontaktus atomokat jelenti), τ_{clus} 3x3-as blokkokba rendezhető:

$$\begin{matrix} N_{\text{emb}} \times N_{\text{emb}}, & N_{\text{emb}} \times N_I, & N_{\text{emb}} \times N_J, \\ N_I \times N_{\text{emb}}, & N_I \times N_I, & N_I \times N_J, \\ N_J \times N_{\text{emb}}, & N_J \times N_I, & N_J \times N_J, \end{matrix}$$

ahol N_{emb} a valódi beágyazott atomok száma, melynek az elektronszerkezetét önkonzisztensen számoljuk. N_I és N_J jelöli az I és J rétegben a vezetőképesség számolásához figyelembevett atomok számát. Ezzel a blokk-felosztással:

$$\underline{\tau}_{\text{clus}}^{ij}(\varepsilon) = \underline{\tau}_{\text{host}}^{ij}(\varepsilon) + \sum_{k,l} \underline{\tau}_{\text{host}}^{ik}(\varepsilon) \left[\underline{I} - \left(\underline{t}_{\text{host}}^{-1}(\varepsilon) - \underline{t}_{\text{clus}}^{-1}(\varepsilon) \right) \underline{\tau}_{\text{host}}(\varepsilon) \right]_{kl}^{-1} \left(\underline{t}_{\text{host}}^{-1}(\varepsilon) - \underline{t}_{\text{clus}}^{-1}(\varepsilon) \right)_l \underline{\tau}_{\text{host}}^{lj}(\varepsilon)$$

ahol az összegzés k és l -re a valódi beágyazott klaszterre végzendő el (N_{emb} számú atomra). A módszer segítségével több atomi pozícióra lehet elvégezni az összegzést a vezetőképesség kiszámításakor, mely pontosabb eredményeket szolgáltat. Ezzel egyidejűleg a számolási idő is jelentősen csökken, hiszen elegendő kiszámolni az $(N_{\text{emb}} \times N_{\text{emb}})$ blokk inverzét a teljes mátrix $(N_{\text{emb}} + N_I + N_J) \times (N_{\text{emb}} + N_I + N_J)$ inverze helyett. Ezt a számítástechnikai szempontból kedvező szimulációs módszert a kontaktus vezetőképességének számítására szeretnénk publikálni a jövőben.

A módszer felhasználásával különböző hosszúságú ferromágneses kobalt és vas atomi kontaktusokban mágneses ellenállást és anizotróp mágneses ellenállást számítottam. Megállapítható, hogy a kontaktus hosszával a mágneses ellenállás nő, míg az anizotróp mágneses ellenállás rendkívül alacsony (1% körüli) értéket mutat, amely kísérletileg nehezen kimutatható.

C4v szimmetriájú egyatomos nikkell kontaktusban azt tapasztaltam, hogy míg a vezetőképesség (g) értékek alacsonyabbak az irodalomban fellelhető eredményeknél, a mágneses ellenállás (MR) jól egyezik. Megállapítható továbbá, hogy a spin-pálya kölcsönhatás szerepe elhanyagolható a nikkell atomi kontaktus elektromos vezetési tulajdonságaiban.

Ni-kontaktus	Saját eredmény	Achilles at al. PRB 84, 054418 (2011)
$g_{\text{Parallel}} (e^2/h)$	4,08	4,5
$g_{\text{AntiParallel}} (e^2/h)$	3,86	4,2
$MR = (g_P - g_{AP}) / g_{AP} (\%)$	5,70	7,1

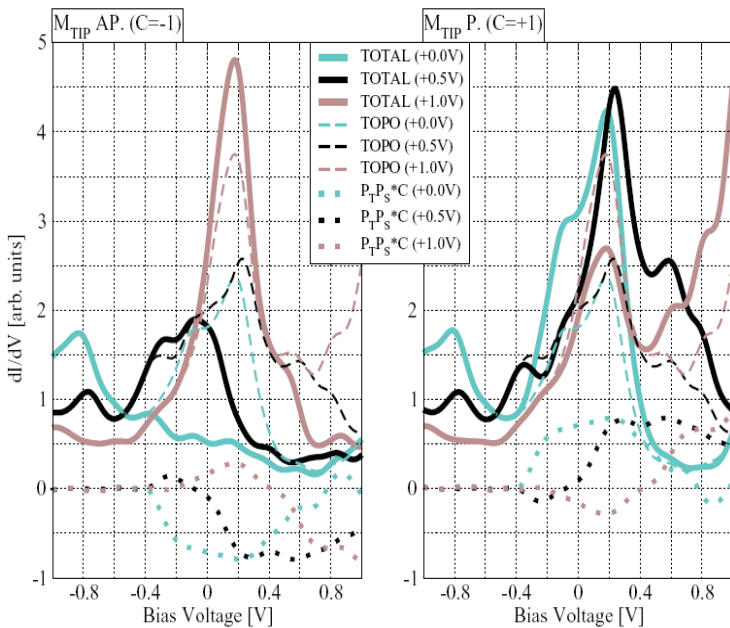
2. Alagútátmenetek

A spin-polarizált pásztázó alagútmikroszkópia (STM) ill. -spektroszkópia (STS) a felületi mágneses szerkezetek detektálásának legkorszerűbb kísérleti eszköze. Egy atomi szuperpozíciós módszer (3D-WKB) használatával felületi komplex mágneses struktúrák STM ill. STS szimulációs modelljét fejlesztettük ki, melyet számos technológiai szempontból fontos felületre alkalmaztunk. A módszer legnagyobb előnye a pásztázó tú geometriai orientációjának és elektronszerkezetének figyelembevétele az alagút-transzport során, melyet a jelenlegi szakirodalom nagyrésze elhanyagol, és amelynek eredményeink szerint döntő jelentősége van a kapott STM képeken, ill. differenciális vezetőképesség spektrumokon. Reményeink szerint a módszer hozzájárulhat számtalan felületfizikai probléma pontosabb értelmezéséhez a pásztázó alagútmikroszkóppal végzett mérések tekintetében, mind mágneses és nemmágneses felületek esetén.

2. a) Pásztázó alagútspektroszkópia (STS)

Publikációk: [1], [6], [14], [15], 1 előkészületben

A 3D-WKB spin-polarizált STS modelljében először az ún. lokális elektron állapotsűrűség (LDOS) közelítést használtuk a differenciális vezetőképesség (dI/dV) meghatározására [1]. Elméleti számításokkal rámutattunk, hogy a tú mágneses orientációjának és az alagútfeszültségnek a változtatásával a spin-polarizált STS érzékenysége kísérletileg növelhető (4. ábra), mely jelenségért az effektív spin-polarizáció felelős. Modell számításainkat a vas (001) felületen végeztük.



4. ábra: Számított dI/dV spektrumok (TOTAL) és azok nem-mágneses járuléka (TOPO) 3,5 Å magasságban a Fe(001) felület felett egy Ni tűt használva kétféle tú mágneses irányt feltételezve: Antiparallel (bal oldali ábra) és Parallel (jobb oldali ábra). Az effektív spin-polarizációt ($P_T P_S * C$) pontozott vonal jelöli. [1]

Ezután a 3D-WKB spin-polarizált STS modelljében túléptünk a jelenleg széleskörűen használt LDOS közelítésén a dI/dV kifejezésében, figyelembe véve az ún. háttér és tú-derivált tagokat [6]. A módszer alkalmazásával megmutattuk, hogy az alagútspektrumokból származtatott mágneses aszimmetria nemtriviális módon köthető a felület spin-polarizációjához, valamint bemutattunk egy módszert kétdimenziós differenciális vezetőképesség és effektív spin-polarizáció térképek szimulációjára kísérletileg releváns elrendezésben, egy konstans áram kontúron. Újonnan kidolgozott módszerünkkel ezüst (111) felületére helyezett mágneses króm monoréteg dI/dV -spektrumát tanulmányoztuk. Megmutattuk, hogy az általunk számított dI/dV jól egyezik az alagútáram numerikus deriváltjával, továbbá különböző tú-modellek hatását vizsgáltuk az alagútspektrumra és a mágneses aszimmetriára.

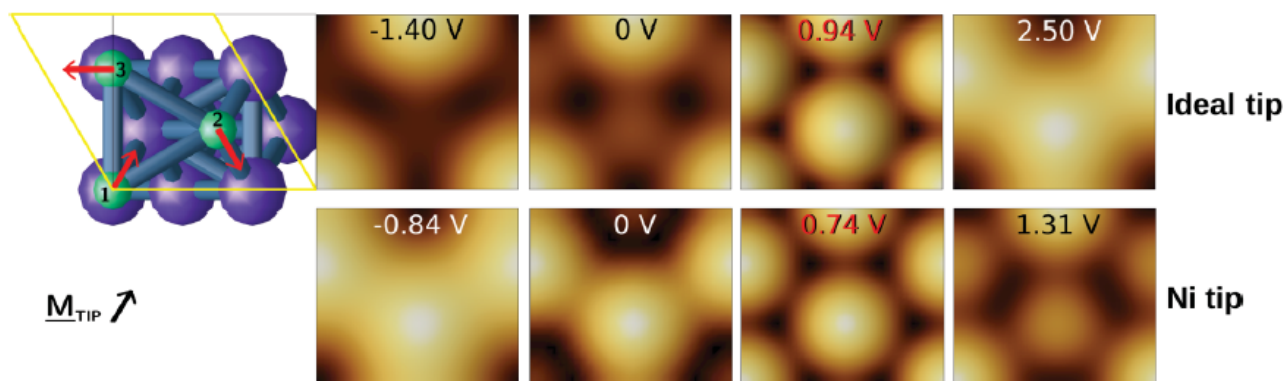
Moiré mintázatú felületek kialakulhatnak pl. különböző rácsállandójú fémek egymásra növesztésével. Egy ilyen példaként ultravékony (1-2 monoréteg) kobalt filmeket vizsgáltunk ezüst (111) felületen [14,15]. Az energetikailag legkedvezőbb felületi rétegződés megtalálása után helyfüggő elektron kilépési munkát számoltunk, valamint dI/dV alagútspektrumokat vizsgáltunk különböző túmodelleket feltételezve. Az eredmények jó egyezést mutatnak korábbi kísérleti tapasztalatokkal a dI/dV csúcsok energetikai pozícióit tekintve. A TDK munka és BSc szakdolgozat eredményeit egy nemzetközi konferencián ismertettem [15], és az eredményekből egy publikáció írását tervezzük a közeljövőben.

2. b) Pásztázó alagútmikroszkópia (STM)

Publikációk: [2], [7], [10], [11], [13], [16], [17], [18], 2 előkészületben

A 3D-WKB spin-polarizált STM módszerben megteremtettük annak lehetőségét, hogy nemkollineáris mágneses rendszerek elektronszerkezetét közvetlenül lehessen használni STM szimulációkban [2]. Az újonnan kifejlesztett módszer használatával ezüst (111) felületére helyezett mágneses króm monorétegben megmutattuk, hogy a spin-polarizált STM-ben mért kvalitatív mágneses kontraszt erősen függ a tú elektronszerkezetétől, valamint az alagútfeszültség függvényében kontraszt-inverzió is bekövetkezhet (5. ábra). Eredményeink rávilágítanak arra, hogy egy komplex (nemkollineáris) mágneses felület mágneses kiralitásának kísérleti STM képekből történő egyértelmű meghatározásához ismerni kell a tú elektronszerkezetét is.

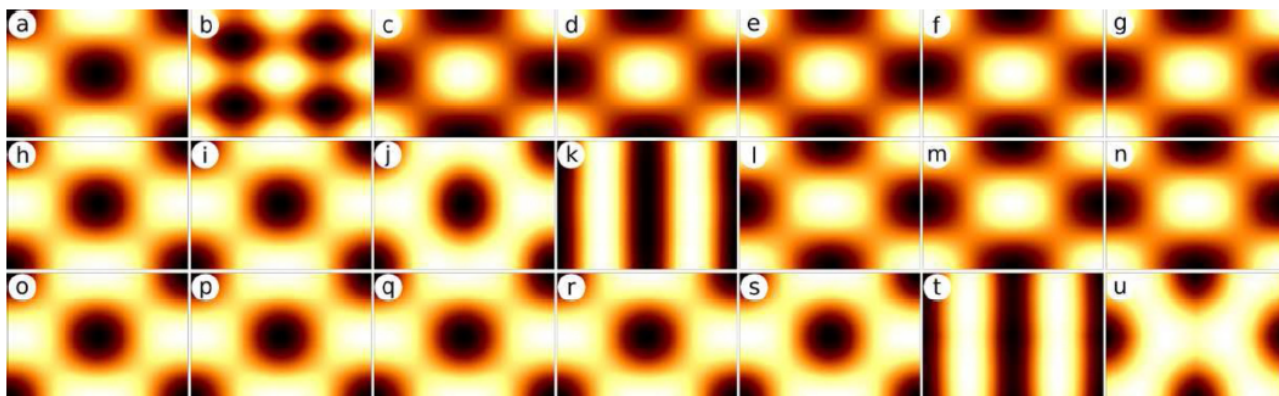
A spin-polarizált STM-mel konstans áram kontúron mérhető alagútfeszültség-függő mágneses kontraszt, azaz két különböző mágnesezettségű atom látható magasságának kvantitatív becslésére tettem elméleti és kísérleti javaslatot, valamint numerikus számításokkal a tú elektronszerkezetének hatását vizsgáltam a mágneses kontrasztra ezüst (111) felületére helyezett nemkollineáris mágneses struktúrájú króm monorétegben egy egy-szerzős cikkben [11]. Azt tapasztaltam, hogy a mágneses kontraszt exponenciálisan cseng le a minta-tú távolság növelésével, valamint a tú mágneses irányának változtatásával egy maximális abszolút értékig tetszőleges kontraszt beállítható.



5. ábra: Számított konstans áramú STM képek az alagútfeszültség és a használt tű függvényében a $Cr/Ag(111)$ felület felett, melynek mágneses szerkezete az ábra bal oldalán látható [11]. A választott feszültségértékek az egyes tűkre elérhető maximális abszolút értékű kontrasztot, ill. inverziót jelzik.

3D-WKB STM elméletünket kiterjesztettük pályafüggő alagutazás figyelembevételével és egy volfrám (110) felület konstans áramú STM képét analizáltuk, különös tekintettel az előforduló korrugációinverzió jelenségére [7]. Az új modellel kapott STM képek jó egyezést mutatnak Tersoff-Hamann és Bardeen módszerekkel meghatározott képekkel, jelentősen kisebb számolási igénnyel. Ezenkívül korábbi munkákkal összhangban azt találtuk, hogy a kontraszt inverziója függ az alagútfeszültségtől és a minta-tú távolságtól is. Különböző túmodelleket alkalmazva megfigyeltük, hogy a fenti jelenség érzékeny a tú elektronállapotainak pályakarakterére is.

A pályafüggő 3D-WKB STM modellt kiterjesztettük a spin-polarizált esetre és mágneses felületek vizsgálatára [17]. Vas (110) felület esetén az STM kontraszt inverzióját tanulmányoztuk az alagútfeszültség és a minta-tű távolság függvényében. Ideális s-típusú tűt használva jó egyezést találtunk a Tersoff-Hamann módszer eredményeivel. Vas (001) tűt használva bonyolult kontraszt inverziós térképet kaptunk, melyet a pályafüggő és spin-polarizációs effektusok összjátékaként próbáltunk értelmezni. A számított STM képek jól demonstrálják a tű mágneses orientációjának szerepét az STM kontraszt inverzió kialakításában (6. ábra).



6. ábra: Számított konstans áramú STM képek a Fe(110) felület fölött 0,5 V alagútfeszültségnél [17]. A Fe(001) tű mágnesezettségi irányai: 1. sor (a-g) Parallel; 2. sor (h-n) Merőleges; 3. sor (o-u) Antiparallel a felület spin momentumaihoz képest. A minta-tű távolságok: (a, h, o) 6,00 Å; (b, i, p) 6,37 Å; (c, j, q) 7,00 Å; (d, k, r) 7,28 Å; (e, l, s) 8,00 Å; (f, m, t) 9,12 Å; (g, n, u) 9,50 Å.

A pályafüggő 3D-WKB STM modellt kiterjesztve f-elektronokra, ólom atomok diffúzióját vizsgáltuk szilícium (553)-arany felületen egy kombinált kísérleti-elméleti munkában [18]. Az eredmények azt mutatják, hogy az ólom atomok diffúziója kvázi 1-dimenziós csatornában történik. A diffúziós hosszt a felületen lévő rácshibák befolyásolják, melyek vagy potenciálvölgyet vagy -gátat képeznek a diffundáló atomoknak. A sikeres együttműködést folytatva, STM-mel detektálható kvantum méret effektusokat vizsgálunk különböző vastagságú Pb rétegekben a Si(553)-Au felületen, melyre mérési eredmények már rendelkezésre állnak.

A pályafüggő 3D-WKB STM modellt továbbfejlesztettük oly módon, hogy a pásztázó tű geometriai orientációja tetszőlegesen állítható legyen Euler szögekkel való forgatásokkal, és ennek segítségével az STM kontraszt változását vizsgáltuk volfrám (110) felületen [10]. Azt tapasztaltuk, hogy a tű forgatásával az STM képek szimmetriája könnyen megváltozik. Ennek következményeképpen rávilágítottunk arra, hogy bizonyos esetekben az atomi pozíciók azonosítása nem triviális kísérleti STM képek alapján, mivel azok látszólag eltranszformálódnak a valódi helyzetükhöz képest, és a pásztázó tű csúcsának geometriai elrendezése kulcsfontosságú az STM kontraszt kialakításában.

Az előző bekezdésben ismertetett módszert használva grafit (0001) felület STM kontrasztjának stabilitását vizsgáltuk az alagútfeszültség, az alkalmazott tiszta és szennyezett volfrám tűk, ill. a tűk geometriájának függvényében [16]. Azt találtuk, hogy míg tompa volfrám tűnél nagyjából szimmetrikus az STM kontraszt a pozitív, ill. negatív feszültségekre, addig hegyes volfrám tű esetén kontraszt inverzió következik be a feszültség függvényében, mely a tű elektronszerkezetének köszönhető. A 3D-WKB módszer eredményeit összehasonlítva a Bardeen alagútmodellel kapottakkal azt a megállapítást tehetjük, hogy a tompa tűnél tökéletes egyezés tapasztalható, míg hegyes tűknél a tű csúcs klaszter más atomjaiból is jelentős áramjárulék adódik. Kísérleti adatokkal való összehasonlítás azt eredményezi, hogy mindkét modell kb. ugyanolyan megbízható. Továbbá bizonyos tű-forgatásokra stabil elsődleges kontrasztot kapunk, és csak a másodlagos kontraszt változik (csíkozódás a kísérletekben), míg másfajta tű-forgatásoknál az elsődleges kontraszt is

megváltozik, ami a kísérletekben instabil türe utal.

A 3D-WKB-STM módszer lehetőségeiről és eredményeinkről egy összefoglaló cikket írtunk [13].

A projekt időtartama alatt meghívást kaptam egy publikáció írására a *Progress in Surface Science* folyóiratba, amely a felülettudomány egyik legrangosabb folyóirata (IF>7). A cikk közlésre küldése a közeljövőben várható, tervezett címe: „*What is the orientation of the tip of a scanning tunneling microscope?*” Ebben egy statisztikai módszert mutatunk be kollégáimmal, amelyben kísérleti és különböző tű geometriákban sok (kb. 20000) tű-orientációra szimulált konstans áram kontúrok korrelációit számoljuk. Az eredmények kiértékelésével megmondható a korreláció eloszlása a tű orientációjának függvényében, melyből a kísérletben használt STM tű geometriájára vonható le következtetés.

3. Egyéb mágneses rendszerek

Publikációk: [3], [19], [20]

A [3] cikkben platina szennyező hatását vizsgáltuk a hcp kobalt mágneses anizotrópia energiájára (MAE). Modellünkben a hcp rács egy síkjában változó koncentrációjú helyettesítéses ötvözetet tekintettünk. Számításaink azt mutatták, hogy alacsony Pt koncentráció csökkenti a MAE-t, míg magasabb koncentrációnál a MAE növekedését tapasztaltuk. Az alacsony Pt koncentrációjú számításokat (1 Pt atom helyettesítése) véges méretű atomi klaszterekben végeztem el, és a MAE eredmények hasonló trendet mutattak, mint a síkbeli helyettesítésnél. Az eredmények részletes elemzése alapján a fenti változások a Pt atomok lokális, valamint a Co atomokon indukált MAE járulékok összjátékának tulajdonítható. Ez utóbbi járulékot markáns hosszútávú Friedel oszcillációk jellemzik, mely szignifikánsan befolyásolhatja a nanoméretű minták mágneses energiáját.

A kombinált spin-klaszter kifejtés (spin-cluster expansion – SCE) és relativisztikus rendezetlen lokális momentumok (relativistic disordered local moments – RDLM) technikát alkalmaztuk vas monoréteg filmek mágneses alapállapotának vizsgálatára különböző 5d átmeneti fém hordozókon [20]. A számolt tenzoriális kölcsönhatásokból átlagtérközelítésben, ill. atomisztikus spin-dinamika szimulációval határoztuk meg a rendszer spinszerkezetét. Megmutattuk, hogy a figyelembe vett kölcsönhatások száma jelentős hatással van a mágneses szerkezet kialakulására. Erős korrelációt találtunk az elsőszomszéd vas-vas izotróp kicserélődési (J) és Dzyaloshinskii-Moriya (D) kölcsönhatás erősségének aránya és az alapállapot mágneses szerkezet között. Fe/Os(0001) rendszer esetén nagy D/J arányt találtunk, ami spin-spirál alapállapotot eredményezett. Fe/Re(0001) filmben az erős antiferromágneses elsőszomszéd kölcsönhatások következtében 120 fokos Néel típusú alapállapot alakult ki, melynek a kiralitását is meg tudtuk határozni. Én az eredmények értelmezésében és a publikáció megírásában vettem részt.

Az előző bekezdésben leírt módszert alkalmazva PdFe/Ir(111) felületen topologikusan védett, ún. „skyrmion” mágneses szerkezetek kialakulását vizsgáltuk a PdFe dupla-réteg geometriai relaxációja és a külső mágneses tér függvényében [19]. Számításaink szerint külső tér nélkül spin spirál alapállapotot kapunk, ami a tér növelésével fokozatosan átmegy egy ún. „skyrmion-rács” állapotba, míg nagy tereknél ferromágneses állapotot tapasztalunk. A spin konfigurációk energiáinak számításával a fázishatárokat a meglévő kísérleti értékekkel jó egyezést találunk. A skyrmionok átmérőjét a PdFe dupla-réteg geometriai relaxációjával lehet hangolni, ami a vas-vas D/J arány változásával jár együtt. Én az eredmények értelmezésében és a publikáció megírásában vettem részt.

4. Egyéb vizsgált rendszerek

Publikációk: [5], [8], [9]

Elektron-sávszerkezet és teljes energia első elvekből történő számításával hozzájárultam Ga intersticiális rácshiba kialakulásának megértéséhez GaAsN félvezetőben. Az eredmények szerint Ga rácshiba kialakulása energetikailag jóval kedvezőbb, mint N rácshibáé. A félvezető felületén a Ga rácshiba létrejötte még kedvezőbb, mint a tömbi anyagban [5].

Fémek felületén kialakuló Shockley típusú felületi állapotok Bychkov-Rashba (BR) felhasadását vizsgáltuk a [8] cikkben, amely a spin-pálya kölcsönhatás következménye. Vizsgálatunk célja az volt, hogy az anizotróp BR felhasadást általánosan leíró effektív Hamiltonit konstruáljunk. A k - p perturbációszámítással és csoportelméleti módszerekkel az összes felületi pontcsoportra meghatároztuk a Hamilton mátrixok lehetséges alakját a hullámszámban harmadrendig. A C_{2v} és C_{3v} pontcsoportok esetében eredményünk összhangban volt az irodalomban már közölt Hamilton mátrix-szal. A C_{3v} szimmetria esetén levezetett anizotrópia paraméter formulák és a számolt spektrálsűrűségek alapján sikerült kielégítő magyarázatot adni arra, hogy az Au(111) felületi állapotok miért nem mutatnak a hullámszámban harmadrendű BR felhasadást, ellenben az ugyanolyan szimmetriával rendelkező Bi/Ag(111) felületi ötvözetnél erős harmadrendű BR effektus tapasztalható. Ab initio számításainkkal arra is rámutattunk, hogy a harmadrendű BR effektust hasonló nagyságrendű izotróp és anizotróp járulék jellemzi. Én a Bi/Ag(111) rendszer ab initio számításainak egy részét végeztem.

Végezetül részt vettem TiO_2 nanorészecskék adszorpciójának vizsgálatában grafén felületen valamint -COOH, -OH, és -O- funkcionális grafén nanoszalagokon sűrűségfüggő elmélet alkalmazásával [9]. Megállapítható, hogy tiszta grafénon a rutil TiO_2 kötődése a legkedvezőbb fiziszorpciós módon, míg a nanoszalagokon a rutil és anatóz TiO_2 is kemiszorpcióval kötődik, valamint a -COOH-csoport adja a legerősebb kötést. Ez a munka hozzájárulhat TiO_2 /grafén eszközök fejlesztéséhez, melynek a fotokatalízisben és energiaipari alkalmazásokban lehet jelentősége.

5. A projekt eredményeinek összegzése

Egy 3-hónapos hosszabbítással összesen 39-hónapos posztdoktori pályázatunk eredményeképpen eddig összesen 15 folyóiratcikket publikáltunk, melyek közül 9 a Physical Review B folyóiratban jelent meg, ebből egy cikk egy-szerzős. A megjelent publikációk kumulatív impakt faktora 49,3 és azokra eddig húsz független hivatkozást kaptunk. Eredményeinket számos nemzetközi és hazai konferencián, valamint szemináriumon népszerűsítettük (összesen 25 szóbeli, ebből 3 meghívott, és 1 poszter előadás, lásd 1. sz. Melléklet). Meglévő eredményeinkből további folyóiratcikkek közlését tervezzük a jövőben, jelenleg 2 folyóiratcikk van közlésre elküldve: [16], [19].

A pályázat futamideje alatt a meglévő szoros együttműködésekén túl (Szunyogh László, Udvardi László, BME; Újfalussy Balázs, MTA-Wigner-SZFI; Werner Hofer, Newcastle, Nagy-Britannia) számos hazai és nemzetközi együttműködést alakítottam ki: Nagy Norbert (MTA-TTK-MFA), Bakó Imre (MTA-TTK-SZKI), Deák László (MTA-SZTE-Reakciókinetika), Marko Punkkinnen (Turku, Finnország), Serge Ayissi (London, Kanada), Mariusz Krawiec (Lublin, Lengyelország), Gilberto Teobaldi (Liverpool, Nagy-Britannia), Pavel Jelinek (Prága, Csehország). Ezenkívül rövid látogatásra meghívtam Prof. Stefan Heinzét a Kieli Egyetemről, aki 2012.09.28-án „*Exploring magnetism on the atomic scale: From skyrmion lattices to single-atom contacts*” és Prof. Josef Redingert a Bécsi Műszaki Egyetemről, aki 2014.02.14-én „*Thin cobalt oxide films on iridium: Structures, magnetism and surprises*” címmel tartott előadást a BME TTK Elméleti Fizika Tanszék szemináriumán.

Mindezek mellett fontosnak tartom OTKA pályázatunk tehetséggondozásban betöltött szerepét a BME-n. Ennek adatait a 2. sz. mellékletben foglaltam össze. Kutatásainkhoz kapcsolódóan 2 tudományos diákköri munka, 1 BSc szakdolgozat és 1 MSc diplomamunka született, továbbá egy PhD munka folyamatban van.

Reményeink szerint az általunk sikeresnek ítélt kutatás jó alapot teremt további kutatástámogatási pályázatok elnyerésére a jövőben.

1. Melléklet - Konferencia előadások, szemináriumok

1. Előadás: K. Palotás: "Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on complex magnetic surfaces", Seminar at the Department of Theoretical Physics, Budapest University of Technology and Economics, May 6, 2011, Budapest, Hungary.
2. Előadás: K. Palotás: "Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on complex magnetic surfaces", Nano-Seminar at the Budapest University of Technology and Economics, May 12, 2011, Budapest, Hungary.
3. Poszter: K. Palotás, W. A. Hofer, and L. Szunyogh: "Simulation of spin-polarized STM and STS on magnetic nanostructures", EuroNanoForum 2011 Conference, May 30-June 1, 2011, Budapest, Hungary.
4. Előadás: K. Palotás: "Bias-dependent magnetic contrast on complex magnetic surfaces", 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.
5. Előadás: K. Palotás, L. Szunyogh, and W. A. Hofer: "Theoretical study of tip effects on spin-polarized STM/STS on magnetic surfaces", 28th European Conference on Surface Science (ECOSS 28), August 28-September 2, 2011, Wrocław, Poland.
6. Előadás: K. Palotás: "Theoretical study of tip effects on spin-polarized STM/STS on magnetic surfaces", Seminar at the Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool, September 5, 2011, Liverpool, UK.
7. **Meghívott előadás:** K. Palotás: "Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic surfaces", ViCoM-Seminar at the Vienna University of Technology, January 16, 2012, Vienna, Austria.
8. Előadás: K. Palotás: "Tip effects on spin-polarized STM/STS on complex magnetic surfaces from first principles", 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.
9. **Meghívott előadás:** K. Palotás: "Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic surfaces", Seminar at the Christian Albrechts University of Kiel, June 11, 2012, Kiel, Germany.
10. Előadás: K. Palotás, L. Szunyogh, and W. A. Hofer: "Bias dependent magnetic contrast on complex magnetic surfaces", International Conference on Nanoscience and Technology (ICN+T 2012), July 23-27, 2012, Paris, France.
11. Előadás: K. Palotás: "Electron transport simulations from first principles", Nanophysics seminar, Budapest University of Technology and Economics, March 8, 2013, Budapest, Hungary.
12. Előadás: K. Palotás: "Constant current contrast in spin-polarized STM", 77th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 10-15, 2013, Regensburg, Germany.
13. Előadás: G. Mándi, L. Szunyogh, and K. Palotás: "Efficient orbital dependent STM simulation model", 77th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 10-15, 2013, Regensburg, Germany.
14. Előadás: K. Palotás: "Quantitative prediction of the bias voltage dependent magnetic contrast in spin-polarized STM", 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.
15. Előadás: G. Mándi and K. Palotás: "Efficient orbital dependent STM simulation model", 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.

16. **Meghívott előadás:** K. Palotás: "Enhancing the magnetic contrast in spin-polarized scanning tunneling microscopy", New results in condensed matter physics Workshop, Hungarian Academy of Sciences, May 9, 2013, Budapest, Hungary.
17. Előadás: G. Mándi and K. Palotás: "Efficient orbital dependent STM simulation model", PhD Conference at the Budapest University of Technology and Economics, May 17, 2013, Budapest, Hungary.
18. Előadás: K. Palotás: "Structure and magnetism of atomic-sized Ir contacts", Relativistic effects in solids Workshop, May 21-23, 2013, Brno, Czech Republic.
19. Előadás: G. Mándi and K. Palotás: "STM contrast inversion of the Fe(110) surface", 6th International Workshop on Surface Physics (IWSP 2013), September 1-6, 2013, Niemcza, Poland.
20. Előadás K. Palotás: "STM contrast inversion on flat metal surfaces W(110), Fe(110), Cr/Ag(111)", Seminar at the CNR-SPIN L'Aquila, October 16, 2013, Chieti, Italy.
21. Előadás: G. Mándi and K. Palotás: "Simulation of scanning tunneling microscopy from first principles", 8th Hungarian Meeting on Scanning Probe Methods, October 18, 2013, Debrecen, Hungary.
22. Előadás: K. Palotás: "STM contrast: The role of the tip", Seminar at the Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool, March 18, 2014, Liverpool, UK.
23. Előadás: G. Mándi, M. Seress, and K. Palotás: "Interplay of orbital-dependent tunneling and spin-polarization in STM/STS", 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany.
24. Előadás: G. Mándi, G. Teobaldi, and K. Palotás: "STM imaging of HOPG: Tip geometry effects", 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany.
25. Előadás: K. Palotás: "STM contrast: The role of the tip", Seminar at the Nanosurf Lab, Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, May 13, 2014, Prague, Czech Republic.
26. Előadás: G. Mándi, G. Teobaldi, and K. Palotás: "STM contrast stability of HOPG: Role of the tip-orientation", Physics Boat 2014 Workshop: Atomic structure of nanosystems from first-principles simulations and microscopy experiments, June 3-5, 2014, Helsinki, Finland - Stockholm, Sweden.

2. Melléklet - Hallgatói témavezetés – Palotás Krisztián (BME)

TDK munkák

Mándi Gábor: "Pályafüggő lecsengés pásztázó alagútmikroszkóp szimulációjában", BME TTK TDK, Elméleti Fizika szekció, 3. díj, 2011.

Seress Mátyás: "Differenciális vezetőképesség spektrum szimulációja Co/Ag(111) moiré strukturált felületen", BME TTK TDK, Kísérleti Fizika szekció, dícséret, 2013.

BSc Szakdolgozat

Seress Mátyás: "Fém-fém határfelületek elektronszerkezeti tulajdonságainak szimulációja", 2014.

MSc Diplomamunka

Mándi Gábor: "Pályafüggő lecsengés pásztázó alagútmikroszkóp szimulációjában", 2012.

PhD Doktori munka

Mándi Gábor: "Simulation of scanning tunneling microscopy from first principles", folyamatban 2012. szeptember 1-től.