Diplomamunka

Véges multirétegek mágneses szerkezete

Major Márton

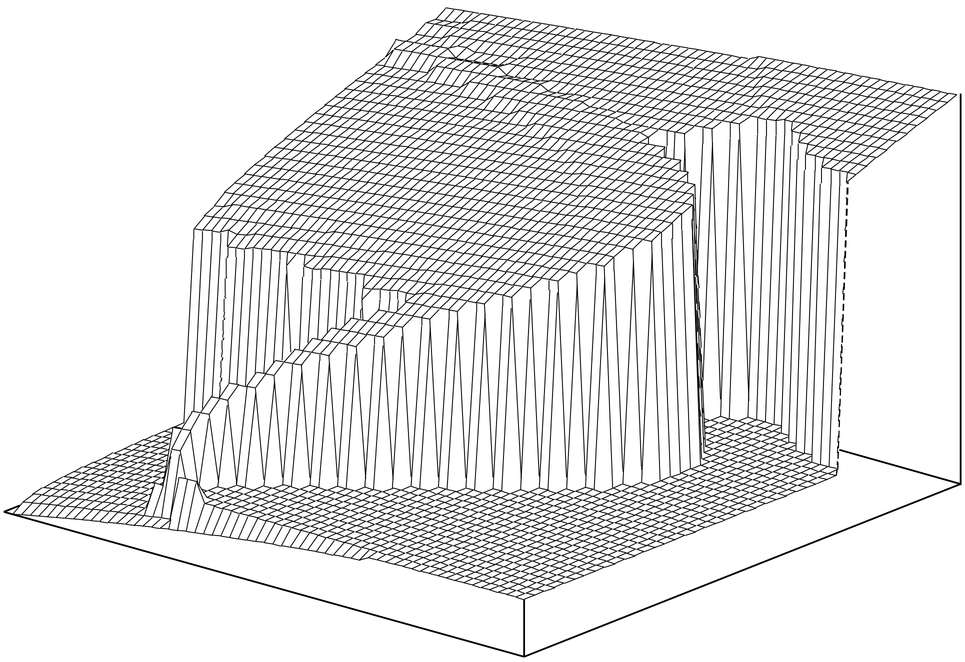
Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar

Fizikus hallgató

Témavezető:

Nagy Dénes Lajos

1999.



Tartalomjegyzék

Bevezetés

Már régóta foglalkoztatja a fizikusokat a különféle rendezett mágneses szerkezetek viselkedése. Ezen belül is az egyik manapság is nagy érdeklődésnek örvendő téma a mágneses nanostruktúrák szerkezete. Az elmúlt évek technikai fejlődése lehetővé tette ezen nanostruktúrák gyakorlati megvalósítását. A nanostruktúrák közül is kiemelkedően fontosak a vékonyréteg-szerkezetek. Ma már lehetséges atomi pontossággal rétegeket növeszteni, és a növesztett rétegeket *in situ* vizsgálni. A vékonyréteg-szerkezetek (filmek) népszerűségének oka, hogy síkbeli kiterjedésük sokkal nagyobb, mint vastagságuk, így egyrészt elég nagyok, hogy „lássuk őket" és mérni tudjunk rajtuk, másrészt jól lehet rajtuk tanulmányozni a mágneses rendeződési effektusokat. Makroszkópikus síkbeli kiterjedésük következtében jelentős az alkalmazható mérési módszerek száma.

A filmek más szempontból is érdekesek. Például tömbi anyagban nem megfigyelhető anomális kristályszerkezetek stabilizálódhatnak. Különféle jelenségek és alkalmazások is kitüntetik a vékonyrétegeket mind elméleti, mind gyakorlati szempontból. Utóbbira példa az óriás mágneses ellenállás és az erre épülő technológiák (pl. nagyobb tárolókapacitású merevlemezek), mágneses nanoszenzorok, spininformációt is felhasználó adattárolás. Nap mint nap olvashatunk az újabb és újabb áttörést hozó eredményekről. Utolsó példánkat ismét az adattárolás területéről hozzuk:

Az IBM kutatói szubpikoszekundumos lézerimpulzus segítségével az eddigi rétegmágnesezettség-átfordítási időt tizedére csökkentették, elérve a 100 pikoszekundumos határt. A gyakorlati alkalmazás még valószínűleg messze van, azonban a vékonyréteg-rendszerek kutatásában alapvetően újat hozhat ez a technológia. (Élet és Tudomány, LIV 805)

A vékonyrétegszerkezet-kutatásban a fém–fém illetve fém–félvezető szerkezetek is alapos vizsgálatra kerültek. Ennek ellenére máig is sok a megoldatlan kérdés. A spontán mágneses rendet mutató anyagokban megfigyelhető jelenségek mikroszkópikus szintű megértése a hosszútávú rendeződés miatt különösen nehéz feladat. Nem elég, hogy egy-egy atom mágneses momentuma is több járulék (spinmomentum és pályamomentum) összege, de a mágneses kölcsönhatások között ezen momentumok makroszkópikus skálán vett kölcsönhatásai is nélkülözhetetlen szerepet játszanak.

Ma is vitatott kérdés a mágneses csatolás pontos természete. Fe/Cr vékonyrétegek esetében például valószínűsíthető egy bikvadratikus csatolási tag, mely a szomszédos vas rétegek síkban fekvő mágnesezettségeit egymásra merőlegesen állítja. Más kutatók az első elvekből általánosságban nem származtatható bikvadratikus csatolás által magyarázott réteg-mágnesezettség viselkedést mélységfüggő bilineáris csatolással írják le.

Ugyanígy érdekes kérdés a mágneses domének szerepe és viselkedése. Ma már szubmikrométeres felbontásban lehet vizsgálni a mágneses szerkezetet. Azonban a legtöbb doménvizsgálati módszer csak a felületét látja az anyagnak, ebből lehet következtetéseket levonni a mélyebben fekvő domének tulajdonságaira. Számolásaink során azonban végig egy-domén közelítésben fogunk dolgozni. Fontos tulajdonság még a rendszer anizotrópiája, amelynek a szimmetriája, nagysága mindig az adott mintától függ.

Egy további — a tömbi antiferromágneseknél is létező — jelenség a spin-flop. Zérus külső térbe helyezett tömbi antiferromágneses anyag egymással alapállapotban 180 fokot bezáró mágneses momentumai egy kritikus nagyságú külső térnél „kifordulnak" (azaz közel merőlegesen fognak állni a külső mágneses térhez képest), mert ekkor ennek az alapállapotnak kisebb az energiája. Félvégtelen rendszereknél ez az átmenet már kisebb külső tér esetén is bekövetkezik.

Az antiferromágnesesen csatolt vékonyréteg-rendszerek fenomenológikus leírásában alkalmazott energiafüggvény kísértetiesen emlékeztet az atomi momentumok esetében alkalmazottra, azzal a különbséggel, hogy itt egy-egy (magában is makroszkópikus) réteg van antiferromágnesesen csatolva a „távtartó" rétegen keresztül. A minimalizálási problémát általában itt sem lehet analitikusan megoldani, ugyanakkor számítógépes számítások, szimulációk végezhetők. Ezen számolások szerint például adott körülmények között is fellép a felületi spin-flop, ami ismét a véges rétegszám következménye. A spin-flop megjelenése erősen szerkezetfüggő, azaz kell hozzá egy „energiagát", amit általában az anizotrópia-energia biztosít.

A fent vázolt területhez jelen dolgozatban a végesréteg-hatásokon keresztül közelítünk. A legtöbb elméleti munkában ugyanis elhanyagolják a rendszer végességéből adódó hatásokat. Amíg azonban egy tömbi antiferromágnesnél a felület/térfogat arány valóban lehetővé teszi ezen közelítéseket, egy tipikus vékonyrétegszerkezetnél, ahol az egész film vastagsága nem haladja meg a mikrométeres tartományt, már nem magától értetődő. Különösen nem akkor, amikor a fenomenológikus modell egységeként választott rétegmomentum mindössze tízszer, hússzor ismétlődik. Ezen „egy dimenziós" rendszer pontos vizsgálatához azonban számítógépes szimulációra van szükség, mivel analitikusan megkeresni a rendszer energia-minimumát nem célszerű, és általában nem is lehetséges.

A végesréteg-effektusok fenomenológikus tanulmányozására saját energia-minimalizáló programcsomagot fejlesztettünk. A program jelenleg is fejlesztés alatt áll, de már az első eredmények sok újdonsággal szolgáltak. Első szimulációnkban a legegyszerűbb antiferromágneses modellt véve megállapítottuk, hogy a két-alrácsos (tömbi) megoldáson kívül létezik egy „kollektív" megoldás is, ami a periodikus határfeltétel hiányából származó extra szabadsági fok következménye.

A ‚naív' antiferromágneses modellt kis módosításával (9+1 modell) sikerült a gyakorlatban is igazolni a program megfelelő működését. Ekkor a csoportunk által már egyszer kiértékelt Fe/FeSi minta szerkezetét értettük meg alaposabban. Az eredeti kiértékelés ugyanis a két-alrácsos közelítésre épült, így elhanyagolta a minta véges voltából származó korrekciókat. A finomított, *véges* fenomenológikus modellnek megfelelően számolt eredmények az eredeti 8+2 modellnél jobban illeszkedtek a mért adatokhoz.

Következő gyakorlati alkalmazása a programnak egy nemrég lemért, még kiértékelés alatt álló Fe/Cr vékonyréteg-szerkezetben bekövetkező tömbi spin-flop kvantitatív megértése. Neutron-reflektometriai mérésekből egyértelmű a spin-flop létrejötte. A programcsomaghoz tartozó mogzókép-sorok segítségével alaposabb képet kaphatunk a fenomenológikus rendszer viselkedésére és kvantitatíven is megérthetjük a jelenségeket, nemcsak közelítően, hiszen — fenomenológikus szinten — a program eredményei egzaktak.

Végül szeretnénk megemlíteni, hogy nagyon fontos, hogy legalább fenomenológikus szinten megértsük a vékonyrétegek szerkezetét (jelen esetben le tudjuk írni a réteg-mágnesezettségek irányát a külső mágneses tér függvényében), ugyanis ezen leírás nélkül esélyünk sincs a komplexebb (például óriás mágneses ellenállás) jelenségek leírására és megértésére.

Köszönetnyilvánítás

1997 nyarán a kötelező nyári szakmai gyakorlatra a KFKI RMKI-ban került sor. Azóta is ebben a csoportban dolgozom, ahol (leendő) munkatársaim mindig igyekeztek a lehető legjobban segítségemre lenni. Nyári gyakorlatom során Bottyán Lászlóval dolgoztam együtt intenzívebben, diplomamunkámat Nagy Dénes Lajos vezetésével írtam. Mindkettőjüknek köszönöm azokat az ismereteket, amit szoros munkarendjük ellenére átadtak. Köszönöm a hozzáálást is, hogy már az első pillanattól kezdve kollégának tekintettek, önállóságot biztosítottak és lehetőségeikhez mérten mindenben támogattak. Ezúton köszönöm, hogy Dubnában részt vehettem egy neutron-diffrakciós mérésben, „testközelből" figyelve a kísérleti fizika lenyűgöző módszereit.

Nagy Dénes Lajos útmutatása segített diplomamunkám írása során mindig a lényeges jelenségekre irányítva figyelmemet. Köszönettel tartozom Deák Lászlónak is, aki elvégezte a Fe/FeSi minta SMR időspektrumainak illesztését és szimulációját. Ph.D. értekezése is nagy segítséget jelentett számomra. Eddy Kunnent és csoportját is köszönet illeti, hogy rendelkezésemre bocsájtották az általuk lemért és még nem publikált polarizált neutronreflektometriai mérésük eredményét.

Érdekes volt saját kutatásokat folytatni, új eredményeket felfedezni és ezen eredményekkel mások munkáját segíteni. A diplomamunka írása során is folytatódott az érdemi munka, jelenleg Bottyán László Leuvenben J. Dekosterrel azon fáradozik, hogy — az általam írt szimulációs program eredményeit is felhasználva — spinflop kimutatására alkalmas mintasorozatot készítsen. A diplomamunkában összefoglalt eredmények így még csak a kezdetet jelentik, és csak az idő döntheti el, hogy a távolban ragyogni látszó kincsek nem foszlanak-e szét délibábként.

1. fejezet

Célkitűzés

A bevezetőben említett témaköröket tárgyaljuk dolgozatunkban. Elsőként megmutatjuk, hogy milyen nem triviális jelenségeket okozhat a minták végessége, majd így felvértezve, az irodalomban használt fenomenológikus modellek egzakt kezelésével kiértékelünk két mérést. Végezetül az elméleti tárgyalás keretében kiszámoljuk a felületi spin-flop érzékenységét különböző paraméterkre (anizotrópia, külső mágneses térrel bezárt szög). A függelékben található a szimulációs programcsomag rövid ismertetése, néhány elméleti kérdés tárgyalása, illetve az atomi antiferromágnesek tömbi spin-flopjának rövid ismertetése.

Jelen dologzatban egy fenomenológikus megközelítése található a mágnességnek. Ellentétben az első elvekből történő számolással, itt tudatosan nem törekszünk az összes alkotóelem figyelembe vételére, figyelmünket csupán a lényegesnek látszó paraméterek leírására fordítjuk. Például nem veszük figyelembe külön-külön az egy rétegen belüli vas–vas kicserélődési kölcsönhatásokat, hanem helyette egy effektív mágneses momentummal számolunk. Nem foglalkozunk továbbá a domének megjelenésével sem (egydomén közelítés), továbbá a feltételezett bikvadratikus csatolást is elhagyjuk, amikor nem módosítja lényegesen eredményeinket[1].

Az általunk vizsgált vékonyréteg-szerkezetekben a rétegszám végességből származó „extra szabadsági fokok" jelentősen befolyásolják ezen rendszerek viselkedését. A szélső rétegek relatív szabadsága – csak egy szomszéddal rendelkeznek és ellentétben a tömbi modellekkel ezen rendszereknél nincsen periódikus határfeltétel – vezet többek között a felszíni spin-flop[19] megjelenéséhez.

Modellalkotásunk során feltesszük, hogy a nem-mágneses rétegekkel elválasztott mágneses rétegek rétegen belüli csatolása sokkal erősebb, mint a rétegek közötti csatolás. Ennek megfelelően mindegyik réteget egyetlen makroszkópikus (és ennek megfelelően klasszikus[2]) mágneses momentummal jellemezhetünk, mely momentumok kölcsönhatását vizsgáljuk különböző modellekben. Feltesszük továbbá, hogy az alak-anizotrópia miatt a réteg-mágnesezettségek a minta síkjában fekszenek.

Dolgozatunkban végig $T = 0$-n számolunk. A hőmérsékleti effektusok mint az anyagi állandók (effektív anizotrópia energia, csatolási állandó és réteg-mágnesezettség) változásai jelentkeznek. Fenomenológikus modellünkben nem is könnyű értelmezni a rendszer hőmérsékletét, hiszen az energiatagban szereplő tagok egyesével is makroszkópikusak. Az egyértelműség kedvéért ezért végig a szabad-energiát minimalizáljuk.

Szimulációink adiabatikusak, vagyis a szabadenergia minimalizálásával megkeressük a rendszer minimumát, de nem foglalkozunk a gerjesztésekkel, a rendszer dinamikájával. A statika ellenére látott mozgás oka, hogy a szimulációk során folyonosan változtatjuk a paramétereket (általában a $\mathbf{H}$ külső mágneses teret).

A kidolgozott modellek nemcsak a már lemért minták kiértékelésénél, hanem új mérések tervezésénél is nagy segítségünkre vannak. A szimulációs program részeként fejlesztett „rajzfilm"-ek segítségével „élőben" láthatjuk a momentumok konfigurációjának függését a különböző paraméterektől.

1.1. Végesréteg tulajdonságok

A kutatások középpontjában álló végesréteg-rendszerek, mint azt nevük is mutatja, véges kiterjedésűek. Hagyományosan azonban el szoktuk hanyagolni ezen végességből eredő effektusokat. A tömbi anyagok viselkedésénél a felület elhanyagolása nem okoz különösebb problémát, pedig ezek az anyagok is véges kiterjedésűek. A filmeknek azonban alapvetően mások a térbeli dimenzióik. A legtöbb vékonyréteg vastagsága nem éri el a mikrométert. Ezen belül, amikor különböző anyagokból álló periódikusan ismétlődő szerkezeteket vizsgálnak,

[1] A bikvadratikus csatolásnál $\cos^2 \Delta\vartheta$ szerepel, míg az antiferromágneses (vagy bilineáris) tagban $\cos \Delta\vartheta$ (ahol $\Delta\vartheta$ a két szomszédos réteg mágnesezettsége által bezárt szög), így, amennyiben a bilineáris tag nem tűnik el és a bikvadratikus csatolás együtthatója lényegesen kisebb a bilineáris együtthatónál, úgy a réteg-mágnesezettségek által bezárt szögtől „másodrendben" függő bikvadratikus tag elhanyagolható.

[2] Klasszikus alatt azt értjük, hogy a momentum folytonosan változhat a $\mathbf{H}$ külső mágneses tér tengelyéhez képest.

akkor ezen kettősrétegek száma száz alatt van. A fenomenológikus leírás alanyai pedig ezek a réteges és a köztük létrejövő effektív csatolások. Így igencsak meglepő, hogy az irodalom legnagyobb részében elhanyagolják ezen effektusokat és a mért adatokat általában két-alrács közelítéssel illesztik.

Első célunk a fent vázolt kérdéskör kifejtése egy konkrét elméleti számoláson keresztül. Az egydimenziós első szomszéd antiferromágneses csatolás modelljét használva megvizsgáljuk a végesréteg-effektusokat. Kis külső térben meg fogjuk találni az irodalomból már ismert[18] kollektív állapotot. Ezt és a telítési tér alatti tartományt fogjuk alaposabban megvizsgálni.

Ezentúl foglalkozunk még a felületi spin-flop jelenségével az 5. fejezetben, amikor is az irodalomban található[19] eredményeket összehasonlítjuk az általunk kiszámolt modellekkel. Nem meglepő módon az eredmények jól fognak egyezni. Azt fogjuk találni, hogy a felületi spin-flop oka az egytengelyű anizotrópia, ami az anizotrópia által indukált energiagát által nem engedi, hogy a kollektív alapállapot kialakuljon, így a rétegek adott külső térnél ugrásszerűen változtatnak eredő mágnesezettségük irányán. A felületi spin-flopnál az ugrás a felülethez legközelebb lévő rétegek közel 180°-os átfordulásával fog kezdődni. Ezt a 180°-os ugrást azonban egy négyfogású anizotrópiatag megakadályozza, ezért ekkor csak tömbi spin-flopot tapasztalunk.

1.2. Fe/FeSi minta

Egy 1996-ban előállított, az antiferromágneses csatolás vizsgálatára tervezett, tíz Fe/FeSi rétegpárt tartalmazó minta adatainak kiértékelése volt a szimulációs program első gyakorlati alkalmazása. Külön érdekessége a mintának, hogy ^{57}Fe izotópból készültek a vas rétegek, így azon rétegek mágnesezettségéről Mössbauer tecnikával külön is információ volt nyerhető. A filmbeli ^{57}Fe rétegek alapvetően antiferromágneses tulajdonságokat mutattak, azonban két-alrácsos antiferromágneses modellel nem lehetett leírni. Ekkor egy ún. „8+2" modellt alkalmazva, sikerült jobb egyezést találni.

A 8+2 modell két, egymással gyenge csatolásban álló tömböt tartalmazott. A felső tömbbe nyolc, egymással antiferromágnesesen csatolt vas réteg tartozott, míg alul két erős ferromágneses csatolásban álló réteg volt. Ebben a modellben ismét nem lett figyelembe véve a véges rétegszámból származó effektus (előrevetítve: ez abban jelentkezik, hogy kis külső tér esetén a kollektív konfigurációt kell beírni, ami eltérést mutat a szigorú AF rendtől, nagy külső tér esetén pedig a szélső rétegek kihajlása különbözik jelentősen a többi réteg kihajlásától, és mindkét korrekció alapvetően befolyásolhatja az eredményt).

Az előbb vázolt 8+2 modellt a végesréteg-effektusok figyelembe-vételével finomítottuk, és sikerült egy ún. „9+1" modellel leírni a mintán elvégzett szinkrotron-Mössbauer-reflektometriai méréseket. Ezen modell előnye, hogy — fenomenológikusan — egzakt, vagyis a fenomenológikus szabadenergia-függvényt a számítógépes program segítségével egzaktul minimalizáltuk. Mivel összesen két különböző mágneses térben állt rendelkezésünkre mérési adat (0.4 T és 0.05 T), így további modellhangolás, finomítás nem volt lehetséges[3]. Azért sem tudtunk több paramétert bevezetni, mert a szimulációs program még nem épült be az illesztő programba, így az adatátvitelt — ideiglenesen — illesztett függvények formájában (lásd az A.3. függeléket) oldottuk meg. Ez azonban csak úgy működött, hogy egy lényeges paraméterünk volt.

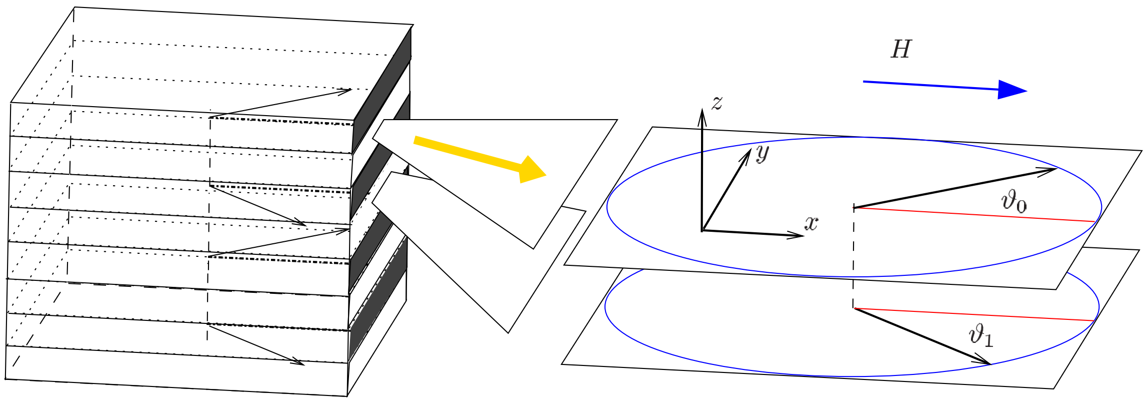
1.3. Fe/Cr minta

Egy négyfogású szimmetriával rendelkező Fe/Cr mintán is elvégeztük az egzakt számolásokat. Mivel ez egy még folyamatban lévő méréssorozat, így nem állt rendelkezésre pontos információ az anyagi paraméterekről (anizotrópiatag és csatolási állandó nagysága), ezért jelenleg nem dönthető el biztosan, hogy az általunk javasolt fenomenológikus modell valóban leírja-e a kimért spin-flop valódi természetét. Ennek ellenére a modellszámításunk alapján kérésünkre elvégzett VSM mérésből úgy tűnik, hogy sikerült az anizotrópia-energiára egy felső becslést adni. Pontosabban az $A/|J|$ arányra, ahol A egy mágneses réteg effektív anizotrópia-energiája, J pedig két réteg közötti effektív csatolási állandó ($J < 0$). A jövő feladata, hogy a Fe/Cr mintán elvégzett neutron-reflektometriai méréseket pontosan illesszük.

[3] Nem vettük figyelembe például a bikvadratikus csatolás lehetséges következményeit.

2. fejezet

Végesréteg-effektusok



2.1. ábra: Két-alrácsos modell és az általunk használt koordináta-rendszer. A világos élű — rétegen belül ferromágnesesen csatolt — rétegek antiferromágneses csatolását biztosítják a sötét élű (nem mágneses) távtartó rétegek. A kinagyított ábrán egy tipikus két-alrácsos konfigurációt látunk.

Az általunk vizsgált vékonyréteg-szerkezetek szabadenergia-függvénye nagyon hasonlít a tömbi antiferromágnesek szabadenergia-függvényére. Ezért néhány számolás a mi esetünkben is helytálló, illetve összehasonlítható. Lényeges különbség azonban, hogy a vékonyrétegeknél egy-egy makroszkópikus réteg van antiferromágneses csatolásban a következővel, és nem az egyes szomszédos atomok, azaz más az „alanyok" nagyságrendje. Ezért például várható, hogy eltűnik a könnyű irányú (párhuzamos) szuszceptibilitás ($\chi_{\shortparallel}$)[1]. Antiferromágneses rendszer esetén kis külső mágneses térben a szomszédos rétegek momentumai rendre párhuzamosak, illetve szemben állnak a gerjesztő térrel. Mivel ezt az állapotot az anizotrópia stabilizálja, adott nagyságú mágneses térig ez az alapállapot, ennél nagyobb térben a momentumok a tér felé kihajlanak (ez a spin-flop jelensége). Ebből az is következik, hogy kis mágneses tereknél az eredő mágnesezettség nulla, vagyis eltűnik a könnyű irányú szuszceptibilitás.

A vékonyrétegek geometriájából következik (lásd a 2.1. ábrát), hogy a felírt szabadenergia-függvények egy dimenziósak, mert egy-egy homogén makroszkópikus réteget tekintünk „klasszikus" spinnek. A mi fenomenológikus megközelítésünkben az eredően mágneses (a 2.1. ábrán fehérrel jelölt) rétegek közötti csatolást vizsgáljuk, így a köztesrétegek nincsenek benne a modellben[2].

2.1. Koordináta-rendszer, konvenciók

A dolgozatban végig a mintáé a főszerep, ennek megfelelően a minta síkja az $x-y$ sík. A külső mágnesezettség ($\mathbf{H}$) mindig az x tengely mentén hat[3], a rétegek számozása nullával kezdődik, és „lefelé" nő (jobbsodrású

[1] Könnyű irányú szuszceptibilitáson az oly módon mért szuszceptibilitást értjük, amikor a külső mágneses tér párhuzamos az anizotrópia könnyű tengelyével. $\chi_{\shortparallel}$ alapállapotban atomi szinten is eltűnik, de $T > 0$ esetén a hőmozgás miatt az antiferromágneses atomi momentumok nem pont szemben helyezednek el, így lehet eredő mágnesezettségük.

[2] Szerepük nézőpontunkból csak a csatolás közvetítésére korlátozódik, és ezt jelölik az effektív csatolási állandók. A szakirodalomban nem-mágneses rétegként (non magnetic layer) hivatkoznak rájuk.

[3] Mivel modelljeinkben a réteg-mágnesezettségek a minta síkjában helyezkednek el, így $\mathbf{H}$ a gyakorlatban a külső mágneses tér $x-y$ síkban vett vetülete.

Állandó	leírása	mértékegysége
J	rétegközi effektív csatolási állandó	$\mathrm{J/m^2}$
A	effektív réteganizotrópia	$\mathrm{J/m^2}$
H	(külső) mágneses tér	A/m
B	mágneses indukció	T
M	területegységre jutó réteg-mágnesezettség	T·m
d	rétegvastagság	m
M_N	normált mágnesezettség	1
h'	redukált mágneses térerő	1

2.1. táblázat: A dolgozat során ezentúl használt mértékegységek. *Megjegyzések:* Mágneses indukciót gauss-ban is mérhetünk (1 G=10^-4 T), míg mágneses teret oerstedben is meg lehet adni (1 Oe=$\frac{10^3}{4\pi}$A/m). A mágneses vékonyrétegméréseknél az irodalomban mágneses térerőről (*magnetic field*) beszélnek, helyenként mégis teslában mérik, ekkor azonban az M területegységre jutó réteg-mágnesezettséget is ennek megfelelő mértékegységben [A] kell megadni. Vákuumban $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$, így pongyola fogalmazásban 1 Oe=1 G.

koordináta-tengelyt használva az $(n-1)$-ik réteg van az origóban). Az egyes rétegek momentumai ϑ_i szöget zárnak be a külső térrel ($i = 0, 1, \dots n-1$), ahol $-180° \leq \vartheta_i < 180°$. Amikor a rendszer anizotrópiát (A) tartalmaz, és kíváncsiak vagyunk a mágnesezettség szögfüggésére, akkor a mintát forgatjuk (ϑ).

2.2. Vizsgált szabadenergia-tagok, mértékegységek

Diplomamunkánk gerince egyszerű energia-minimaliázálás. Az adott problémához tartozó szabadenergia-függvény minimumait keressük, és ezen minimumok helyéből és paraméterfüggéséből vonjuk le következtetéseinket. A minimalizált szabadenergia egy-egy fizikai rendszerhez tartozik, így a mérésekkel való összevetés miatt pontosan tudnunk kell a tagok mértékegységét és nagyságát. Az elméleti cikkek általában csak a lényeges paramétereket veszik, és legtöbbször ‚elméleti' mértékegység-rendszerben számolnak. Egyes szerzők egyszerűen kG-ban határozzák meg az enegiát[19], míg mások teslában mérik a rétegek mágneses momentumát[27].

Jelen dolgozatban vékonyréteg-szerkezeteket tárgyalunk, így a szabadenergia-függvényben szereplő tagok a rétegekre jellemző energia-járulékok. Ennek megfelelően logikusnak látszik, hogy a mértékegységeket az egyes rétegekre normáljuk. A vékonyréteg-szerkezetek fontos tulajdonsága, hogy síkban homogének, így érdemes az egy területegységre (praktikusan $\mathrm{mm^2}$) eső energiát kiszámolni. Dolgozatunk során három tag járulékát vizsgáljuk, ezek rendre a momentumok magnetosztatikai energiája külső mágneses térben, az anizotrópiából adódó energia-járulék és a mágneses rétegek közötti csatolási együtthatók járuléka. Az első két tag tömbi — ennek megfelelően mértékegysége $\mathrm{J/m^3}$ —, míg az utóbbi — fenomenológikusan — felületi jelenség [$\mathrm{J/m^2}$]. Az antiferromágneses csatolást ugyanis a távtartó rétegek vastagságától függőnek találták, viszonylag függetlenül a mágneses rétegek vastagságától, ezért fenomenológikusan ez a járulék csak a vizsgált réteg felületének nagyságától függ.

A mértékegységek bemutatásához vegyünk egy olyan szabadenergia-függvényt, amely mindhárom tagot tartalmazza:

$$\mathcal{F}(\mathbf{H}) = -J\sum_{i=0}^{n-2}\frac{\mathbf{M}_i\mathbf{M}_{i+1}}{|\mathbf{M}_i\mathbf{M}_{i+1}|} - A\sum_{i=0}^{n-1} d_i\left(\mathbf{e}\frac{\mathbf{m}_i}{|\mathbf{m}_i|}\right)^2 - \mu_0\sum_{i=0}^{n-1}\mathbf{H}\left(d_i\mathbf{m}_i\right). \tag{2.1}$$

Itt $\mathbf{M}_i$ [A] az i-ik réteg-mágnesezettség felületegységenként, $\mathbf{m}_i$ [A/m] az i-ik réteg mágnesezettség-sűrűsége (térfogategységre jutó réteg-mágnesezettsége) ($\mathbf{M}_i = d_i\mathbf{m}_i$), d_i [m] az i-ik réteg vastagsága, $\mathbf{H}$ [A/m] a homogén külső mágneses tér, $J(<0)$ [$\mathrm{J/m^2}$] a felületegységre jutó antiferromágneses csatolási energia, $A(>0)$ [$\mathrm{J/m^3}$] a térfogategységre eső effektív anizotrópia-energia, $\mathbf{e}$ az anizotrópia[4] (egyik) könnyű irányába mutató egységvektor $\mu_0(= 4\pi\cdot 10^{-7}\mathrm{Vs/Am})$ pedig a vákuum permeabilitása. Látható, hogy a összegzési indexek 0-tól $(n-1)$-ig futnak. Ez felel meg a programunkban is használt konvenciónak. Lássuk akkor a mértékegységeket!

Az előző érvelés szerint szeretnénk, hogy egységnyi felületre (itt a minta síkjában lévő felületre gondolunk) eső szabadenergiát kapjuk, azaz $[\mathcal{F}]$=$\mathrm{J/m^2}$. (2.1) első tagja független a két szomszédos (egységnyi felületre eső) momentumtól, ahogy annak a fenomenológikus modell szerint lennie is kell. Ezek szerint $[J]$=$\mathrm{J/m^2}$. Az anizotrópia tömbi effektus, így a rétegvastagsággal lineárisan nő a felületegységre eső anizotrópia-energia, ezt

[4](2.1) egyenletben uniaxiális anizotrópiát vettünk.

vesszük figyelembe a hosszúság dimenziójú d_i szorzóval a második tagban. Az utolsó tagban szintén számít a teljes rétegvastagság.

Tovább egyszerűsödik a szabadenergia-függvény, ha kihasználjuk, hogy a legtöbb esetben a mágneses rétegek anyaga minden rétegre egyforma, azaz $\mathbf{m}_i = \mathbf{m}$. Az irodalomban talált legtöbb számítás szerint a rétegek vastagsága is állandó, azaz $d_i = d$. Ennek megfelelően $\mathbf{M}_i = \mathbf{M}$. Ezen egyszerűsítések elvégzése után a (2.1) egyenlet a következőképpen fog kinézni:

$$\mathcal{F}(\mathbf{H}) = -J\sum_{i=0}^{n-2}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - Ad\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2\vartheta_i - \mu_0 HM\sum_{i=0}^{n-1}\cos\vartheta_i, \tag{2.2}$$

ahol ϑ_i az i-ik mágneses réteg mágnesezettségének az x tengellyel bezárt szöge. Ez x-el párhuzamos külső mágneses térnek és könnyű tengelynek felel meg[5].

Amennyiben a mágneses momentumsűrűséget nem A/m-ben, hanem teslában mérjük[6], azaz $\mathbf{m}' = \mu_0\mathbf{m}$, továbbá ha bevezetjük az $A' = Ad$ mennyiséget, akkor

$$\mathcal{F}(\mathbf{H}) = -J\sum_{i=0}^{n-2}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - A'\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2\vartheta_i - HM'\sum_{i=0}^{n-1}\cos\vartheta_i. \tag{2.3}$$

Hogyha elhagyjuk a vesszőket, akkor el is jutottunk az irodalomban általánosan használt alakhoz.

Egyes szerzők az egyszerűsítés más útját választják. A külső mágneses teret teslában vagy kilogaussban mérik. Ez a mi szempontunkból annyit jelent, hogy ekkor a (2.2) egyenlet utolsó tagjában a μ_0 szorzót nem a mágneses momentumba, hanem a mágneses térbe olvasztják bele, azaz $H' = \mu_0 H$, ami pont a mágneses indukció és a mágneses tér vákuumban érvényes összefüggése, azaz $H' = B$. A dolgozat további részében — amennyiben nem megtévesztő — mi is az irodalomban használt ‚pongyola' jelölésmódot használjuk.

A dolgozat további részében az imént tárgyalt elméleti mértékegységek szerint fogunk dolgozni (lásd a 2.2. táblázatot).

2.3. Anizotrópia

A kristályszimmetriák kitüntetnek bizonyos mágneses irányokat. Kialakulásuk szerint megkülönböztethetünk többek között alak-, kristály-, felületi- és deformációs anizotrópiát. A vékonyfilmek anizotrópiájának részletesebb tárgyalása megtalálható [6] II. fejezetében.

2.3.1. Alak-anizotrópia

A momentumok közötti dipol-dipol kölcsönhatás szereti az atomi mágneses momentumokat a minta alakjának megfelelően rendezni. Rúdmágnes esetén ez okozza a mágnesezettség leghosszabb tengellyel való párhuzamosságát. Vékony filmek esetén az alak-anizotrópia megpróbálja a minta síkjában tartani a mágnesezettséget (így csökkentve a dipol-dipol energiát), ezt a továbbiakban mágnesezettség minta síkjában való rögzítésével vesszük figyelembe. Mivel az alak-anizotrópiához társuló energiának vékonyrétegek esetében a síkban fekvő momentumok esetén minimuma van, ezért nagyon nagy mágneses domének alakulhatnak ki (egydomén közelítés), hiszen a sík bármely iránya ekvivalens az alak-anizotrópia szempontjából, doménfalak létrehozása pedig energiát igényelő folyamat.

2.3.2. Kristály- és deformációs anizotrópia

A spin-pálya csatolás a spinek mágneses momentumait összekapcsolja a pályamomentummal és így a kristálytani tengelyekkel. Ugyancsak a spin-pálya csatolás felelős a deformációs anizotrópiáért, amit a mintában fellépő feszültségek okoznak. Vékonyréteg-rendszereknél gyakoriak a feszültségek a szomszédos rétegek élhosszaiban mutatkozó kis eltérések (*lattice mismatch*) következtében.

A dipol-dipol kölcsönhatás is függhet a mágnesezettség kristálytani irányokkal bezárt szögétől. Köbös kristályok esetén szimmetria-megfontolásokból kimutatható, hogy a dipol-dipol tagok összege eltűnik.

A vas csoport átmeneti fémeinek esetében nagyon fontos a pályamomentum kristályrácshoz való csatolódása. A részlegesen betöltött d-héjak a legkülső héjak, így erősen hat rájuk környezetük. A kristály szimmetriáját tükröző lokális elektromos tér erősen magához csatolja az elektronhéj pályamomentumát, a spin-pálya

[5] A minta elfordulását ϑ szögváltozó bevezetésével vehetjük figyelembe, és ekkor az anizotrópia energia járuléka az alábbiak szerint módosul: $-Ad\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2(\vartheta_i - \vartheta)$.

[6] A mértékegység-rendszert, ahol a momentumsűrűséget tesla-ban mérik *Kenelly*-rendszernek nevezik ([4], 12. o.).

csatoláson keresztül pedig a spinmomentum is csatolódik a kristálytérhez. A kristály-anizotrópia tömbi effektus, azaz csak az adott rétegtől függ.

Tércentrált vas egykristály esetén az [100] irányok a könnyű mágnesezés irányai, az [110] és az [111] irányok pedig rendre a közepes és nehéz mágnesezési tengelyek. A kristály-anizotrópiából származó energiatagot a kristálytani tengelyek iránykoszinuszaival lehet kifejezni.

A kristály-anizotrópia hőmérsékletfüggő, ráadásul különböző tengelyek mentén különbözőképpen. Általában még a Néel hőmérséklet alatt eltűnik a rendszer kristály-anizotrópiája.

A vékonyrétegekben fellépő deformációs anizotrópia jelentősen nagyobb lehet, mint a kristály-anizotrópia. Ez azt jelenti, hogy nem tökéletesen illeszkedő szomszédos rétegek esetén ezt a járulékot is figyelembe kell vennünk. Megfelelően vékony rétegek esetén a rácsállandók eltérését homogén feszültséggel hidalja át a rendszer, ekkor a deformációs csatolás független a réteg vastagságától. Egy d_c kritikus rétegvastagság felett azonban energetikailag kedvezőbb lesz diszlokációkkal csökkenteni a rácsállandók különbségéből eredő feszültséget. Ekkor a deformációs anizotrópia-energia $1/d$ szerint változik.

2.3.3. Felületi anizotrópia

Multirétegek esetén a felületek alacsonyabb szimmetriája erősen módosíthatja a spin-pálya járulékot, így létrehozva az ún. felületi anizotrópiát. Fenomenológikusan ez egy $E_s = K_s \cos^2 \Theta$ energiataggal vehető figyelembe, ahol Θ a film felületének normálisával bezárt szög, K_s pedig a felületi anizotrópia-állandó. Látható hogy ez a járulék is eltűnik a film síkjában lévő mágnesezettség esetén. Az egy rétegre jutó felületi anizotrópia $1/d$ szerint változik, ahol d a réteg vastagsága.

2.3.4. Effektív anizotrópia

Kísérleti szempontból az egy rétegre jutó effektív anizotrópia a lényeges. Ezen belül is jó tudni, hogy mekkor a tömbi és mekkora felületi járulék. Ezt különböző rétegvastagságú minták anizotrópia-állandóinak lemérésével tudhatjuk meg. A mérések során fel kell venni a mágneses hiszterézishurkokat könnyű és nehéz irányban és ezen mérésekből már kiszámolható az egy rétegre eső effektív anizotrópia. Különböző rétegvastagságokra elvégzett méréssorozatra már illeszthetjük az A_{eff} effektív anizotrópiát

$$A_{eff} = A_{tömbi} + 2\frac{A_{felületi}}{d}$$

alapján, ahol d a réteg vastagsága, $A_{tömbi}$ és $A_{felületi}$ pedig a tömbi és a felületi effektív anizotrópia-állandók. (A dolgozat további részében minden energiát felületegységre normálunk, vagyis ezentúl $A' = dA_{eff}$ felületegységre eső effektív réteg-anizotrópiát használjuk és a vesszőt is elhagyjuk $[A]$=J/m^2.

2.4. Végtelen közelítés: két-alrácsos modell

Először vizsgáljuk meg a tömbi közelítés néhány tulajdonságát, hogy később tudjunk mihez viszonyítani. A minimalizálandó szabadenergia-függvény mindkét esetben hasonló, csak végtelen közelítés esetén további mellékfeltételeket szabunk ki. Első modellünkben az egyszerűség kedvéért csak a rétegek közti antiferromágneses csatolást vesszük figyelembe. Legyen a rendszer szabadenergia-függvénye:

$$\mathcal{F}(H) = -J \sum_{i=0}^{n-2} \cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - HM \sum_{i=0}^{n-1} \cos\vartheta_i. \tag{2.4}$$

Itt J [J/m^2] a rétegek közti elsőszomszéd-csatolás (antiferromágneses esetben $J < 0$), H [A/m] a külső mágneses tér M [Tm] pedig a területegységre jutó réteg-mágnesezettség. (2.4) egységrendszere megfelel az elméleti számolásoknál használt normálásnak (2.2. fejezet, [15], [18]), a használt koordináta-rendszer pedig a 2.1. ábráról leolvasható (a külső mágneses tér az x tengely mentén hat[7].). Az egyenlet első tagja biztosítja az antiferromágneses alapállapotot[8], és az ebben szereplő J állandót az irodalomban bilineáris csatolási állandónak (*bilinear coupling constant*) hívják. A második tag a momentumok külső térrel történő kölcsönhatását írja le (a momentumokra ható forgatónyomaték energetikai megfelelője). A rétegek indexelése 0-val kezdődik, ezért az összegző index is mindig $n-1$-ig fut, itt n a rétegek száma.

[7] $H \in \mathbf{R}$. Ennek oka, hogy a külső mágneses tér kölcsönhatását leíró tag eredeti formája $\mathbf{HM}_i = |\mathbf{H}|\,|\mathbf{M}_i| \cos\vartheta_i$ és mivel $\cos(180° - \alpha) = -\cos\alpha$, így $H < 0$ ekvivalens a $-x$ tengely irányába mutató, $|\mathbf{H}|$ nagyságú mágneses térrel. A két esetet így sikerült egy egyszerű formulában összefoglalni.

[8] Ennek belátása roppant egyszerű, hiszen $J < 0$ esetén akkor kapunk minimumot, amikor $\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) = -1$ és ez pont $|\vartheta_i - \vartheta_{i+1}| = 180°$-nál következik be.

Könnyen kiszámolható (C.1. – 48. o.), hogy teljesen általános J_{ik} csatolási mátrix esetén is szimmetria-megfontolások miatt a (2.4) típusú rendszer eredő mágnesezettségének párhuzamosnak kell lennie a külső mágneses térrel. Páros rétegszám és periodikus határfeltétel[9] esetén a párhuzamosság legegyszerűbben úgy biztosítható, hogy két alrácsot veszünk, azaz:

$$\vartheta_{2i} \stackrel{!}{=} \vartheta, \quad \vartheta_{2i+1} \stackrel{!}{=} -\vartheta, \quad (i = 0, 1 \ldots, \frac{n}{2} - 1). \tag{2.5}$$

Pontosan ez az eset látható a 2.1. ábrán.

A (2.5) mellékfeltételeket beírva (2.4) egyenletbe kapjuk:

$$\mathcal{F}(H) = -2J \cos 2\vartheta - 2HM \cos \vartheta. \tag{2.6}$$

Ezt a közelítést hívjuk két-alrács közelítésnek. A $2\,J$ tényező onnan adódik, hogy minden ϑ_i pontosan kétszer szerepel a (2.4) egyenletben (a szélsők is, éppen a periodikus határfeltétel miatt). Ennek a rendszernek könnyen számolható a minimuma:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \vartheta} = 4J \sin 2\vartheta + 2HM \sin \vartheta \stackrel{!}{=} 0 \tag{2.7}$$

$$8J \sin\vartheta \cos\vartheta + 2HM \sin\vartheta = 0 \Rightarrow \begin{cases} \sin\vartheta = 0 & \rightarrow \vartheta = 0^\circ \\ 8J\cos\vartheta + 2HM = 0 & \rightarrow \boxed{\cos\vartheta = -\frac{HM}{4J}} \end{cases} \tag{2.8}$$

Mivel a cos függvény értékkészlete $[-1 : 1]$ intervallumba esik, ezért könnyen kiszámolhatjuk a telítési teret:

$$1 = -\frac{H_t M}{4J} \Rightarrow H_t = \frac{4\,|J|}{M} \tag{2.9}$$

H_t fölött pedig $\vartheta = 0^\circ$ (ferromágneses minimum). Egyszerűen adódik a rendszer mágnesezettség-függése a gerjesztő tértől:

$$M_{össz}(H) = M \sum_{i=0}^{n-1} \cos\vartheta_i = -Mn\frac{HM}{4J} = H\frac{nM^2}{4\,|J|} \tag{2.10}$$

Látszik, hogy a rendszer eredő mágnesezettsége lineárisan nő a külső mágneses térrel egészen a telítési mágnesezettségig. Ne felejtsük el, hogy jelölésrendszerünkben $J < 0$. Innentől a telítési mágnesezettségre normált mágnesezettséget fogjuk használni, mert különböző rétegszámú modelleknél ezt lehet jól összehasonlítani. Definíció szerint:

$$M_N = \frac{M_{össz}(H)}{M_{max}} = \frac{M_{össz}(H)}{nM} = H\frac{M}{4\,|J|} = h', \tag{2.11}$$

ahol bevezettük a $h' = H\frac{M}{4|J|}$ redukált külső mágneses térerőt. h' dimenziója 1. Ezt könnyen beláthatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy mértékegység-rendszerünkben a külső mágneses tér energia-járuléka felületegységenként **HM** ($\mathrm{J/m^2}$), ami pontosan megegyezik az antiferromágneses csatolás mértékegységével, így ezek mértékegység-hányadosa egy.

A két-alrács közelítés szabadenergia-függvénye is igen egyszerűen számolható. Helyettesítsük vissza (2.8) egyenletből $\cos\vartheta$-t (2.6) egyenletbe felhasználva, hogy $\cos(2\alpha) = 2\cos^2\alpha - 1$:

$$\mathcal{F}(H) = -2J\left(2\left(\frac{HM}{4J}\right)^2 - 1\right) + 2HM\frac{HM}{4J}. \tag{2.12}$$

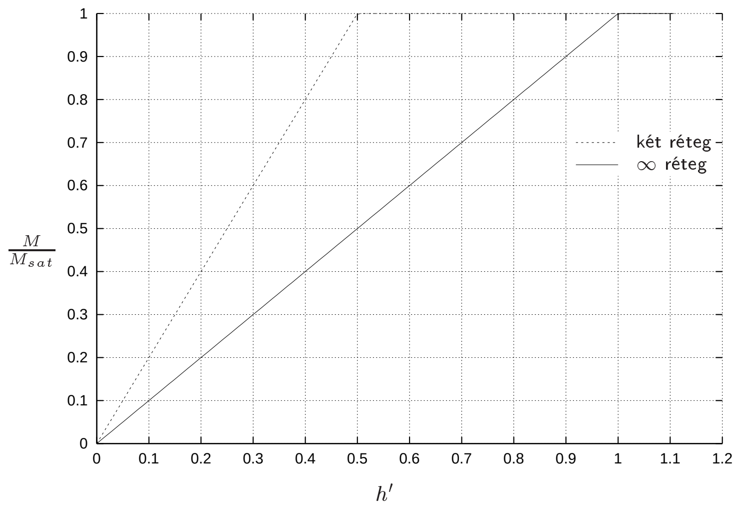
Elvégezve az összevonásokat kapjuk:

$$\mathcal{F}(H) = J\left(2 + \frac{1}{4}\left(\frac{HM}{J}\right)^2\right) \rightarrow \mathcal{F}(h') = 2J\left(1 + 2h'^2\right). \tag{2.13}$$

Ezek szerint az energia–külső tér függvény parabola[10] és figyelembe véve, hogy $J < 0$, lefelé áll.

[9] A periodikus határfeltételt egy $-J\cos(\vartheta_{n-1} - \vartheta_0)$ tag hozzáadásával biztosítjuk.

[10] Ennek így is kell lennie, hiszen a rendszer eredő mágnesezettsége pont a szabadenergia külső tér szerinti deriváltja, és az egyenes primitív függvénye a másodfokú függvény.



2.2. ábra: Az antiferromágneses véges rendszer elméleti burkolói

A periodikus rendszer hasznos szerepet tölthet a további véges modellek ellenőrzésénél, ugyanis ezek határesetben vissza kell, hogy térjenek a végtelen esetbe. Az imént felső becslést kaptunk a telítési mágnesezettség értékére[11]. Adható azonban egy alsó határ is. A végtelen rendszertől leginkább az összesen két spint tartalmazó rendszer tér el. Ennek szabadenergia-függvénye annyiban különbözik a (2.6) egyenlettől, hogy $2J$ helyett csak J szerepel. (Ez pont azt jelenti, hogy *nincs* periódikus csatolás.) Ekkor az előző gondolatmenet megismételve kapjuk, hogy a telítési mágnesezettség is fele akkora lesz. Most már megvan az a két határgörbe, amelyek között várjuk, hogy az adott véges rendszerünk mozogjon. A 2.2. ábrán látható görbék M=4 Tm és J=−1 J/m^2 választással készültek, azaz h'=H végtelen közelítésben[12].

2.5. Véges rendszer: csavart alapállapot

Amióta 1986-ban először sikerült két fém réteg között antiferromágneses csatolást kimutatni[9], rengeteg — fizikailag hasonlóan viselkedő — (periodikus) vékonyréteg-szerkezetet vizsgáltak. Azonban meglepően kevés figyelmet fordítottak arra, hogy a számolások során a „valódi" rendszereket használják, azaz figyelembe vegyék a rendszerek végességéből adódó effektusokat[13].

Amennyiben az eredeti (2.4) szabadenergia-függvényt minimalizáljuk, az első szembeötlő jelenség a periodikus határfeltétel hiányából ered. A rendszer új szabadsági fokait kihasználva, a két-alrácsos alapállapotnál kisebb energiájú, kollektív „módusú" alapállapotot is felvehet. Elemezzük is mindjárt az első szimuláció-sorozatot!

A 2.3. ábrán láthatjuk a különböző külső térhez tartozó alapállapotokat. A legfelső nyíl mutatja a külső (redukált) mágneses teret, hossza arányos a fölötte található mérőszámmal. Felülről a második nyíl a rendszer normált eredő mágnesezettségét mutatja. A réteg-mágnesezettségeket szintén egy-egy nyíl képviseli. A többi vonal a tájékozódást segíti. A vízszintes körívek $\vartheta = -180°$-tól a negatív félsíkban lévő momentumig tartanak, a függőleges segédvonalak rendre $\vartheta = -180°$, $-90°$ és $0°$-ban helyezkednek el. A külső mágneses tér az x tengellyel párhuzamos.

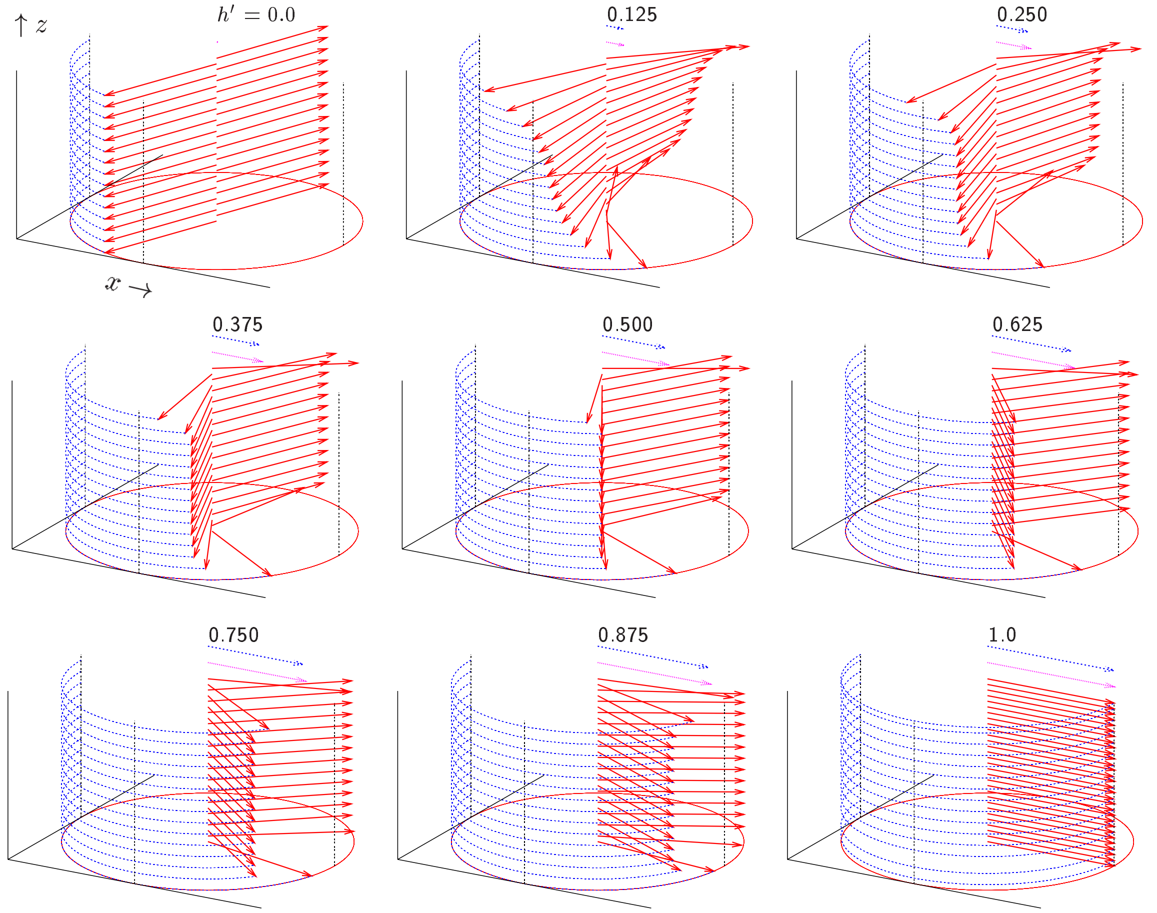
$h' = 0$-nál az alapállapot tisztán antiferromágneses, de külső tér hiányában nincs kitüntetett irány, így nem is tapasztalunk $[-90:90]$ beállást, azonban a legkisebb tér esetén is az x irány kitüntetett lesz, és a rendszer szimmetrikusan fog elhelyezkedni az x tengelyre (páros rétegszám esetén ezt S és O alakban tudja megtenni, ezeket rendre csavart és a hordó állapotnak nevezzük).

Az itt vázolt vizsgálathoz nagyon hasonló vizsgálatokat végzett Nörtemann és csoportja[18]. Az egyetlen különbség a két szimuláció között, hogy náluk a ferromágneses rétegek valóban több, ferromágnesesen csatolt rétegből álltak, de ettől az eredmények nem változtak, ugyanis az erősen ferromágnesesen csatolt rétegek teljesen együtt mozogtak, így Nörtemann és csoportja következtetései teljes egészében egyeznek ezen dolgozat

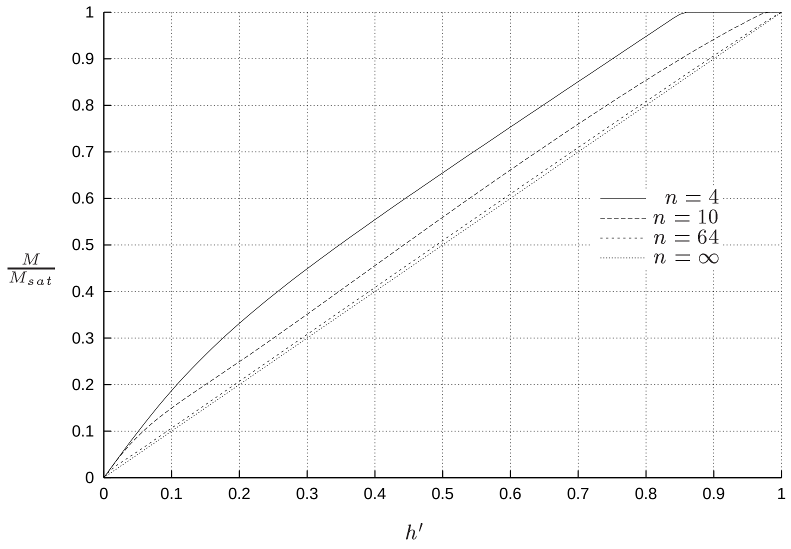
[11] Azért felső, mert ha bármely momentum gyengébben van csatolva a rendszerhez, mint az átlag (l. szélső momentumok), akkor hamarabb képes a külső mágneses tér felé fordulni.

[12] Pontosabban fogalmazva $h' = \xi H$, ahol $\xi = M/4\,|J|$ és az adott paraméter-választással $\xi = 1$ m/A.

[13] Magyarul: a legtöbb mérés-illesztés két-alrácsos modell(2.6) szerint — illetve megfelelő anizotrópiatagokkal kiegészítve — számol.



2.3. ábra: Vékonyréteg konfiguráció a redukált külső tér (h') függvényében (30 réteg esetén). A vékony szaggatott vonalak a tájékozódást segítik. A vastag nyilak ábrázolják a réteg-mágnesezettségeket, legfelül a redukált mágnese térnek megfelelő nyíl, alatta pedig a rendszer normált mágnesezettsége látható.



2.4. ábra: Véges rendszerek eredő mágnesezettsége a rétegszám függvényében. Látszik, hogy a végességből is következik egyfajta „konvexitás”.

következtetéseivel.

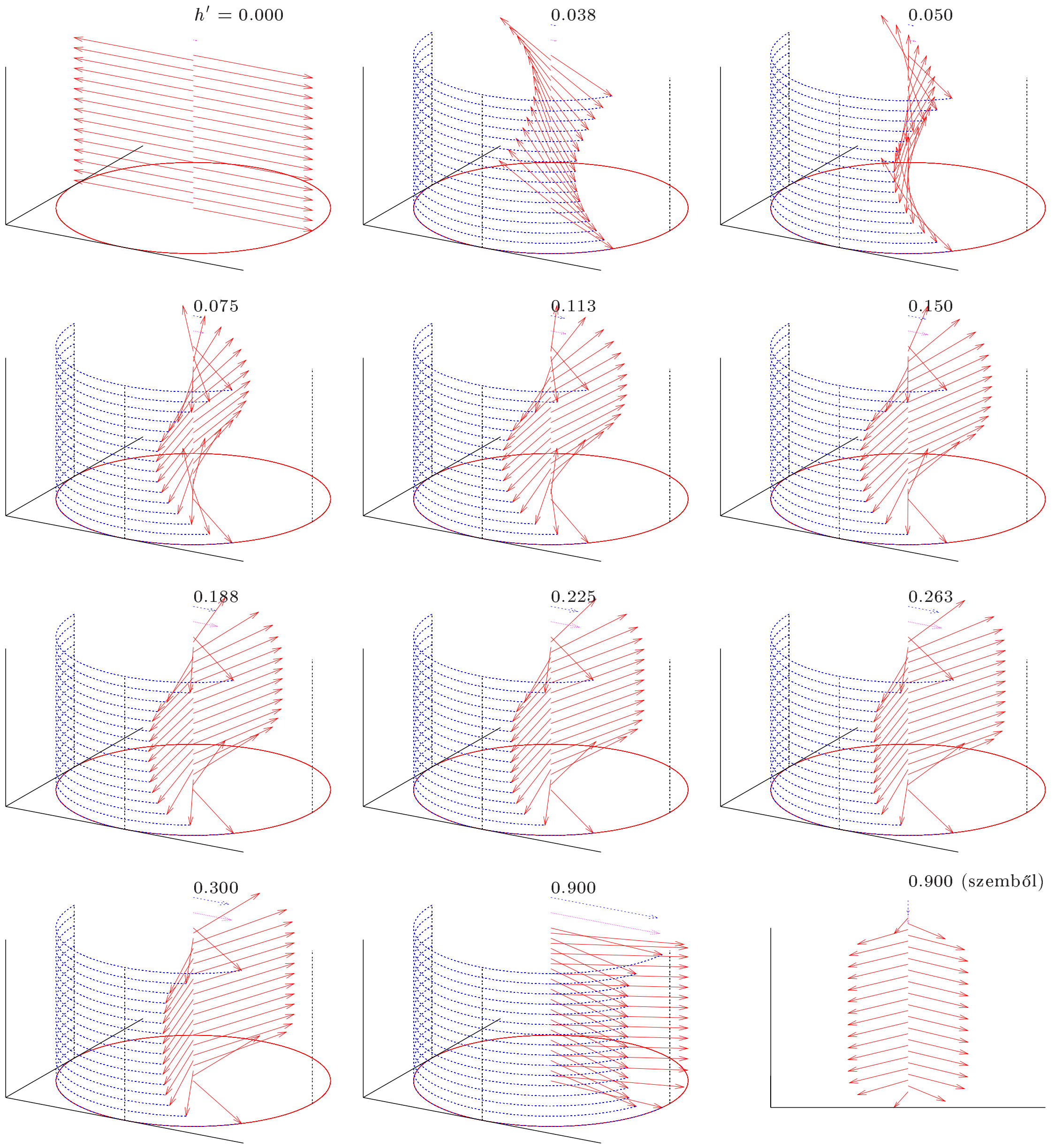
Az S szerkezet érdekes tulajdonsága, hogy eredő mágnesezettsége csak egy kicsit nagyobb, mint a két-alrácsos rendszer mágnesezettsége (2.4. ábra), ennek ellenére a szerkezet lényegesen különbözik a két-alrácsos V alaktól. Nagyon kis tereknél az egész rendszer eltér a tömbi esettől, míg később ez az eltérés a szélső rétegekre korlátozódik.

Fontos megjegyezni azonban, hogy a felső és alsó két-két réteg egészen a hordó alak eléréséig különlegesen viselkedik. Ennek oka, hogy a szélső momentumokat könnyebb beforgatni a mágneses tér irányába, aminek viszont az a következménye, hogy a második momentum lemarad (próbál „szögfelezőben” maradni). Nagy térnél megfordul a helyzet, és a második momentum megelőzi az átlagot. A két állapot között kell lennie egy olyan helyzetnek, amikor ezek a momentumok is pont a tömbi momentumoknak megfelelő szögben állnak. Könnyen kiszámolható, hogy valóban ez a helyzet, azaz létezik a rendszerhez egy olyan h' redukált külső tér, amikor csak a szélső momentumok sietnek a többiekhez képest, es ekkor az összes többi momentumpár ugyanakkora szöget zár be a külső mágneses térrel. A mozgóképeken ez egy falként jelentkezik (ebben az esetben igaz leginkább a két-alrács közelítés). A számolás lényege, hogy mivel csak elsőszomszéd csatolásunk van, így a két-alrácsos tömbi megoldástól való eltérést csak a szomszéd réteg-mágnesezettségek tudják közvetíteni. Amikor a második momentumok pont a két-alrácsos megoldásnak megfelelő szögben állnak, akkor az ő belső szomszédaik szabadenergia-minimuma is a két-alrácsos modellnek megfelelő szögeknél lesz.

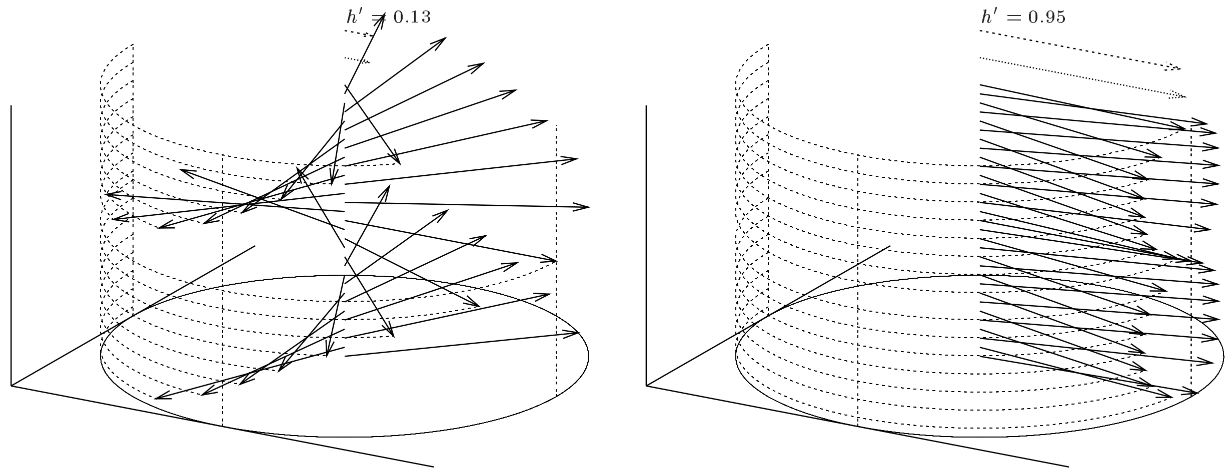
A szélső momentumok egzotikus viselkedését különösképpen figyelembe kell venni nagy felületérzékenységű módszereknél (pl. MOKE). Előrevetítjük, hogy a kis térben tapasztalható S viselkedést bármely anizotrópia vagy bikvadratikus csatolás megszüntetheti, azonban a nagy térnél jelentkező O eltérés független a többi paramétertől. Ennek oka, hogy a külső tértől lineárisan függő csatolási tag nagy terek esetén elhanyagolhatóvá teszi a többi, külső mágneses tértől nem függő tagot.

Érdemes megvizsgálni a rendszer szimmetriáját is. Páros rétegszám esetén a rendszer középpontjára való tükrözésre szimmetrikus. Vegyünk azonban egy páratlan rétegszámú rendszert (2.5. ábra)! Ekkor egyrészt már nagyon kis térben a rendszer [0:180] antiferromágneses alapállapotot vesz fel, mert most van kompenzálatlan eredő mágneses momentuma (a páratlan rétegszám miatt), ami inkább C-re hasonlít, mintsem S-re. Nagy térnél ismét a hordó állapotot (O) kapjuk, csak most alul és felül is ugyanazon az oldalon van a szélső momentum, így (alig láthatóan) aszimmetrikus az elrendezés.

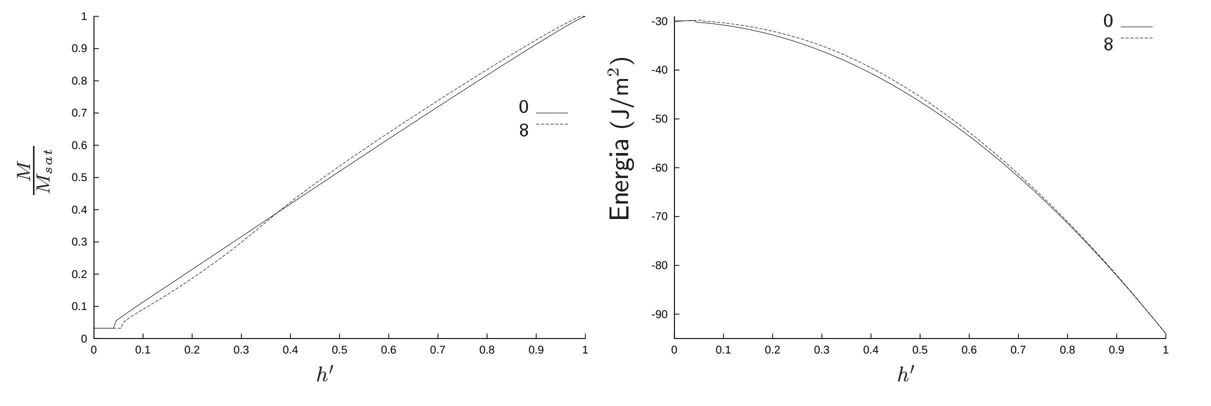
Van azonban több páros szimmetriát őrző megoldás is (l. a 2.6. ábrát)! Ez ugyan nem globális energia-minimum, az eltérése attól azonban nem jelentős, ahogy a 2.7. ábráról is leolvasható. Ebből is látszik, hogy véges rendszereknél sok energia-minimum van közel egymáshoz, és egyáltalán nem biztos, hogy a természet mindig megtalálja a globális minimumot!



2.5. ábra: Páratlan rétegszám ($n = 31$). A rendszer kompenzálatlan mágneses momentuma miatt nagyon kis tér esetén is határozott a rendeződés iránya. Növelve a külső teret a C kollektív gerjesztés lassan átalakul a páros rétegszámnál is látható V majd O alakra.



2.6. ábra: Páratlan rétegszám (31 réteg) esetén kialakuló lehetséges további konfiguráció. Érdemes megfigyelni a szerkezet-kettőződést. A szimulációs program által készített rajzfilmen jól látható, hogy ebben az állapotban a középső momentum végig mozdulatlan marad. Páros rétegszámnál is előfordulhatnak hasonló kettős, illetve többszörös szerkezetek.



2.7. ábra: A (2.6) megduplázódott szerkezet(8) mágnesezettség és energigörbéje összehasonlítva a globális minimummal(0) [l. még: 2.5. ábra]. A két állapot eltérésének relatív energia-különbsége a rétegszám növelésével csökken.

3. fejezet

Fe/FeSi

Az első minta, amin kipróbáltuk a programunkat, egy Fe/FeSi vékonyréteg szerkezet. Az eredményeket összehasonlítottuk a szinkrotron-Mössbauer-reflektometriai (SMR) mérésekkel, illetve felhasználtuk e mérések illesztésére. Megpróbáltuk a mintát a lehető legkevesebb paraméterrel leírni. Nem vettük figyelembe az esetleges anizotrópia és bikvadratikus tagokat, mivel azokról semmilyen mérés nem állt rendelkezésünkre, továbbá tapasztalatunk szerint adott határig nem befolyásolják jelentősen illesztési eredményeinket. A mintára ezentúl M1-ként hivatkozunk. M1 kíértékelése előtt tekintsük végig a folyamatot a minta elkészítésétől a különböző méréstechnikákig!

3.1. Vékonyrétegek előállítása

Filmeket rengeteg különböző módszerrel állíthatunk elő[5] (csak ízelítőül: párologtatással, ion-bombázással, maratással, elektrolízis segítségével stb.). Itt két növesztési módszerrel foglalkozunk részletesebben, a porlasztással és a molekula-epitaxiális növesztéssel (*Molecular Beam Epitaxy* – MBE). Az említett két eljárás során a filmeket ultranagy vákuumban ($< 10^{-7}$ Pa) párologtatják az előzőleg atomi simaságúra alakított hordozóra (szubsztrátra). Az atomok felvitelének egyik módja, hogy a forrásból elpárologtatott atomokat csapatják le a hideg hordozón. Úgy is nyerhetünk azonban szabad részecskéket, ha nagy energiájú ionokkal bombázzuk a forrást. Ekkor nem lehet annyira szabályozni a növekedés feltételeit.

A növesztett film fizikai tulajdonságait a modern berendezésekben *in situ* lehet vizsgálni. A leuveni egyetem Mag- és Szilárdtestfizikai Intézetében például többek között pásztázó alagútmikroszkóp (STM) segítségével követik nyomon a mintakészítés folyamatát. A készülő filmek fizikai tulajdonságai nagyban függnek a növesztés körülményeitől (szubsztrát szerkezete, növesztés hőmérséklete, sebessége, forrás–minta távolság, stb).

A minket érdeklő vékonyréteg-szerkezeteknél fontos volt, hogy a rétegek minél tökéletesebbek legyenek, ezért vagy Zerodurt[1], vagy MgO egykristályt használtunk szubsztrátként.

3.2. A mérési módszerek csoportosításáról

Mágneses rendszerek tulajdonságainak mérésére széles paletta áll rendelkezésünkre[4]. Ezek a módszerek ‚lokalitásuk' szerint két nagy csoportra oszthatók. Az első csoportba sorolhatók azok, melyek a különböző mágneses domének, rétegek információit „koherensen" adják össze. Itt koherencia alatt azt értjük, hogy megőrzik a relatív irányokat is (a fázis-információt), miközben egyszerre letapogatják az egész tartományt. Ilyenek a diffrakciós módszerek – jelen esetben a szinkrotronos Mössbauer-reflektometria és neutron-reflektometria. A második csoportba tartoznak az összegző típusú mérések. Ezekkel a minta egészéből nyerhetünk egy-egy mennyiség *átlagára*[2] vonatkozó információt. Ide soroljuk többek között a MOKE (Magneto Optic Kerr Effect), VSM (Vibrating Sample Magnetometry) és SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) mérési technikákat.

A szerkezeti kép megtartása különösen fontos az antiferromágneses és ferrimágneses rendszerek vizsgálatánál, hiszen ezeknél a második csoportba tartozó mérésekkel csak kvalitatív információk nyerhetők. Ennek oka, hogy a lokálisan rendezett mágneses momentumok globálisan kiátlagolódnak és ezek az összegző mérések csak ezt az átlagot látják.

[1] Atomi simaságú, röntgenoptikai célra kifejlesztett üveg, görbületi sugara nagyobb, mint egy kilométer.
[2] A mérési eljárástól függően az egyes tartományok súlyozása eltérő lehet.

3.3. Globális módszerek

Röviden tekintsük át a felhasznált összegző méréseket [4] alapján. Ezek a mérések ugyanis nélkülözhetetlenek a vékonyrétegminták kvalitatív megismeréséhez. A minta alapvető tulajdonságait (pl. telítési tér nagysága, remanencia, szuszeptibilitás) ezekkel a mérésekkel érdemes meghatározni. Ezen globális paraméterek függvényében segítenek a lokális módszerek a minta szerkezetének részletes megértésében.

3.3.1. VSM

A Vibrating Sample Magnetometry kis méretű minták eredő mágnesezettségének mérésére alkalmas. Előnye, hogy közvetlenül a mágnesezettséget méri, hátránya (mint minden nem koherens módszernek), hogy csak az eredő mágnesezettséget lehet megállapítani vele, ezért például a spin-flop átmenetről csak kvalitatív képet tud adni.

A VSM lényege, hogy a kis mintát rezgetjük a mágneses térben és mérjük egy adott térrész fluxusváltozását. A fluxusváltozás a minta eredő mágnesezettségével arányos. A mért jel amplitúdója pedig a fluxusváltozással lesz arányos.

3.3.2. MOKE

Mágneses momentummal rendelkező anyagok megváltoztatják a rajtuk áthaladó, illetve a róluk visszavert fény polarizációját. Visszavert fény esetén Kerr-effektusról beszélünk. A MOKE (Magneto Optic Kerr Effect) eljárás lényege, hogy méri a felszínről visszavert, eredetileg lineárisan polarizált lézerfény polarizációját. A polarizáció megváltozásából (elfordulásából) tudunk következtetéseket levonni a minta szerkezetére. A MOKE felületérzékeny mérési eljárás, mert a lézerfény csak a felső néhány „klasszikus” momentumról ad információt. VSM mérésekkel összevetve segít elkülöníteni a felületi effektusokat a tömbi jelenségektől.

3.3.3. SQUID

A SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) eszközök nyújtják a legjobb felbontású mágneses mérési eljárást. A SQUID egy szupravezető gyűrű, amelyben vékony szigetelő réteg (Josephson átmenet) található. Ha nem lenne a szigetelő réteg, akkor a gyűrű szupravezető állapotában bezárná a rajta keresztülhaladó mágneses fluxust. A Josephson átmenet révén azonban mégis képes a gyűrűben lévő mágneses fluxus változni a külső térnek megfelelően, ám jó közelítéssel csak $\Delta\Phi = 2.067 \cdot 10^{-15}$ Wb fluxuskvantumonként. A változással járó feszültségugrást lehet mérni, vagyis számolni lehet a gyűrűben lévő „fluxusvonalak” számát.

3.4. Szinkrotron-Mössbauer-spektroszkópia

A szinkrotronsugárzás anyagtudományi célra történő felhasználása új távlatokat nyitott a nanoszerkezetek kutatásában. A ma már rutinszerűen alkalmazott szinkrotron-Mössbauer-spektroszkópia egyik ága, a szinkrotron-Mössbauer-reflektometria (SMR) igen hasznosnak bizonyult vékonyrétegek vizsgálatára nagy mélységszelektivitása és diffrakciós jellege miatt.

3.4.1. Radioaktív forrással végzett Mössbauer-spektroszkópia

A hagyományos Mössbauer-spektroszkópia (visszalökődés-mentes nukleáris rezonancia-abszorpció) lehetővé teszi a rezonáns magok hiperfinom terének, illetve térváltozásainak pontos mérését. A mérés során a rendszer különböző — a hiperfinom térrel összefüggésben lévő — fizikai paraméteréről (izomér eltolódás, kvadrupólus felhasadás, mágneses felhasadás stb.) nyerünk információkat. Ezek az adatok a rezonancia-spektrum szerkezetében jelentkeznek. Ez a spektrum hagyományosan egy beütésszám görbe a rezonáns magot gerjesztő γ-foton energia-változásának függvényében. Mérési eljárása válogatja, hogy milyen másodlagos effektusok alapján határozzuk meg a hiperfinom tér szerkezetét, de a különböző mérési technikákban közös, hogy a rezonáns magokat γ-fotonokkal gerjesztjük. A gerjesztő foton energiájának finomhangolásával lehet ezek után letapogatni a minta hiperfinom-tereloszlását. A finomhangolást a hagyományos esetben mm/s−cm/s sebességtartományban működő mozgatóegységek végzik, felhasználva a fotonok frekvenciájának Doppler-eltolódását.

A gerjesztett atommagok adott felezési idővel (^{57}Fe esetén $t_{\frac{1}{2}}$=141 ns) lebomlanak, és közben γ-fotonokat emittálnak. Ezek a γ-fotonok a mintában további kölcsönhatásokban vehetnek részt. Detektálhatjuk például a mintából kilépő konverziós elektronokat (konverziós-elektron-Mössbauer-spektroszkópia – CEMS).

3.4.2. A Mössbauer-spektroszkópia mélység-szelektivitása

A hagyományos mössbauer-spektroszkópiai méréseknél a mintáról tömbi információk nyerhetők. Általában transzmissziós technikával történik a mérés, azaz a mintán *keresztül*. Amennyiben szeretnénk kontrolláltan mélységszelektív (nm-es felbontással) méréseket végezni (ami a vékonyréteg-szerkezetek megértéséhez például kulcsfontosságú), úgy súrolóbeesésű geomteriai elrendezésben kell mérnünk[3]. Súrolóbesesésen azt értjük, hogy a mintára kis Θ szögben (tipikusan 1-10 mrad) beeső és a felületről reflektált γ-sugárzást vizsgáljuk. A szabályozható mélységszelektivitás oka a teljes visszaverődés jelensége, ugyanis az anyagok vákuumra vonatkoztatott röntgen-törésmutatója egynél valamivel *kisebb* ($\sim 10^{-5}$-nel). A teljes visszaverődés szögének (Θ_c) közelében a γ-sugarak behatolási mélysége erősen függ Θ-tól. Megfelelő Θ választással így akár a minta legfelső néhány nanométeres tartománya is vizsgálható. Növelve a súrolóbeesés szögét, nő a behatolási mélység, majd a teljes visszaverődés Θ_c határszögét túllépve gyorsan csökkenő reflektált intenzitást tapasztalunk.

Az előző bekezdésben említett mélységfelbontást azonban csak jól definiált beesési szög esetén érhetjük el. Hagyományos forrás esetén így a teljes tértartománynak mindössze $10^{-5} - 10^{-6}$ részét tudjuk felhasználni. Szinkrotronos γ-forrás esetén azonban nincsen ilyen problémánk.

3.4.3. Szinkrotron mint sugárforrás

A Mössbauer eljárás alapja, hogy egy adott (általában ^{57}Fe) magot gerjesztünk γ-foton segítségével. A hagyományos Mössbauer méréseknél ezen foton forrása egy a mintáéval megegyező radioaktív izotópot (illetve annak anyaelemét) tartalmazó sugárforrás. A szinkrotronok megjelenése lehetővé tette új γ-forrás alkalmazását.

A szinkrotronban ultra-relativisztikus sebességgel körpályán keringő részecskék (főleg elektronok és pozitronok) által sugárzott „fehér" elektromágneses spektrumban megtalálható a mag-átmenetek gerjesztéséhez szükséges frekvenciatartomány is (a szinkrotronsugárzás spektruma folytonos a távoli infravöröstől a kemény röntgen tartományig). Technikai nehézséget az első méréseknél éppen a nagy intenzitású háttér kiszűrése jelentette. Erich Gerdaunak[10] és munkatársainak 1984-ben sikerült elsőként kimutatniuk a szinkrotronsugárzás rezonancia-szórását az ^{57}Fe mag 14.41 keV energiájú és 4.66 neV természetes szélességű átmenetén. Azóta a szinkrotron-Mössbauer-spektroszkópia külön tudományterületté nőtte ki magát és mára eljutott a a rutinszerű alkalmazásig.

A szinkrotronos mérések forrása a térben, időben, energiában és koherenciában is „kollimált" nyaláb, illetve impulzus. A szinkrotronsugárzás ideális Mössbauer mérések végzésére, ugyanis nagy intenzitású (fényességű), jól meghatározott (a szinkrotrongyűrű síkjában lineárisan polarizált) sugárzás. A fehér spektrumból a megfelelő neV-os energia-tartományt többfokozatú szűrőrendszerrel választják ki. Az előmonokromátor egy viszonylag szélesebb energia-tartományt enged át, a precíziós (vég)monokromátorok választják ki a méréshez megfelelő frekvenciatartományt.

Az időbeli kollimáltság azt jelenti, hogy a szinkrotronsugárzás pulzált (*single bunch* üzemmódban például egyszerre egy részecskecsomag kering a gyűrűben). Ez a gyakorlatban 0.1 ns körüli impulzust jelent, amit a csomagok számának függvényében $100 - 2000$ ns-nyi szünet követ. A SMR mérésekhez minél hosszabb periódusidő kívánatos, mert különben egymásra rakódnak az egymást követő maggerjesztések bomlásgörbéi.

Az energiasáv kiválasztásánál fontos megjegyezni, hogy a legérzékenyebb monokromátorokkal sem lehet a hiperfinom kölcsönhatás nagyságrendjét megközelítő energieloszlású nyalábot kivágni[4], de ezeknél a méréseknél nem is ez a cél. Az energiaszűrés a detektorok és a mérési összeállítás leterheltségét csökkenti. A mérések során a beérkező koherens sugárzás *egyszerre* gerjeszti az összes magátmenetet, és azok koherens bomlását tanulmányozzuk. Az így kapott spektrum a hagyományos spektrum „Fourier-transzformáltja".

SMR mérések esetén a minta felületére súroló szögben eső nyaláb spekuláris reflexióját vizsgáljuk.

3.4.4. Prompt szórás

A beérkező elektromágneses sugárzás kölcsönhat a minta elektronjaival és az atommagokkal is[5]. Az elektronikus szórási folyamat gyakorlatilag prompt. A szórt fotonok óriási intenzitása miatt azonban a késleltetett fotonokat a gerjesztés végét követő $8 - 10$ ns-os időben nem látjuk a mérőberendezések holtideje miatt. A szórt prompt nyaláb útjába helyezett további detektorokkal azonban felvehető a minta röntgen-reflektogramja.

---

[3]CEMS mérés esetén is a felületközeli régiókat mérjük, ugyanis a konverziós elnyelődnek a mintában, így a ‚kiszabadulási' mélység tartományát érzékeljük. Azonban ez a mélység csak a minta fizikai paramétereitől függ, így azt nem tudjuk módosítani. A kilépő elektronok eneriájának mérésével növelhetjük a mélységszelektivitást (DCEMS), de ezen módszer mélységfelbontása még mindig 30-50 nm.

[4]A legjobb monokromátorok is $\sim$ 5meV felbontással rendelkeznek, míg a természetes vonalszélességek és hiperfinom felhasadások ennél még mindig rendre hat és négy nagyságrenddel keskenyebbek.

[5]Az atommagok közül csak a rezonánsakat képes gerjeszteni.

3.4.5. Nukleáris szórás

A prompt szóráson kívül késleltetett fotonokat is kapunk. Ezek forrása egyrészt a rezonáns magok koherens gerjesztéséből fakad, másrészt a nukleáris és az elektronikus szórás interferenciája is szerepel benne. Ez utóbbi interferencia fontos szerepet játszik abban, hogy a késleltetett fotonok kitüntetnek bizonyos szögeket. Az egyik kitüntetett szög a teljes visszaverődés szöge, ami fölött nem sokkal nukleáris totálreflexiós csúcs is megfigyelhető [13], [14]. A másik ilyen kitüntetett szögcsalád a szerkezeti és mágneses rendet tükröző Bragg-szögek iránya. Ezen csúcsok megléte lehetővé teszi, hogy jó statisztikájú mérési görbéket vegyünk fel.

3.4.6. SMR időspektrumok

Az SMR segítségével a minta mélységszelektív feltérképezése a hagyományos Mössbauer-reflektometriai módszereknél sok nagyságrenddel gyorsabb. A már említett Fourier-transzformáció miatt most a spektrumok idődoménben készülnek, a felhasadásokat pedig ún. kvantum-beat formájában látjuk. A mélységszelektivitás eléréséhez a totálreflexió szöge körül különböző súrolószögeknél kell felvennünk az SMR idő-spektrumokat, majd szimultán módon kiértékelni őket. Ez a szimultán kiértékelés lesz lehetséges az EFFI program [29] segítségével.

3.5. Az M1 minta szerkezete

J. Dekoster és J. Korecki által MBE-tecnikával növesztett minta különböző mérési adatai kerültek csoportunk által kiértékelésre. Az M1 minta Zeroduron növesztett 10 kettősréteg vas/vas-szilicid. A vas rétegek ^{57}Fe izotópból, míg a FeSi rétegek természetes vassal készültek. A vas rétegek egyenként 25.5 Å míg a FeSi rétegek 15.7 Å vastagságúak voltak. A mintanövesztés részletei és a mérési eredmények első kiértékelései megtalálhatók a [11] és a [12] cikkekben továbbá Deák László PhD dolgozatában[7].

Az M1-hez hasonló, de a FeSi rétegben ^{57}Fe-t tartalmazó mintán elvégzett konverziós-elektron-Mössbauer-spektroszkópiai (CEMS) mérés szerint a FeSi rétegek a metastabil CsCl szerkezetbe kristályosodtak, azaz Fe és Si köbös rácsok fél testátlóval eltolva alkották a szerkezetet. A Kerr-effektuson alapuló méréssel sikerült kimutatni a minta megjósolt[6] antiferromágneses viselkedését, de a rendelkezésre álló 0.35 T nagyságú tér nem volt elegendő a minta mágneses telítéséhez.

3.6. A szinkrotronnál elvégzett mérések és azok kiértékelése

Az általunk vizsgált Fe/FeSi mintát a grenoble-i ESRF ID18-as nyalábjánál mérte le csoportunk. A beérkező nyalábot az előmonokromátorok (két állítható Si(111) kristály) hangolja (a goniométerek forgatásával $6-30$ keV-ig terjedő energia-tartományból választhatunk. A nyaláb útja innen egy energia-kalibráló kamrába vezet, majd a behelyzett appertúrák a megfelelő méretűre szűkítik a nyalábot. Így jutunk el a nagyfelbontású (*channel cut*) monokromátorhoz, amely két egymásba ágyazott, függetlenül is forgatható szilicium egykristály alkot. Ezen monokromátor sávszélessége 5 meV körüli. A nyaláb így érkzeik a mintára, majd onnan visszaverődve a detektorokba. (A mérés felépítéséről részletesen lásd a [26] cikkben.) Az adott mérésnél egy-egy impulzus hossza kb. 200 ps volt, míg két impulzus között 300 ns idő telt el. A hangolható monokromátorok után a γ-fotonok a ^{57}Fe 14.413 keV-es átmenetére voltak hangolva.

A Fe/FeSi mintát Deák László értékelte ki saját fejlesztésű optikai rutinja és a MOSFUN[28] kiértékelőprogram segítségével ([7] 6.2.6. fejezet). Jelen dolgozat szerzője a végesréteg-effektusokat is figyelembe vevő modell megalkotásával járult hozzá egy fizikailag helyesebb kiértékelés megvalósításához. Az eredeti modellekben ugyanis az antiferromágnesesen csatolt rétegek egymással szigorúan szemben álltak (mintha az antiferromágneses csatolás végtelen nagyságú lenne).

3.6.1. A kiértékelések sorrendje

A vékonyréteg-szerkezet kiértékeléséhez először a röntgen-reflektometriai mérést kell illeszteni, innen számolható a rétegek elemi összetétele és vastagsága. Ezen ismeretek birtokában már kiértékelhetők a különböző szögeknél felvett időspektrumok, melyek a hiperfinom terekre vonatkozó információt — többek között a rétegmágnesezettségek irányát — tartalmazzák. A beesés szögének változtatásával a minta nem változik, azonban

[6] Chaiken *et al* mérései [24],[25] egyértelműen megmutatták, hogy a CsCl fázisú, Fe rétegek közé zárt FeSi fémes tulajdonságú, és a Fe/FeSi szerkezet a Fe/Cr szendvicsekkel analóg antiferromágneses tulajdonságokat mutathat.

a γ-fotonok behatolási mélysége igen. Ezért a kis szögnél felvett spektrum inkább a minta felületének mágnesezettségére érzékeny, míg a nagyobb súroló-szögnél felvett spektrum már a mélyebben fekvő rétegekből is szolgáltat adatokat.

Az M1 mintán felvett prompt szórásgörbének $\Theta = 11.7$ mrad-nál struktúrális Bragg-csúcsa volt, Továbbá $d_{össz} = 41.2$ nm teljes filmvastagságnak megfelelelő Kiessig oszcillációt[7] mutatott, $R_q = 0.89$ nm effektív felületi érdességgel[8]. A késleltetett magszórás tartalmazza a rétegkettőződés miatti antiferromágneses csúcsot (6.28 mrad-nál), ami a mágneses tér növelésével fokozatosan eltűnt. A mért görbéket viszonylag jól sikerült illeszteni az úgynevezett „8+2" modellel. Ebben a modellben a felső nyolc réteg szoros antiferromágneses csatolást mutat, míg a legalsó két Fe réteg lecsatolódik a többitől, és egymáshoz ferromágnesesen van csatolva.

A 8+2 modell finomított változatának szimulálása vált lehetségessé a diplomamunka során fejlesztett program által (a programról részletesebben lásd az A. függeléket – 42. oldal). Egyrészt numerikus úton egzaktul figyelembe vettük a végesréteg effektusokat, másrészt a rendelkezésre álló adatok felhasználásával megalkottuk a lehető legegyszerűbb, a jelenséget lényegében leíró modellt. Első lépésben ellenőriztük a tíz antiferromágnesesen csatolt réteget tartalmazó modellt, és kiderült, hogy ez a modell végesréteg-effektussal sem illeszthető konzisztensen a mért adatokhoz. A mérési adatokat sikerült ugyan többé-kevésbé fittelni, azonban a réteg-konfigurációkhoz tartozó mágneses terek aránya nagyságrendileg nem egyezett meg a mért külső terek arányával. Ezek után az ún. „9+1"-es modell következett, amivel sikerült fenomenológikusan megérteni a mérési eredményeket.

A 9+1 modellben a felső kilenc vas réteg egymással antiferromágnesesen volt csatolva, ám a tizedik, amely az üveggel közvetlenül érintkezett, lecsatolódott a rendszerről[9]. Hasonló rétegfüggő csatolást és lecsatolódást talált Kohlhepp és csoportja[22] Fe/FeSi rendszereken.

3.6.2. A szubsztrát felőli rétegek mágneses lecsatolódása

Kohlhepp és munkatársai 50 °C-on, ultranagy vákuumban ($p < 5\times10^{-5}$ Pa) üvegre porlasztott Fe/Si rétegeket vizsgáltak. A vas rétegek vastagsága 30 Å volt, míg a szilícium réteg vastagságát a különböző mintákban 8 és 40 Å között változtatták. Kisszögű röntgendiffrakciós mérések szerint a porlasztott Si atomok beleoldódtak a Fe rétegbe, B2 struktúrájú FeSi rétegeket létrehozva. Kohlhepp és munkatársai mintáinak fizikai felépítése így hasonló az általunk vizsgált mintáéhoz.

Kohlhepp és csoportja megmutatta, hogy a más szerzők által előszeretettel használt fenomenológikus bikvadratikus csatolás által produkált jelenségek[10] egy részét ebben a speciális esetben egy mélységfüggő bilineáris csatolás is képes produkálni. Mintáikat VSM-el lemérték, majd illesztették a következő két-alrácsos bikvadratikus tagot tartalmazó szabadenergia-függvénynek megfelelően:

$$(\varepsilon_K =)\mathcal{F}(H) = -J_1 \cos(2\vartheta) - J_2 \cos^2(2\vartheta) - HM\cos\vartheta. \tag{3.1}$$

Ez az egy rétegre jutó szabad-energia (végtelen közelítésben). A mért VSM görbéket sikerült megfelelően illeszteni a (3.1) modell szerint. Ez látható a 3.1. ábra felső részén.

Az üveg szubsztrátnak köszönhetően azonban a minta alján is lehetséges volt a mágnesezettség megmérése MOKE mérés segítségével. Az így kapott görbék láthatók a 3.1. ábra alsó felén. A mérésről jól látszik, hogy a szubsztrát felől a minta ferromágneses jelleget mutat. Ennek ismeretében a neutrond-iffrakciós méréseket mélységfüggő bilineáris csatolási állandóval és bikvadratikus tag *nélkül* értékelték ki. Illesztéseik során azt tapasztalták, hogy az alsó három réteg ferromágnesesen csatolódik, míg a felsőbb rétegere az antiferromágneses csatolás jellemző.

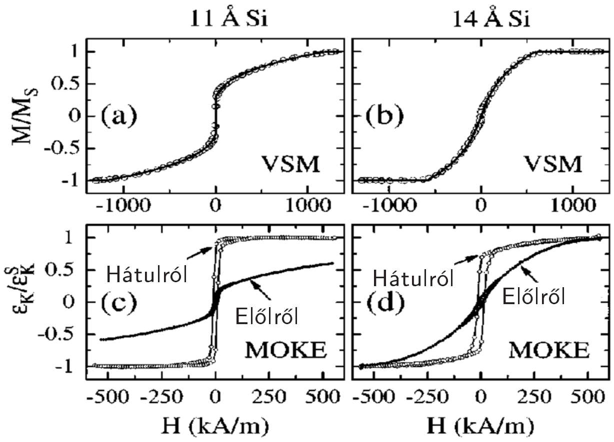
Csoportunk is üvegre növesztett mintával dolgozott, így kézenfekvőnek tűnt, hogy hasonló viselkedést várjon, mint Kohlhepp és csoportja az ő mintáiktól. Mivel azonban összesen két különböző mágneses térnél ($H_1 = 0.05$ T, $H_2 = 0.4$ T) történt értékelhető szinkrotron mérés (a harmadik mérésnél ($H = 0.95$ T) a minta már telítésben volt), így nem várható, hogy ennyi adatból teljesen feltérképezzük a csatolási állandók helyfüggését. Az is nehezítette dolgunkat, hogy jelen állapotában a szimulációs program még nem integráns része a többi kiértékelő algoritmusnak, így minden egyes modellhez új konverziós függvényeket kellett illeszteni. Ez a gyakorlatban azt jelentette, hogy adott modellhez (előbb a tíz antiferromágnesen csatolt réteg, majd a 9+1 modell) létre kellett hozni egy függvényt, ami a legfelső réteg mágnesezettségének szögéhez hozzárendeli az összes többi szöget (jelen esetben kilenc darabot). Átmenetileg ezt a szög-szög függvényekre illesztett

[7] A Kiessig-osszcilláció is a véges minta következménye, ugyanis ekkor nem csak Bragg-irányban kapunk reflexiókat, hanem attól kicsit eltérő irányokban is.

[8] A felületi érdesség a két réteg „diffúziós" sávja. A szinkrotronos mérések nem tesznek ugyanis különbséget egy z tengely mentén folytonosan változó anyagösszetétel, és az érdességből származó paraméter-változás (konkrétan: szuszceptibilitás változás) között. Ezért érdességnek a szuszeptibilitás-változás szélességét nevezik.

[9] A lecsatolódásnak különböző okai lehettek, amelyek a szubsztrát amorf szerkezetével hozhatók kapcsolatba.

[10] Az ideális hiszterézisgörbe egyenes szakaszok begörbülését (konvexitását) és az éles telítésbe futás lekerekedését. Részletesebben lásd a 6. fejezetben a 40. oldalon.



3.1. ábra: Normált hiszterézishurkok üvegen növesztett [30 Å Fe/11 Å Si]$_{20}$ (bal oldal) és [30 Å Fe/14 Å Si]$_{20}$ (jobb oldal) vékonyréteg mintákon. A mérések MOKE és VSM módszerrel történtek 295 K-en. A VSM görbére illesztett vonalak (a és b) $J_1 = -0.679$ és $J_2 = -0.398$ mJ/m^2 (11 Å Si esetén) illetve $J_1 = -0.504$ és $J_2 = -0.098$ mJ/m^2 (14 Å Si esetén). (Az ábra és a képaláírás [22] cikkből származik.)

polinomokkal[11] oldottuk meg. Ez viszonylag fájdalommentesen programozható volt a már létező[28] szinkrotron-diffrakciós kiértékelő-programba. További nehezítés, hogy a MOSFUN program nem volt képes egyszerre illeszteni a spektrumokat, az EFFI pedig még nem volt kész, így csak az antiferromágneses csúcsra történt illesztés, a többi mérés az itt nyert adatokkal lett szimulálva. Ennek ellenére a 9+1 es modell jól illeszkedik a mérési eredményekhez.

3.7. 9+1 modell

Az előző részekben már említett — M1 pontosabb illesztését lehetővé tevő — 9+1 modell nagyon egyszerű. Annyiban különbözik a naív antiferromágneses modelltől ((2.4) – 6. oldal), hogy a legalsó réteget lecsatoltuk, azaz a modell gyakorlatilag olyan, mint egy kilenc rétegből álló antiferromágnes, és az alján található egy független (ferromágneses) réteg. A gyakorlatban nagyon gyenge antiferromágneses csatolást alkalmaztunk a kilencedik és a tizedik réteg között, hogy a kis térnél bekövetkező mágnesezettség-ugrást folytonos görbével közelítsük. Azonban az illesztett tartományokban ettől a szögek értéke hibahatáron belül nem módosult. Az illesztéshez használt modell:

$$\mathcal{F}(H) = -J\sum_{i=0}^{7}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - J_{8/9}\cos(\vartheta_8 - \vartheta_9) - HM\sum_{i=0}^{9}\cos\vartheta_i, \tag{3.2}$$

ahol $J = -1$ J/m^2, $J_{8/9} = -0.062$ J/m^2, $M = 4$ A és ϑ_i az i-ir réteg külső H mágneses térrel[12] bezárt szöge ($[H]$=T). A (3.2) modellnek egyetlen lényeges paramétere van ($p = \frac{HM}{|J|}$, lásd C.1.1 – 48. oldal).

A 9+1 modell viselkedése szerencsés, ugyanis viszonylag nagy tartományokra a legfelső szög értéke egyértelműen meghatározta a többi szöget is. A kis (500 G) és nagyterű (4 kG) méréshez így két függvényhalmazt kellett előállítani, amelyek visszaadták a rendszer összes szögváltozóját (részletesebben lásd az A.3. függelékben a 45. oldalon). Ezen függvényeket beillesztve a minimumkereső algoritmusba, az automatikusan figyelembe veszi az eddig elhanyagolt végesréteg-effektusokat. A függvényátadás módszerének kidolgozása után már gyorsan sikerült illeszteni a modellt a mért adatokhoz.

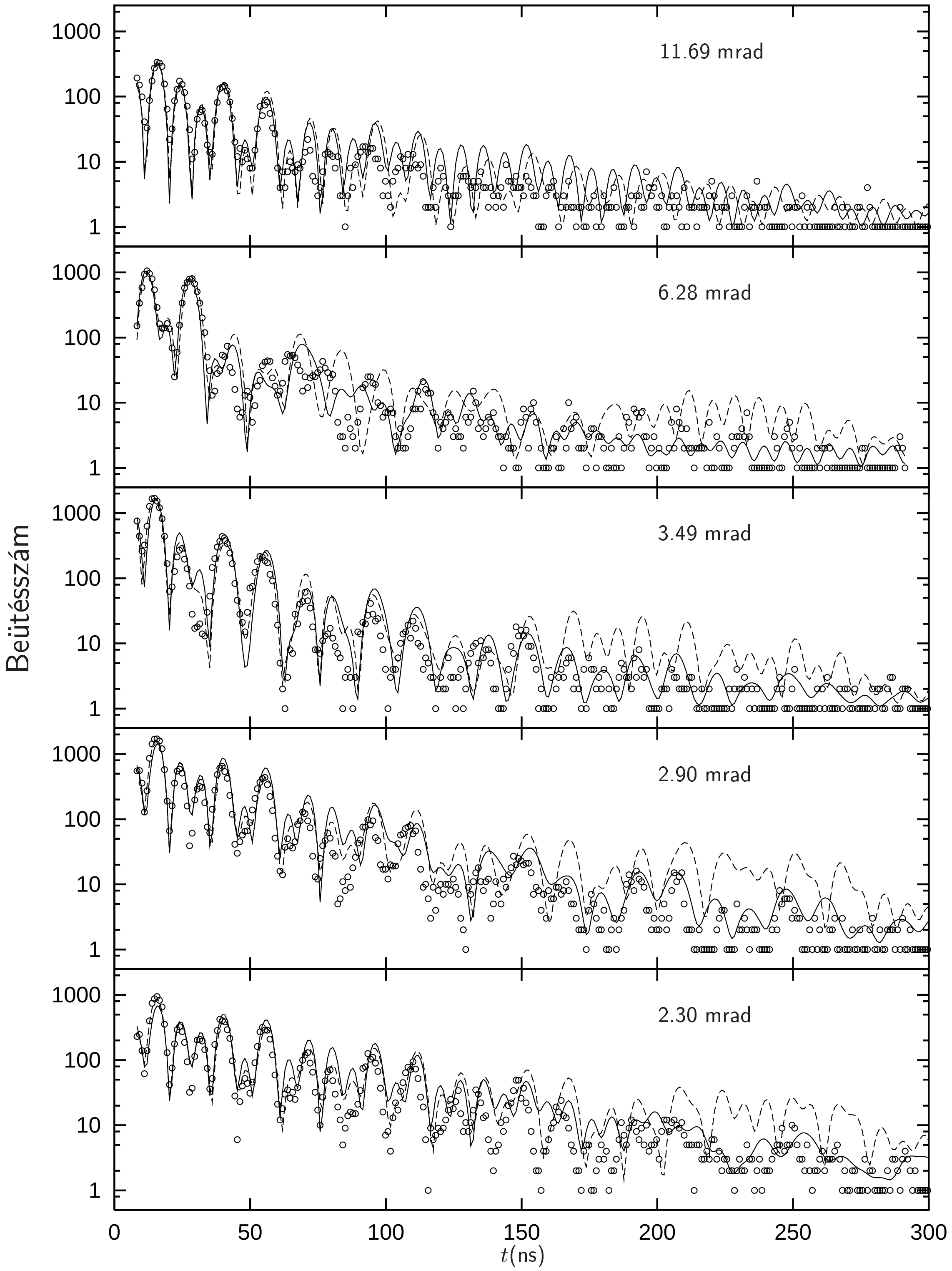
3.8. Mérési adatok illesztése

Az illesztett adatok a 3.2. és a 3.3 ábrákon láthatóak. Amint már említettük, a réteg-mágnesezettségi szögek illesztése csak az antiferromágneses Bragg-csúcsnál (ϑ=6.28 mrad) mért görbére történt, a többi az ennek megfelelő szögeknél történő szimuláció[13]. Ezzel együtt az összes ábrán jól látható az illeszkedés. Összehasonlításul

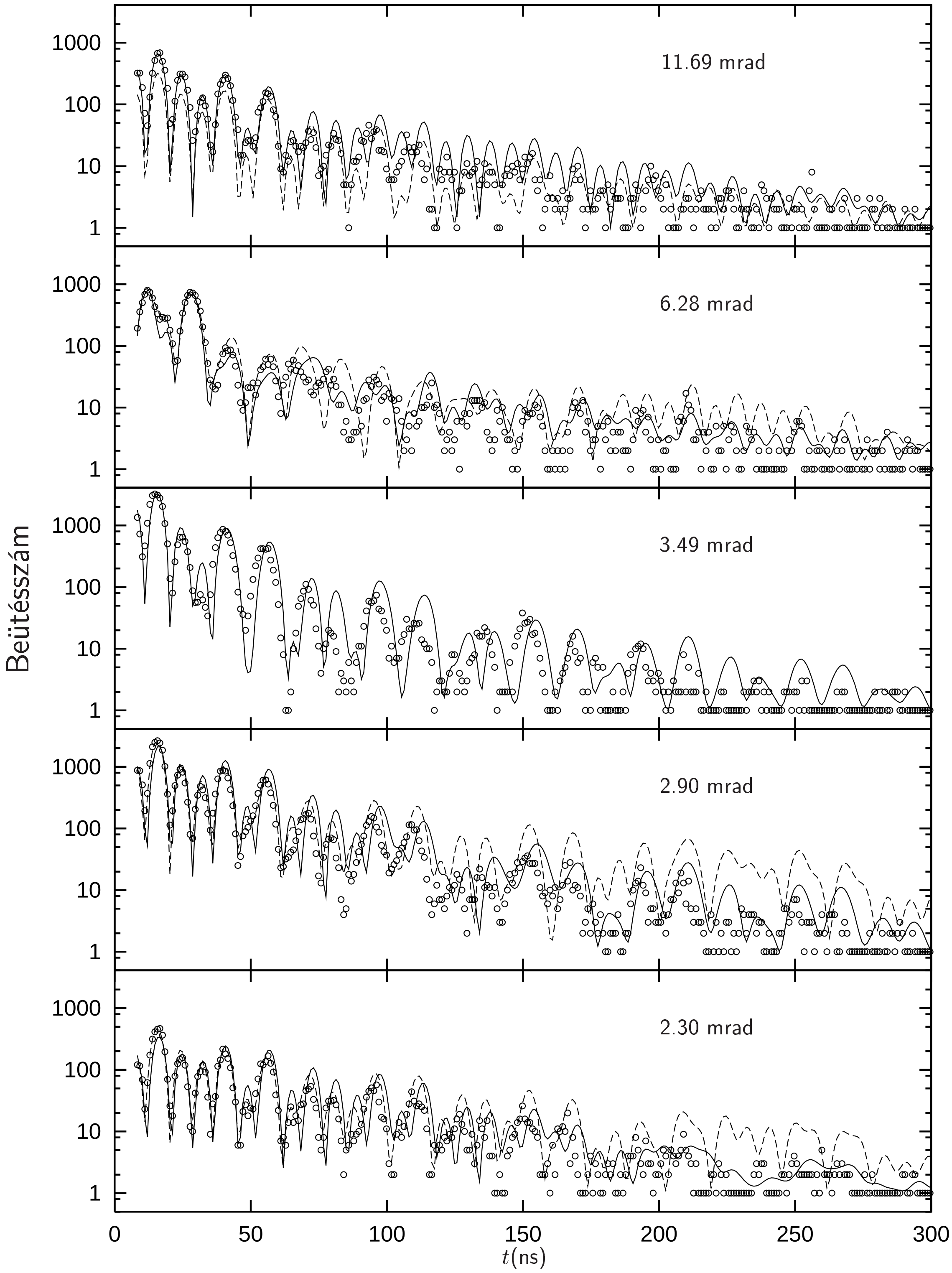
[11] Részletesebben lásd az A.3. fejezetet a 45. oldalon

[12] Szigorúan véve mágneses indukcióval (a mértékegységekről részletesen lásd a 2.2. fejezetet a 4. oldalon).

[13] „*Tapasztalataim azt mutatják, hogy AF periodikus multiréteg esetében az antiferromágneses Bragg-csúcsnál felvett spektrum a legérzékenyebb a hiperfinom mágneses tér irányára, ezért technikailag úgy jártam el, hogy ezt az időspektrumot illesztettem, a többit pedig szimuláltam*” [7] (89. oldal).



3.2. ábra: [^{57}Fe/FeSi]$_{10}$ multiréteg (M1) szinkrotron-Mössbauer-reflektometriai időspektrumai H=0.05 T külső mágneses térben, különböző beesési szögek esetén. Folytonos vonal jelöli a véges (9+1), míg szaggatott a 8+2 illesztést. Minimalizálás — a program adottságaiból fakadóan — csak a 6.28 mrad-hoz tartozó spektrumnál történt. A többi vonal szimuláció eredménye.



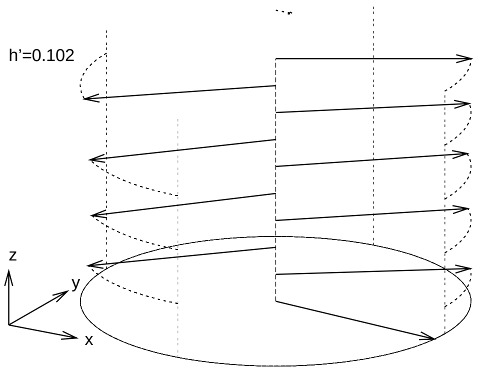
3.3. ábra: $[^{57}Fe/FeSi]_{10}$ multiréteg (M1) szinkrotron-Mössbauer-reflektometriai időspektrumai H=0.4 T külső mágneses térben, különböző beesési szögek esetén. Folytonos vonal jelöli a véges (9+1), míg szaggatott a 8+2 illesztést. Minimalizálás — a program adottságaiból fakadóan — csak a 6.28 mrad-hoz tartozó spektrumnál történt. A többi vonal szimuláció eredménye. (3.49 mrad-nál nem készült 8+2-es szimuláció.)

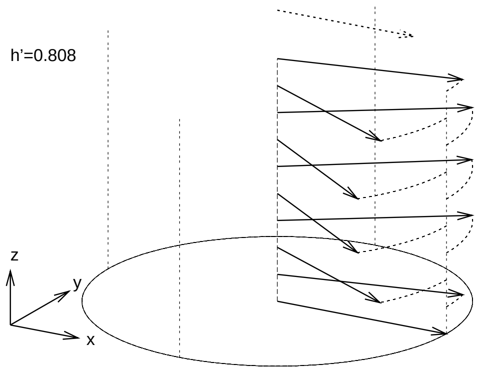
szög	rel. χ^2	(0.05 T)	rel. χ^2	(0.4 T)
(mrad)	8+2	9+1	8+2	9+1
2.90	83.69	48.26	118.99	96.74
2.30	58.54	34.40	23.62	21.19
3.49	25.12	26.44	67.99	66.72
6.28	*43.51*	*10.58*	*20.10*	*8.81*
11.69	12.59	8.77	32.02	27.25

3.1. táblázat: M1 SMR időspektrumainak (3.2., 3.3. ábrák) 8+2 és 9+1 modellekkel való illesztéséhez tartozó relatív χ-négyzet. Látszik, hogy az illesztett spektrumnál (6.28 mrad) a legkisebb a hiba. Az új, végesrétegszámításon alapuló 9+1 modell relatív hibái kisebbek, mint a merev antiferromágneses csatolásra épülő 8+2 modellé. A javulás az előbb említett ábrákon „szemmel látható".

	0.05 T	0.4 T
i	$\vartheta_i(°)$	$\vartheta_i(°)$
0	30.08	11.34
1	-138.08	-28.13
2	37.99	34.49
3	-131.78	-35.81
4	41.48	36.04
5	-130.06	-35.81
6	40.57	34.49
7	-133.50	-28.30
8	35.18	11.69
9	-5.73	-0.23

3.2. táblázat: A $[^{57}Fe/FeSi]_{10}$ rétegszerkezetnél használt 9+1 modell beállása kis és nagy külső mágneses tér esetén.





3.4. ábra: A $[^{57}Fe/FeSi]_{10}$ rétegszerkezetnél használt 9+1 modell beállása (a szimulációk szerint) kis és nagy külső mágneses tér esetén. Látható, hogy a modell jó közelítéssel teljesíti a $h'_1/h'_2 = 0.4/0.05 = 8$ arányt.

ábrázoltuk az eredeti 8+2 modell szerinti illesztéseket is. Jól látható, hogy a végesréteg-effektusokat figyelembe vevő illesztés jobb, mint az eredeti. Ez főleg a spektrumok vége felé nyilvánvaló. Az illesztés javulása megmutatkozik a relatív χ-négyzetek csökkenésében is. A relatív χ-négyzet definíciója:

$$\text{rel.}\,\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} \left(m_i - f(i)\right)^2}{n}, \tag{3.3}$$

ahol $i = 1 \ldots n$ a csatorna száma, m_i az i-ik csatornában mért értéke, σ_i a mérési pont hibája, $f(i)$ a modellfügvény értéke az i-ik csatornában.

A 3.1. táblázatból nemcsak jól látható hiba-csökkenés, hanem a még mindig nagy relatív hiba is kiolvasható. Ez egyrészt mutatja, hogy új modellünk közelebb áll a valósághoz, de még mindig nem elég részletes. Az is okozhatja a relatív hiba nagyságát, hogy csak az egyik szögértéknél illesztettünk. Ezt a most még tesztfázisban lévő EFFI (Environment For Fitting)[29] program segítségével lehet korrigálni. Az EFFI képes egy mintáról felvett több spektrum szimultán illesztésére. Az EFFI alkalmazhatóságnak további feltétele egy réteg-szimulációs kód EFFI-be integrálása, ami a már ismertetett módon előállítja a réteg-mágnesezettség konfigurációkat. Ezek még mind megvalósítandó feladatok.

Nem lenne teljes a fejezet, ha az illesztett rétegmágnesezettség-konfigurációt nem írnánk le. A 3.4. ábrán látható az a két rétegszerkezet, ami az előzőekben taglalt illesztéseket eredményezte. A réteg-mágnesezettségek külső mágneses térrel bezárt szögét a 3.2. táblázat tartalmazza. Végezetül megemlítjük, hogy a 9+1 modell konzisztens, azaz szimulációs illesztésből kapott külső mágneses terek aránya megfelel a mért külső mágneses terek arányának.

4. fejezet

Fe/Cr

A berlini Hahn-Meitner Intézet és a Leuveni Katolikus Egyetem Szilárdtestfizikai Laboratóriumának munkatársai[1] által preparált és ugyancsak általuk különböző módon lemért Fe/FeSi (továbbiakban M2) minta kiértékelésében igyekeztünk segítségükre lenni.

Célunk volt az M2 vékonyréteg-szerkezetnek a megértése az általunk készített program segítségével. Ezt a mintát tömbi spin-flop átmenet kimutatására tervezték, így a minta síkjában lévő négyfogású anizotrópia-tag biztosította a spin-flophoz szükséges energia-küszöböt. A spin-flop átmenete polarizált neutron-reflektometriával már igazolták. A mérés kvantitatív megértéséhez azonban szükség van megfelelő kiértékelésre. Ennek egyik első lépése a legegyszerűbb négyfogású anizotrópiával bővített modellel való illesztés.

4.1. Neutron-reflektometria

A neutronok elektromosan semleges részecskék, azonban spinnel rendelkeznek, így kiválóak a mágneses szerkezet letapogatására. Semlegességük révén az atomi elektrosztatikus terek nem befolyásolják mozgásukat (így könnyen áthaladnak a kondenzált anyagon), azonban az atomi mágneses momentumok kölcsönhatnak a neutronok spinjével, így — megfelelő geometriai feltételek teljesülése esetén — módosíthatják a neutronok spin-polarizációját. Anyagtudományi mérésekhez atomi-skálán (0.1 nm) kiterjedt neutronokra van szükség. A megfelelő de Broglie hullámhosszú neutronok 300 K körüli termikus neutronok (hullámhosszuk ≈ 0.18 nm). Forrásuk lehet spallációs forrás vagy atomreaktor.

Reflektivitás-mérés esetén a neutronnyaláb (akárcsak a fotonok – pl. röntgensugárzás) szóródik a mintán. A lassú neutron egyrészt az atommagokon szóródik, másrészt kölcsönhat a momentumokkal. A két effektus hatáskeresztmetszete közel egyforma, így a neutron-diffrakciós méréseknél a szerkezeti Bragg-csúcsokon kívül megjelennek a mágneses rendet tükröző szuperreflexiók is. Tömbi egytengelyű antiferromágnes esetében például a mágneses elemi cella élhossza kétszer akkora, mint a kristálytani elemi cella, így új, antiferromágneses csúcsok is megjelennek.

A neutronokat energia szerint is szét kell tudni válogatni, különben nem tudunk információt kinyerni a szerkezetre vonatkozóan. Egyrészt választhatunk monoenergiás neutronnyalábot, másrészt mérhetjük a detektorba érkező neutronok energiáját. Energiát time-of-flight (TOF) eljárással mérhetünk, ennek feltétele, hogy a forrás pulzált legyen és a detektor megfelelő időfelbontással rendelkezzen. Ekkor a beérkező neutronok repülési idejéből azok sebessége, és így energiája meghatározható.

4.2. Az M2 minta rövid leírása

MgO(100) egykristályra epitaxiálisan növesztett 20 pár Fe/Cr multiréteg, ahol t_{Fe}=26 Å, t_{Cr}=14 Å. A rácsállandó mindkét rétegre 2.88 Å. A vas ebben az elrendezésben négyfogású kristályszimmetriával rendelkezik, a szomszédos Fe rétegek antiferromágnesesen vannak egymáshoz csatolva. Könnyű irányban a minta telítési mágnesezettsége H_t=0.4 T.

[1] H. Fritzsche és H. Maletta (Hahn-Meitner-Institute, Berlin) és E. Kunnen, K. Temst, G. Verbanck, V.V. Moshchalkov, Y. Bruynseraede (Laboratory for Solid State Physics, Katholieke Universiteit, Leuven — Belgium)

4.2.1. A spin-flop folyamat

Külső mágneses tér nélkül a minta antiferromágneses konfigurációt vesz föl. Amennyiben a minta a mágneses tér bekapcsolása után a $[0:180]$ alapállapotot választja[2], úgy a külső $\mathbf{H}$ tér növelésével az adott M2 mintánál H_{sp}=20 mT körül bekövetkezik a spin-flop, azaz a kezdetben térrel párhuzamos momentumok hirtelen merőlegesek lesznek a külső mágneses térre. A spinflop reprodukálható, egyszerűen telítés után ismét le kell menni nullára a gerjesztő mágneses térrel, majd 90°-ban el kell fordítani a mintát. Ekkor a globális minimumban $[-90:90]$ spin-konfigurációból ismét a spin-flophoz szükséges $[0:180]$ konfigurációt állítottuk elő.

4.3. Az adott neutron-reflektometriai mérés

Az M2 mintán a polarizált neutron-reflektometriai mérésen (4.1. ábra) kívül végeztek MOKE és SQUID méréseket is. Ezeken a méréseken is látható az ugrás, ami itt a teljes mágnesezettség ugrását jelenti.

4.3.1. Szimuláció bikvadratikus taggal

A 4.2. ábrán egy bikvadratikus taggal bővített négyfogású anizotrópiát tartalmazó antiferromágneses modell szimulációja látható. A polarizált neutron-reflektometriai mérés[3] az antiferromágneses csúcson történt. Ekkor Adenwalla és munkatársai szerint[30] $I_{\mathrm{AF}}^{++} \sim \mathbf{a}_p^2$, $I_{\mathrm{AF}}^{+-} \sim \mathbf{a}_s^2$, $\mathbf{a}_p$ és $\mathbf{a}_s$ rendre a neutronok spinjével párhuzamos illetve arra merőleges neutronszórási hossz. Mivel polarizált neutron-diffrakciót számoló program nem állt rendelkezésünkre, naív modellszámítást végeztünk.

Az Eddy Kunnen és munkatársai által összeállított neutronos mérésben kezdetben a réteg-mágnesezettségek a külső tér irányába álltak. A beérkező neutronok spinje is párhuzamos volt a külső térrel. Ennek megfelelően $I^{++} = \max$ [beütés], míg $I^{+-} = 0$ [beütés]. A spin-flop után a réteg-mágnesezettségek mind merőlegesek voltak a külső térre, és így a neutronok spinjére is, ezért megfordult a helyzet. Ez tisztán látszik a 4.1. ábra kinagyított részletén. Tovább növelve a teret, csökken a merőleges komponens, így végül mind a két szórásamplitúdó nullához tart.

Az általunk készített illesztéshez értelmezni kellett az antiferromágneses szórási hosszt. Két-alrácsos modellben úgy járnak el[30], hogy a két vektort felbontják egy $\mathbf{M}_F$ ferromágneses és egy $\mathbf{M}_A$ antiferromágneses komponensre, azaz $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_F + \mathbf{M}_A$, $\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_F - \mathbf{M}_A$. Itt $\mathbf{M}_1$ és $\mathbf{M}_2$ a két alrács mágnesezettsége. Az előző felbontásban a ferromágneses komponens minden rétegben ugyanakkora, míg az antiferromágneses komponens rétegről rétegre alternál.

Az M2 minta $[0:180]$ állapotában nincs ferromágneses komponens, az antiferromágneses komponens pedig párhuzamos a külső térrel. A spin-flop után azonban lesz ferromágneses komponensünk (ami pont megegyezik a rendszer eredő mágnesezettségével), az antiferromágneses komponens pedig merőleges lesz a külső térre. Véges rendszerről lévén szó, nem használható a két-alrács közelítés, azonban első becslésként megfelelő, ha előjelhelyesen összeadjuk a merőleges rétegmágnesezettség-komponenseket, vagyis $a_s \sim \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^i \cos\vartheta_i$ $(a_s = |\mathbf{a}_s|)$.

A 4.2. ábrán látható görbe a_s^2. Mint már jeleztük, ezt végül is egy bikvadratikus tagot is tartalmazó modellel szimuláltuk. A modell szabadenergia-függvénye:

$$\mathcal{F}(H) = -J\sum_{i=0}^{n-1}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - B\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) + A\sum_{i=0}^{n}\sin^2 2\vartheta_i - HM\sum_{i=0}^{n}\cos\vartheta_i, \tag{4.1}$$

ahol a jelölésrendszer a szokásos, apró módosítással a külső mágneses tér mértékegységében ($[J]=[B]=\mathrm{J/m^2}$, $[H]=\mathrm{Oe}$, $[M]=\mathrm{Tm}$). A szimulációt telítési térből kezdve nullára csökkentett külső térrel végeztük. A bikvadratikus taggal bővített (4.1) szabadenergia behatóbb vizsgálata még a jövő feladata, ám a bikvadratikus tag nélküli alapeset is sok érdekes tulajdonságot mutat.

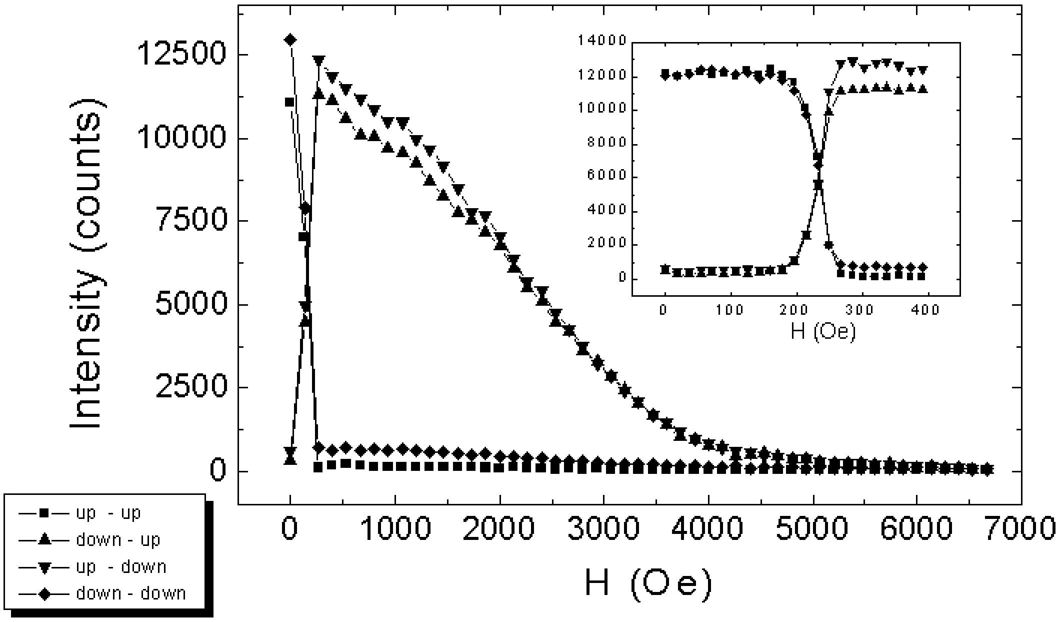
4.3.2. Az alkalmazott fenomenológikus modell

A tömbi spin-flop megértéséhez első közelítésben elhanyagoltuk a bikvadratikus-tagot és az alábbi szabadenergia-függvényt használtuk:

$$\mathcal{F}(H,\vartheta) = -J\sum_{i=0}^{n-1}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) + A\sum_{i=0}^{n}\sin^2(2(\vartheta_i - \vartheta)) - HM\sum_{i=0}^{n}\cos\vartheta_i, \tag{4.2}$$

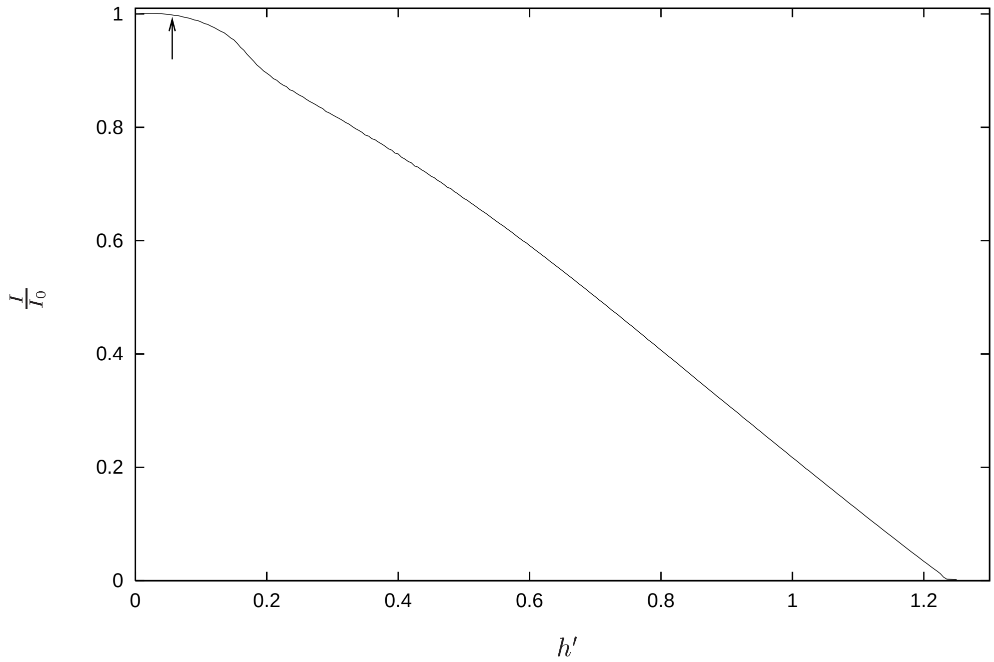
[2] Konvenciónk szerint a négyfogású anizotrópia könnyű irányai rendre a $\vartheta = 0, 90, 180, 270°$ irányok

[3] Ekkor a kezdetben (spin)polarizált neutronok polarizációját a reflexió után is mérik. Így összesen négy görbét kapnak: I^{++}, I^{+-}, I^{-+} és I^{--}. Az indexek a neutron szóródás előtti és utáni polarizációját jellemzik.



E. Kunnen, K. Temst, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium

4.1. ábra: Polarizált neutron-reflektometriai mérés az antiferromágneses Bragg-csúcsnál



4.2. ábra: A polarizált neutron-reflektometriai mérés eredményének szimulációja. A modellt bikvadratikus taggal is kiegészítettük ($J = -1\ \mathrm{J/m^2}$, $B = -0.2\ \mathrm{J/m^2}$). A nyíl a spin-flop helyét mutatja. Részletesen lásd a szövegben.

ahol J [J/m^2] a mágneses rétegek közötti effektív kölcsönhatási állandó, ϑ_i [°] az i-edik réteg szöge a külső mágneses tér tengelyéhez képest, A [J/m^2] mágneses réteg effektív anizotrópia állandó, ϑ [°] a mágneses tér könnyű tengelyhez viszonyított elfordulása, M [Tm] a rétegek mágnesezettsége és H [Oe] pedig a külső mágneses tér nagysága (1 Oe=$1/(4\pi)\cdot 10^3$ A/m). ϑ bevezetését az tette indokolttá, hogy először nem sikerült az Eddy Kunnen által megadott $A/|J|$ aránnyal illeszteni a mintát[4], és ekkor egyéb effektusokra, többek között a minta esetleges ferde orientációjára is gyanakodtunk. A négyfogású szimmetria nyilvánvalóvá az alábbi trigonometrikus azonosság felhasználásával:

$$\sin^2 2\alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos 4\alpha. \tag{4.3}$$

A konstans $\frac{1}{2}$ pedig a deriválásoknál kiesik.

A (4.2) egyenletben szereplő első tag csak a réteg-mágnesezettségek relatív szögétől függ, míg a többi tag maguktól a szögektől. Ezért úgy is tekinthetjük a rendszert, mint egy potenciáltérben mozgó csatolt „pont-rendszert". A potenciáltagokban van, ami független a mágneses tér értékétől, ez a kristály-anizotrópiából eredő tag. ϑ mondja meg, hogy mekkora az eltérés a mágneses tér által kijelölt tengely és a minta (egyik) könnyű iránya között (ideális esetben $\vartheta = 0°$). Jelen jelölésrendszerben (alkalmazkodva a korábbi jelölésekhez – lásd a 3. oldalon) a külső mágneses tér az x tengely mentén hat.

A rendszer viselkedésének megértéséhez vizsgáljuk a modellben lévő összes lényeges paramétertől való függését. Ezek $p_1 = A/|J|$, $p_2 = hM/|J|$ és $p_3 = \vartheta$. A többi paraméter[5] értéke: J=1 J/m^2, M=1 Tm.

Idő és hely hiányában nem vizsgáljuk meg, mi történik kompenzálatlan esetben (pl. ha a réteg-mágnesezett-ségek nagyságai nem egyformák, vagy a többi paraméterben található szórás), továbbá nem vesszük figyelembe a domének hatását sem. A bikvadratikus tag esetleges illesztését is a jövő feladatai közé soroljuk[6].

4.3.3. A modell $A/|J|$ függése

Az Eddy Kunnen által szolgáltatott információkból úgy tűnt, hogy (tömbi anyagban) $A/|J| = 0.08$ körüli érték[7]. Azonban ezzel az értékkel a kiszámolt spin-flop kétszer akkora külső térnél jelentkezett, mint a mért érték. Ezért megvizsgáltuk a spin-flop $A/|J|$ függését. Az energiatagok alaposabb szemrevételezésével észrevehetjük, hogy $A/|J|$ arány széles határok között változhat, mert míg A tömbi effektus, így változik a rétegvastagsággal, addig J — fenomenológikusan — a rétegek közötti hatás, ami nem változik a mágneses rétegek vastagságával, csak a köztesréteg vastagságától függ.

A négyfogású anizotrópia miatt a spin-rendszernek egy potenciálgáton kell átjutnia a magasabban fekvő lokális minimumból a globális minimumba, és nem egyértelmű, hogy mikor következik be az „ugrás". Matematikai szempontból akkor várható a spin-flop, amikor a felső lokális minimum megszűnik annak lenni.[8]. Azonban már ez előtt is megtörténhet az átmenet, ha minimális többletenergiát kap a rendszer. Ezért a spin-flop átmenet vizsgálata ‚statikus' úton történt. A program megfelelő részének leírása megtalálható a 43. oldalon. Statikus vizsgálat esetén a rendszer matematikai útját vizsgáljuk egy-egy spin-ugrásnál. Az állapotok ekkor az energia-minimum felé vezető úton sorakoznak, ahogy a program a konjugált-gradiens irányokban lépked (azaz ekkor — akárcsak az összes többi paraméter — a külső tér is állandó).

A 4.3. bal oldali ábrájáról leolvasható, hogy a hármassal jelölt állapot az első, amelyik vízválasztó lehet a rendszer leírásában, ugyanis ez általában is lokális minimum. (Bővebben lásd az A.2. fejezetet a 43. oldalon, ahol pont ezen a példán mutatjuk be a statikus üzemmódot.) Innentől a hármas számú állapotot fogjuk használni gerjesztett állapotnak.

A 4.4. bal ábráján látható, hogy különböző $A/|J|$ arányoknál hol milyen energiájú állapot lesz minimális. A jobb oldali ábra úgy készült, hogy $\vartheta = 1°$-nál és $A/|J| = 0.056$ kerestük meg az ‚elemi' gerjesztést, majd ezt használva végeztük el az előző számolást. A jobb oldali számolás azért készült, hogy a módszer érzékenységére megpróbáljon rávilágítani. Az jól látható, hogy mindkét esetben hasonló a rendszer viselkedése, azaz egy adott $A/|J|$ arány alatt keskeny a spin-flop tartomány, fölötte viszont drasztikusan kiszélesedik. A két ábránál viszont különböző helyen van a spin-flop. Ennek oka, hogy a kezdeti (perturbált) állapot nagyon érzékenyen függ $A/|J|$ értékétől. Ezért helyesebb lenne, ha minden $A/|J|$ értékhez külön-külön kezdőállapotot választanánk, majd így keresnénk meg az energiafüggést. Erre azonban ezen dolgozat keretei között már nem vállalkozhatunk.

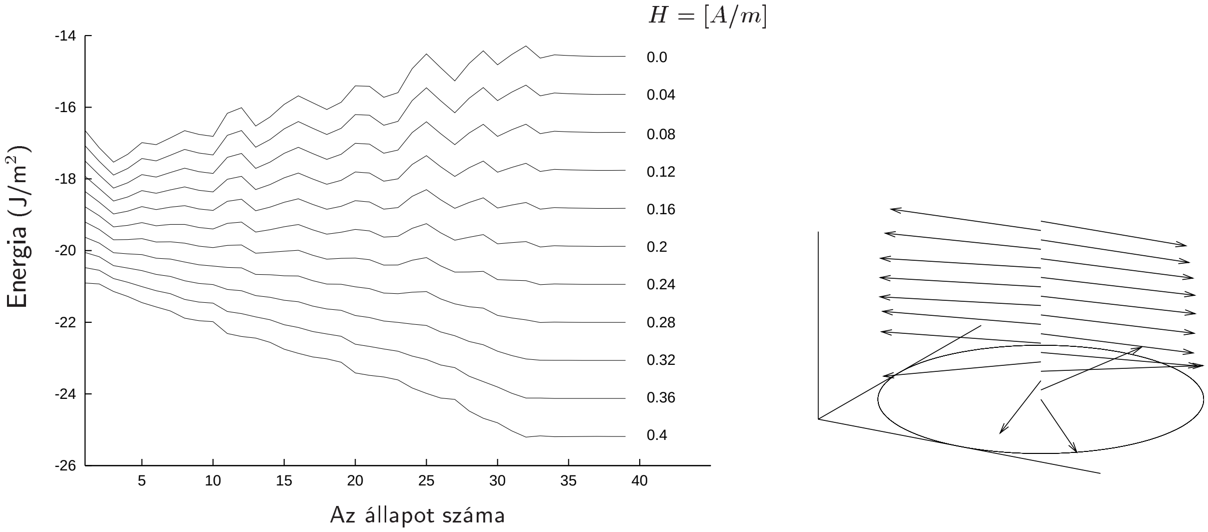
[4] Az illesztés jelen esetben a telítési tér/spin-flop tér megfelelő arányának megkeresésére irányult.

[5] Ezek a paraméterek csak a tengelyeket skálázza át, de magán a „fizikai" folyamaton nem változtatnak (bővebben lásd C.3.3. fejezetben az 51. oldalon).

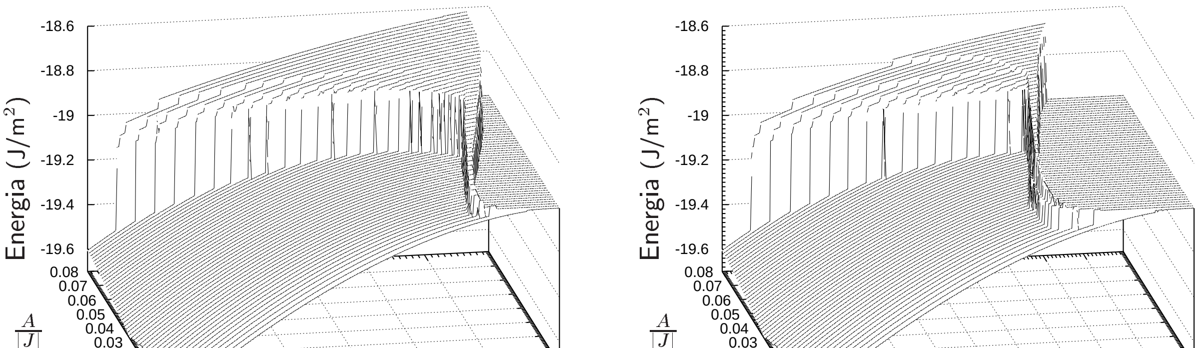
[6] A neutron-reflektivitás leírására használt modell illusztráció, nem alapos vizsgálódás eredménye.

[7] Pontosabban a közlés szerint $A/|J| \approx 0.1 \ldots 0.33$, de a saját — véges rendszeren elvégzett — szimulációk 0.08 körüli értéket adtak.

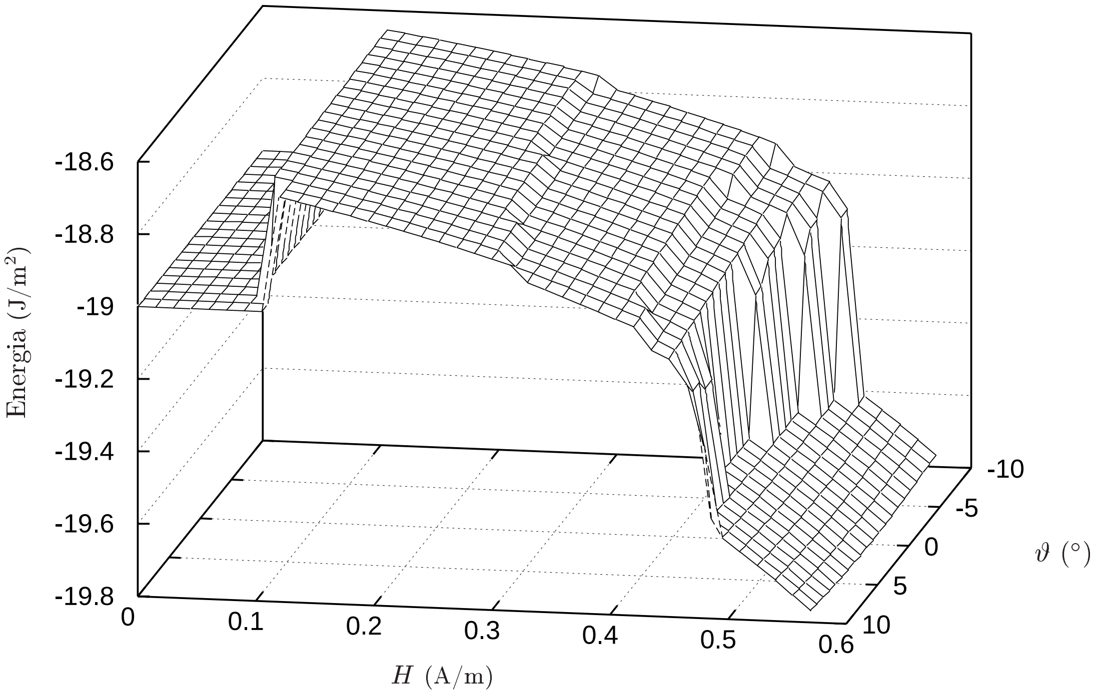
[8] Például nyeregponttá, esetleg lokális maximummá válik.



4.3. ábra: A rendszer energiaútja különböző H külső tereknél és az enyhén gerjesztett állapot. A jobb oldalon látható konfiguráció a bal oldali ábrán a hármas számú. (Négyfogású anizotrópia, $J = -1$ J/m^2, $A = 0.08$ J/m^2) és $M = 1$ Tm.



4.4. ábra: Négyfogású anizotrópiával bővített antiferromágneses rendszer energiafüggése két különböző kezdőállapot esetén (a kezdőállapotokról részletesen lásd a szövegben!). $J = -1$ J/m^2, $M = 1$ Tm, így $h' = \frac{1}{4}H$, azaz a két ábra skálázása azonos. A bal oldali ábrát $A = 0.08$J/m^2, a jobboldalit pedig $A = 0.056$ J/m^{2}effektív anizotrópiás kezdőállapottal vettük fel.



4.5. ábra: A ϑ-tól való függés láthatóan nem jelentős

Annyit mindenképpen levonhatunk a szimulációkból, hogy egy adott $A/|J|$ (≈ 0.05) aránynál ,fázisátmenetet' kapunk. E fölött az arány fölött a gerjesztés stabilizálódik, azaz A növekedtével drasztikusan szélesedik az a tartomány, ahol nem képes a globális minimumba kitekeredni a rendszer. Pontosabb spin-flop térképet azonban csak a program fejlesztésével, az álminimumhelyek kiszűrésével nyerhetünk.

Eddy Kunnen szerint a spin-flop helye és viselkedése gyenge hőmérsékletfüggést mutatott. Ezt is megérthetjük a 4.4. ábrák alapján, hiszen hiába lehet erősen hőmérsékletfüggő az anizotrópia-energia, hogyha nem megy egy kritikus érték fölé ($A/|J| \approx 0.05$), akkor nem befolyásolja jelentősen a spin-flop helyét és lefolyását.

4.3.4. ϑ függés

A potenciál ϑ-tól való függéséből úgy tűnt, hogy jelentős lehet a külső tér irányának pontatlan beállítása a spinflop-tér csökkentésében. Azonban a modellszámítások nem igazolták ezt a várakozásunkat. A 4.5. ábra tanúsága szerint az $A/|J|$-ben jelentkező bizonytalanságok sokkal jobban befolyásolják a rendszer viselkedését, mint a minta pontatlan beállításából származó ϑ tag.

5. fejezet

Felületi spin-flop vékonyréteg rendszerekben

Utolsó érintett kérdéskörünk a felületi spin-flop kérdése. A problémafelvetés igen régi, a jelenség elméleti jóslata 1968-ra nyúlik vissza. Ekkor jelent meg az a cikk, amelyben D.L. Mills és W.M. Saslow[16] felvetette, hogy a minták végességének következtében léteznie kell egy felületi spin-flop átmenetnek, amely szintén elsőrendű, azaz az eredő mágnesezettségnek ugrása van, azonban az akkor már jól ismert tömbi spin-flop tér alatti külső mágneses térnél következik be. Említett számításukat atomi antiferromágnesekre végezték el. F. Keffer és H. Chow [17] tovább finomították a számításokat és újabb részleteit jósolták meg a felületi spin-flop átmenetnek, illetve egyes pontokon korrigálták Mills és Saslow számításait. Atomi antiferromágneses rendszerekben azonban nem sikerült kimutatni a felületi spin-flopot[19] (1994-ig biztosan nem).

Az atomi antiferromágneses anyagokban megtalálható tömbi spin-flop oka, hogy a külső mágneses tér hiányában egymással szemben és a külső térrel párhuzamosan ($[0:180]$) álló atomi momentumok egy kritikus mágnesezettség-értéknél új alapállapotot vesznek fel, nevezetesen majdnem merőlegesen fognak állni a gerjesztő térre ($[90-\vartheta : -90+\vartheta]$ állapot). Az ugráskor eredő mágnesezettség ugrást is tapasztalunk, ezért ez elsőrendű fázisátmenet. Részletesebben a B. fejezetben (46. o.) tárgyaljuk a kérdést, ahol az érdeklődő olvasó megtalálhatja az atomi felszíni spin-flop további részleteit is.

Ebben a fejezetben vékonyréteg-számolásokat végzünk, azaz makroszkopikus alanyokkal dolgozunk. 1994-ben Wang és munkatársai is egy Fe/Cr multirétegen mutatták ki első alkalommal a felületi spin-flopot.

5.1. Tömbi spin-flop

A felületi spin-flop kiszámolása előtt érdemes összehasonlításképpen kiszámolni a tömbi esetet. Ez a mi fogalmazásunkban a végtelen határesetnek felel meg. Az így nyert eredmények jól egyeznek az atomi antiferromágneses anyagok tömbi spinflop-számolásaival, ami nem meglepő, hiszen a számolás alapjául szolgáló szabadenergia-függvények megegyeznek. A számolás elvégzése előtt érdemes tisztázni az anizotrópia szerepé és megismerkedni az uniaxiális anizotrópia tulajdonságaival, mert ez felelős a felületi spin-flop jelenségéért.

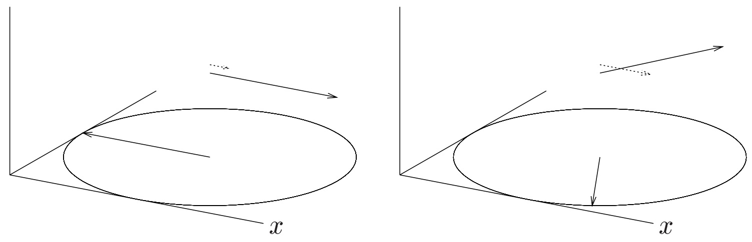
5.2. Az anizotrópia szerepe

Szimulációink során kétféle anizotrópiát vizsgáltunk alaposabban, az egytengelyű (uniaxiális) és a négyfogású anizotrópiát. Tapasztalatunk szerint a négyfogású sokkal jobban ‚kordában tartja' a réteg-mágnesezettségeket, mint az uniaxiális. Ennek oka, hogy a spin-flop bekövetkeztekor még viszonylag jelentős az anizotrópia-tag járuléka. Négyfogású szimmetria esetén ez azt jelenti, hogy a felületi spin-flophoz nélkülözhetetlen $180°$-os felső szög átbillenés (részletesen lásd később) a ‚fodrozott' anizotrópia miatt nem lehetséges, ugyanis ekkor $\Delta\vartheta = 90°$-ban is minimumhely van.

Uniaxiális anizotrópia esetén a spinek egy kitüntetett tengely mentén szeretnek elhelyezkedni. Ennek figyelembe vétele egy $\cos^2$-es taggal történhet, azaz a rendszer szabadenergiája ekkor:

$$\mathcal{F}(H) = -J\sum_{i=0}^{n-2}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - A\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2\vartheta_i - HM\sum_{i=0}^{n-1}\cos\vartheta_i. \tag{5.1}$$

Az anizotrópiatag együtthatója $A > 0$ [J/m^2], a többi jelölés megegyezik (2.4) (6. o.) jelölésével (H [A/m] a



5.1. ábra: Az uniaxiális anizotrópia által stabilizált két alapállapot. Kis térben a [0 : 180] konfigurációnak kisebb a szabadenergiája, míg a tömbi spin-flop tér fölött a $[\vartheta : -\vartheta]$ állapot a kedvezőbb. A külső mágneses tér (felső nyíl) az x tengely irányába mutat, ami az uniaxiális anizotrópia könnyű iránya is egyben.

külső mágneses tér, M [Tm] a területegységre eső réteg-mágnesezettség $J < 0$ [J/m^2] pedig az antiferromágneses csatolás). (5.1) a könnyű irányban történő mágnesezést írja le.

5.2.1. Végtelen határeset

Ismét megvizsgálhatjuk a végtelen határesetet (tömbi spin-flop). A 6. oldalon található számolás megismételhető az anizotrópiával kiegészített szabadenergiával. Most azonban a könnyű irányban az anizotrópia stabilizálja a rendszert. Vizsgáljuk meg a [0 : 180] típusú, páros rétegszámú alapállapotot (5.1. ábra)!

$$\mathcal{F}(h) = (n-1)J - nA \approx n(J-A). \tag{5.2}$$

Ekkor a szabadenergia nem függ a külső mágneses tértől, azaz ideális esetben a könnyű tengellyel párhuzamos szuszceptibilitás eltűnik. Két-alrács közelítésben $\mathcal{F} = 2(J-A)$.

(5.1) másik lehetséges alapállapota, amikor a réteg-mágnesezettségek a külső térre szimmetrikusan kihajlanak. A 2.4. fejezetben (6. o.) használt kétalrács-jelöléssel:

$$\mathcal{F}(H) = -2J\cos 2\vartheta - 2A\cos^2\vartheta - 2HM\cos\vartheta. \tag{5.3}$$

Egyensúly esetén a szög szerinti derivált nulla, így ismét azt kapjuk, hogy vagy $\sin\vartheta = 0 \to \vartheta = 0°$, vagy pedig

$$4J\cos\vartheta + 2A\cos\vartheta + HM = 0 \to \cos\vartheta = -\frac{HM}{4J+2A} = \frac{HM}{4|J|-2A} \tag{5.4}$$

A telítési tér értéke ekkor

$$H_t = \frac{4|J|-2A}{M} \tag{5.5}$$

A rendszer normált mágnesezettsége pedig

$$M_N \equiv \frac{M_{össz}(H)}{M_{max}} = \cos\vartheta = \frac{HM}{4|J|-2A}. \tag{5.6}$$

Látszik, hogy $H_t = 0$ $A = 2|J|$ esetén, vagyis ekkor megszűnik az antiferromágneses jelleg. Külső tér hatására a momentumok az anizotrópia miatt ferromágnesesen fognak viselkedni[1].

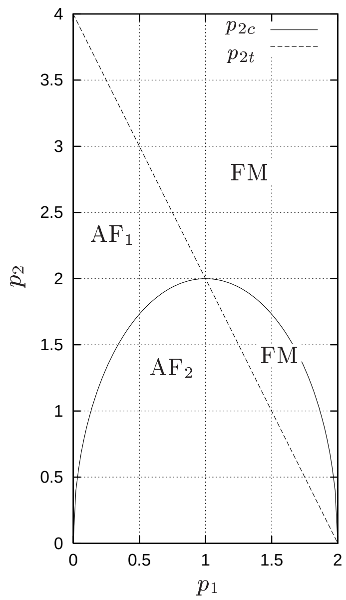
Amennyiben összesen két rétegünk van, akkor a szabadenergiában ismét J szerepel $2J$ helyett. Ennek megfelelően a telítési tér nagysága $H_t = 2\frac{|J|-A}{M}$. A legtöbb mintánál és elméleti számolás esetén azonban $A \ll J$.

Fázisvizsgálat

Most két stabil alapállapotunk van, így vizsgálhatjuk, mikor melyik a globális minimum. Spin-flop akkor fog bekövetkezni, amikor a két állapot energiája megegyezik:

$$-2J\left(2\cos^2\vartheta - 1\right) - 2A\cos^2\vartheta - 2HM\cos\vartheta \stackrel{!}{=} 2(J-A) \tag{5.7}$$

[1] Véges multiréteg rendszereknél a szimulációk ‚befagyásokat' mutatnak nagy anizotrópia esetén. Például páros réteg hiszterézisénél általában lesz két egymással párhuzamos momentum, hogy a rendszer alsó és felső momentuma is párhuzamos lehessen a gerjesztő térrel. Ez az aszimmetria a rendszer eredő mágnesezettségében is megmutatkozik.



5.2. ábra: A kritikus mágneses terek összehasonlítása $p_{2c}(=4\,h'_c)$ felett a rendszer ferromágneses, azaz összes momentuma a külső tér irányába áll. Az egyes fázisok: AF_1 $[\vartheta : -\vartheta]$, AF_2 $[0:180]$, FM $[0:0]$.

$\cos\vartheta$ (5.4) egyenletből való behelyettesítése és némi számolás után kapjuk a spin-flop kritikus terét:

$$H_c = \frac{2\sqrt{A\,(2\,|J| - A)}}{M}. \tag{5.8}$$

(5.8) egyenletet a független paraméterekkel[2] ($p_1 = \frac{A}{|J|}$ és $p_2 = \frac{HM}{|J|}$) kifejezve:

$$H_c = \frac{2\,|J|\,\sqrt{\frac{A}{|J|}\left(2 - \frac{A}{|J|}\right)}}{M} \rightarrow p_{2c} = 2\sqrt{p_1\,(2-p_1)} \tag{5.9}$$

Nem szabad azonban megfeledkezünk arról sem, hogy a $[0:180]$ alapállapot sem mindig globális minimum. Elegendően nagy $A/\,|J|$ aránynál ugyanis a rendszer ferromágnesesen fog viselkedni. Vizsgáljuk meg ezt a határesetet is! Előző számításainkból tudjuk, hogy a telítési mágnesezettség

$$H_t = \frac{2\,|J|\left(2 - \frac{A}{|J|}\right)}{M} \rightarrow p_{2t} = 2\,(2-p_1) \tag{5.10}$$

szerint változik.

A két-alrácsos rendszer H_t fölött mindig ferromágnesesen viselkedik (ekkora tér kell, hogy legyőzze az antiferromágneses csatolást), ez 5.2. ábrának az egyenes fölötti része. Amennyiben a spin-flop e fölött következne be, úgy a $[0:180]$ állapotból a ferromágneses $[0:0]$ állapotba jutnuk. A kritikus paraméterek, ahogy az ábráról is leolvasható: $p_1 = 1$, $p_2 = 2$. Ezt visszaírva a régi paraméterekre:

$$h'_{max} = \frac{p_{2\,max}}{4} = \frac{1}{2}, \quad \left.\frac{A}{|J|}\right|_{max} = 1. \tag{5.11}$$

Ezzel sikerült meghatározni a tömbi spin-flop $A/\,|J|$ függését. Azaz $A < |J|$ esetén telítési külső mágneses térből indítva a rendszerünket a $[0:0]$ ferromágneses állapotból az (5.10) egyenletben kiszámolt térnél kinyílik a V betű (AF_1), majd az (5.9) egyenlet által meghatározott kritikus térnél a rendszer átugrik a $[0:180]$ antiferromágneses alapállapotba (AF_2), tovább csökkentve, majd az ellenkező irányba növelve a rendszer teljesen szimmetrikusan fog viselkedni (FM–AF_1–AF_2–AF_1–FM). $1 < A/\,|J| < 2$ esetén eltűnik az AF_2 fázis, de a rendszernek még van antiferromágnesesen viselkedő komponense. $A/\,|J| > 2$ esetén megszűnik az antiferromágneses viselkedés. Gyakorlatilag ez azt jelenti, hogy a túl gyengén csatolt rendszereknél van egy alsó határa a még látható csatolásnak. Mivel A az adott mintától függő anyagi állandó, ezért $A > 2\,|J|$ valóban azt jelenti hogy a köztesrétegtől függő antiferromágneses csatolás kicsi. Az antiferromágneses kísérleteknél $A \ll |J|$, olyannyira, hogy gyakran el is hanyagolják A-t.

[2]A független paraméterekről részletesen lásd a 49. oldalon.

5.3. Véges rendszerek viselkedése (felületi spin-flop)

Véges rendszereknél felületi spin-flop átmenet legkorábban akkor következhet be, amikor találunk a külső tér nélkül stabil antfierromágneses [0 : 180] kezdeti konfigurációnál kisebb szabadenergiájú alapállapotot. Emlékezzünk, hogy anizotrópia nélkül bármilyen kis külső tér esetén is volt ilyen állapot, ez volt a kollektív gerjesztés. Ez a gerjesztés azonban most nem tud kialakulni, mert — mint majd látni fogjuk — az anizotrópiagát szétszakítja az S vonalat. A [0 : 180] alapállapot energiája szerencsére könnyen számítható (lásd még az (5.2) egyenletet):

$$\mathcal{F}_{AF}(H) = J(n-1) - An. \tag{5.12}$$

Ez az energia nem függ a külső mágneses tértől.

Az 5.3. ábrasorozaton nyomon követhetünk egy felületi spin-flopot, és azt, hogyan alakul át tömbi spin-floppá. A számolást 16 rétegre és $A/|J| = 0.25$ arányra végeztük[3], hogy eredményeinket könnyen összehasonlíthassuk Wang és munkatársai[19] számolásaival, akik ugyanilyen rendszert vizsgáltak. Látható, hogy a térrel ellentétesen álló momentumnál kezdődik az átfordulás. A legfelső momentum közel 180 fokot fordul, hogy párhuzamos lehessen a külső térrel, és az antiferromágneses csatolás révén magával rántja a felső pár momentumot. A h' külső tér[4] fokozatos növelésével a csavar behatol a mintába és eljutunk a tömbi spin-flopra jellemző V alakig. Alaposabb vizsgálatok azt mutatják, hogy a csavarodás nem folytonos, hanem ugrásai vannak. Egy-egy ugrás között lassan csukódnak a momentumok, majd következik egy újabb momentum átugrása. Ilyen ugrásból négy-öt is megfigyelhető. Az ugrások által érintett momentumtartományt nevezi Mills doméneknek.

Rakhmanova és Mills[21] dinamikus szimulációi szerint a momentumugrások a legkisebb külső energia hozzáadásától is elsimulnak, és a rendszer folytonosan jut el a V alakig. Szimulációjuk során a dinamizmust a külső mágneses térre szuperponált nagyfrekvenciás, ám kisamplitúdójú váltakozó mágneses tér szolgáltatta. A rendszer fizikai viselkedését pontos mérésekkel ellenőrizni lehet, ugyanis a momentumugráshoz mágnesezettségugrás is társul.

A spin-flop rajzfilmről is sejthető, hogy *páros* számú rétegre van szükségünk a felületi spin-flop eléréséhez. Páratlan rétegszám esetén ugyanis mindkét szélső réteg-mágnesezettség a külső tér irányába hat, azaz a külső tér növelésével helyzetük *stabilizálódik*. Ezért páratlan rétegszám esetén csak tömbi spin-flopot tapasztalunk. Saját szimulációink megerősítették Wang és Mills[19] eredményeit és valóban nem tapasztaltunk felületi spinflopot páratlan rétegszám esetén.

Az előzőekben nagy vonalakban megmutattuk, hogy programunkkal lényegében sikerült megkapni az irodalomból ismert felületi spin-flopot. Azonban ennél többet is tehetünk. Vizsgálhatjuk az anizotrópia szerepét és különböző mintabeállításokra is végezhetünk hiszterézis-szimulációkat, végül részletesen is összehasonlítjuk eredményeinket az irodalomból ismert eredményekkel.

5.3.1. $A/|J|$ függés

Az 5.5. ábrán látható 16 antiferromágnesesen csatolt réteg szabad-energiája $A/|J|$ függvényében különböző külső mágneses terek esetén. Ugyanezt láthatjuk az 5.6. ábrán is, de itt berajzoltuk a [0 : 180] AF alapállapothoz tartozó energiát is. Az ábrák úgy készültek, hogy különböző A értékeknél ($J = -1$ J/m^2 mellett) telítési külső térből ($H = 4$ A/m) csökkentettük a mágneses teret nullára és felvettük a külső tér–energia görbéket. Ezek összessége látható az ábrákon. Egyrészt látszik, hogy kis $A/|J|$ esetén az energiagörbe sima és egy helyen metszi az antiferromágneses alapállapotot. Ebben az esetben a metszéspont lesz az elméleti spin-flop érték. Nagyobb arányoknál azonban begyűrődik a felület és két metszéspontot is találunk. Ekkor a rendszer viselkedése megváltozik. Ez főleg annak tulajdonítható, hogy a növekvő anizotrópia miatt ugrások jelennek meg az általános viselkedésben is, és így energialépcsők jelentkeznek.

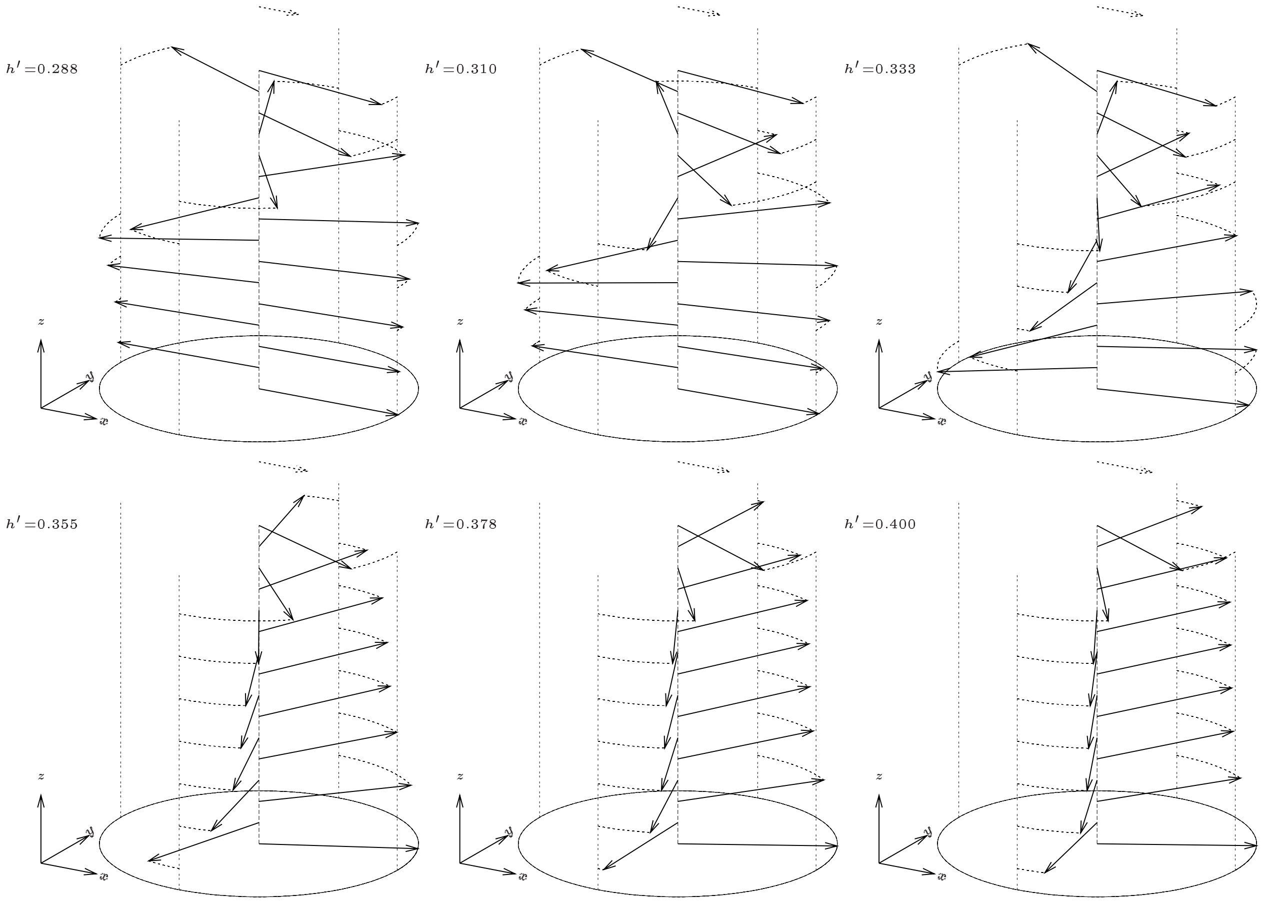
Numerikus eredményünket összehasonlíthatjuk az (5.9) elméleti jóslattal is. Ezt látjuk az 5.7. ábrán. Látszik, hogy a véges rendszer ($n = 16$) kisebb mágneses térnél ugorhat, mint végtelen párja. Továbbá megfigyelhető az 5.6. ábrán is látható ‚gyűrődés', azaz hogy két helyen is metszi a V-hez tartozó állapot az antiferromágneses állapot energiasíkját. Felületi spin-flop legkorábban az energia-burkolónál következhet be, azaz ahol van, ott a H-ban ‚magasabb' ágon.

A mágnesezettség alakulásán is megfigyelhető az előbb említett ugrás az anizotrópiatag növekedtével (5.8. ábra).

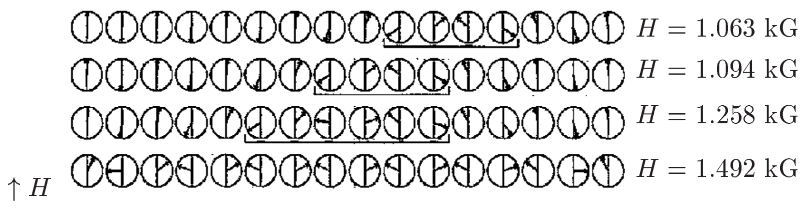
Vizsgálatainkból egyelőre azonban csak a valóban megfelelően kis anizotrópiáknál vonhatunk le biztos következtetéseket. Ugyanis nagyobb $A/|J|$ arány esetén például a negatív telítésből pozitív telítésbe vezető

[3] $J = -1$ J/m^2, $A = 0.25$ J/m^2, $M = 1$ mA.

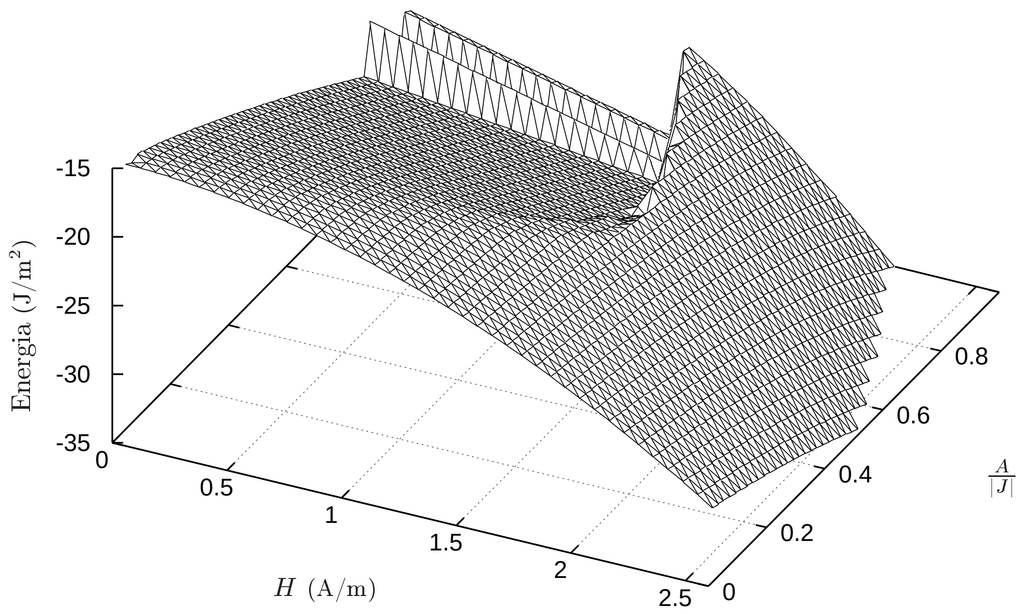
[4] Pontosabban a redukált külső tér.



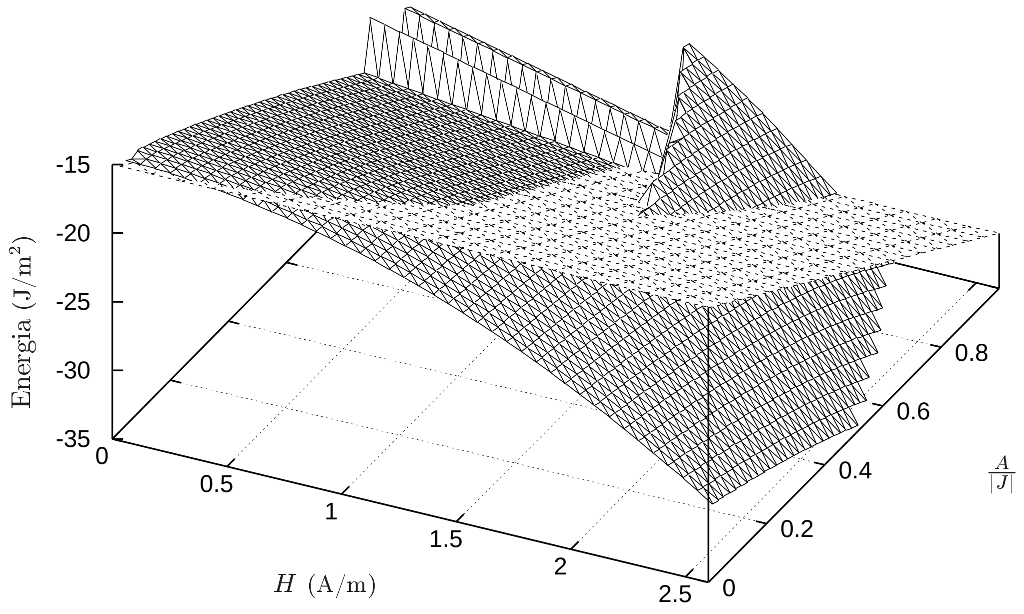
5.3. ábra: A felületi spin-flop folyamatának hat pillanata. A legfelső nyíl h' redukált mágnesezettséget mutatja. Az első ábrán jól megfigyelhető a legfelső momentum közel 180 fokos átfordulása (a spinflop előtt $[0:180]$ alapállapotból indultunk, így a legfelső momentum *szembe* állt a gerjesztő térrel.)



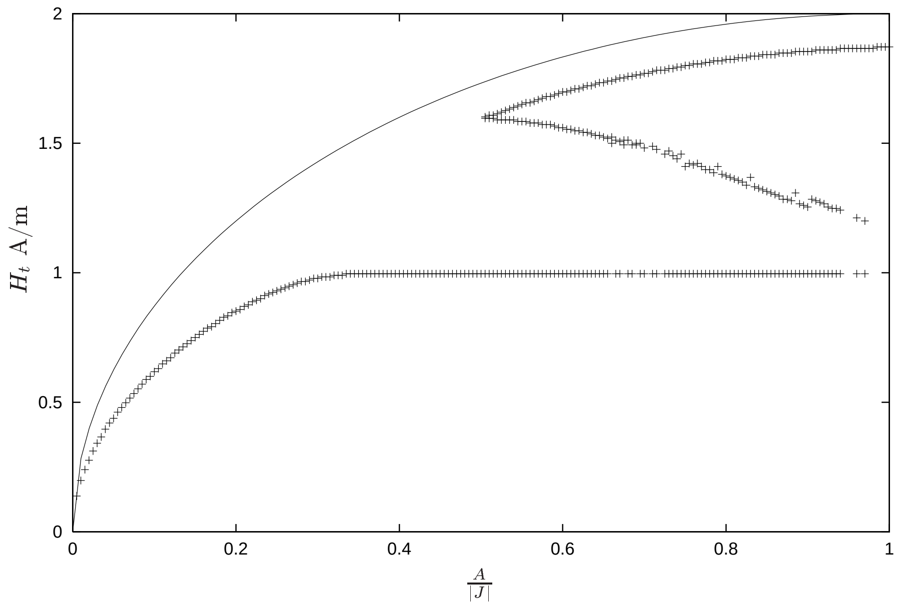
5.4. ábra: H különböző értékeinél szimulált rétegmágnesezettség-konfiguráció. Az aláhúzott részek a ‚doménfalak'. Az ábra Wang és Mills cikkéből[19] származik.



5.5. ábra: A rendszer energiájának függése $\frac{A}{|J|}$ aránytól uniaxiális anizotrópia esetén ($M = 4$ Tm, $J = -1$ J/m^2 és $n = 16$). A felületetet konstans A szintvonalak mentén (H változtatásával) vettük fel.



5.6. ábra: H_c függése az $\frac{A}{|J|}$ aránytól, az AF alapállapot [0 : 180] energiájával



5.7. ábra: Véges rendszer elméleti spinflop tere (keresztek) összehasonlítva a két-alrács közelítésben számolt térrel (folytonos vonal).

görbe (ami energetikailag pont a tükrözöttje a pozitív telítésből negatív telítésbe menőnek), hol kisebb energiájú állapotokat tartalmaz, mint az ellenkező irányú telítési görbe, hol nagyobbakat. Ennek megfelelően a két energiavonal több helyen metszi egymást. A rendszer akkor lenne végig energia-minimumban, ha ezeknél a metszéspontoknál mindig a kisebb energiájú ágat választaná, azonban nem ezt teszi. Kérdés, hogy mekkora az az energiagát, ami elválasztja egymástól az energia-kereszteződésbeli két állapotot. Ennek vizsgálata azonban nem témája ezen dolgozatnak, így most meg kell annyival elégednünk, hogy ilyen „energia-metsző" viselkedés nem tapasztalható $A/|J| \leq 0.5$ érték alatt.

Jelenleg a program legnagyobb hiányossága, hogy nem túl érzékeny a lokális minimum elvesztésére. Míg minimumkereső algoritmusa távolról indítva biztosan talál minimumot, a minimumban ülve a paraméterek folytonos változtatásával könnyen becsapható. Első lépésben már felismeri, ha a minimumból lokális maximum lett, azonban ennél többre még nem képes.

A program további fejlesztésével eldönthető, hogy a nagyobb tereknél tapasztalható viselkedés mennyire fizikai, további ‚statikus' üzemmódbeli vizsgálatokkal pedig nagy A esetén is meg lehet keresni a felületi spin-flop tartományt. Ezek a feladatok azonban egy következő dolgozat tárgyai lehetnek.

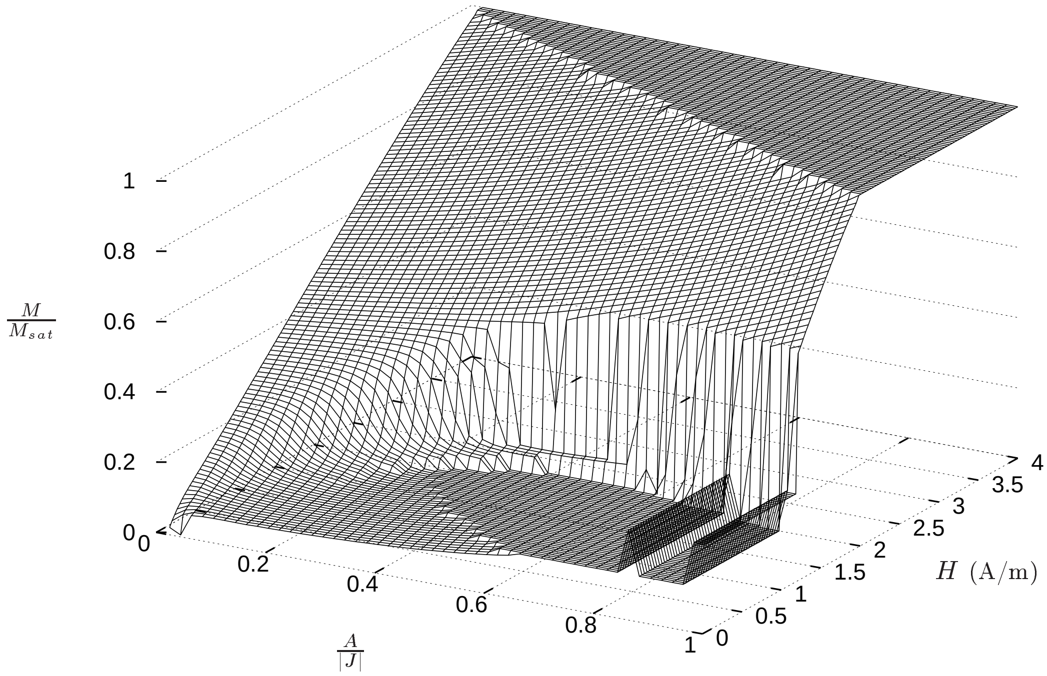
5.3.2. ϑ függés

A külső mágneses tér irányától való függéshez az alábbi, kiegészített szabadenergiát használjuk:

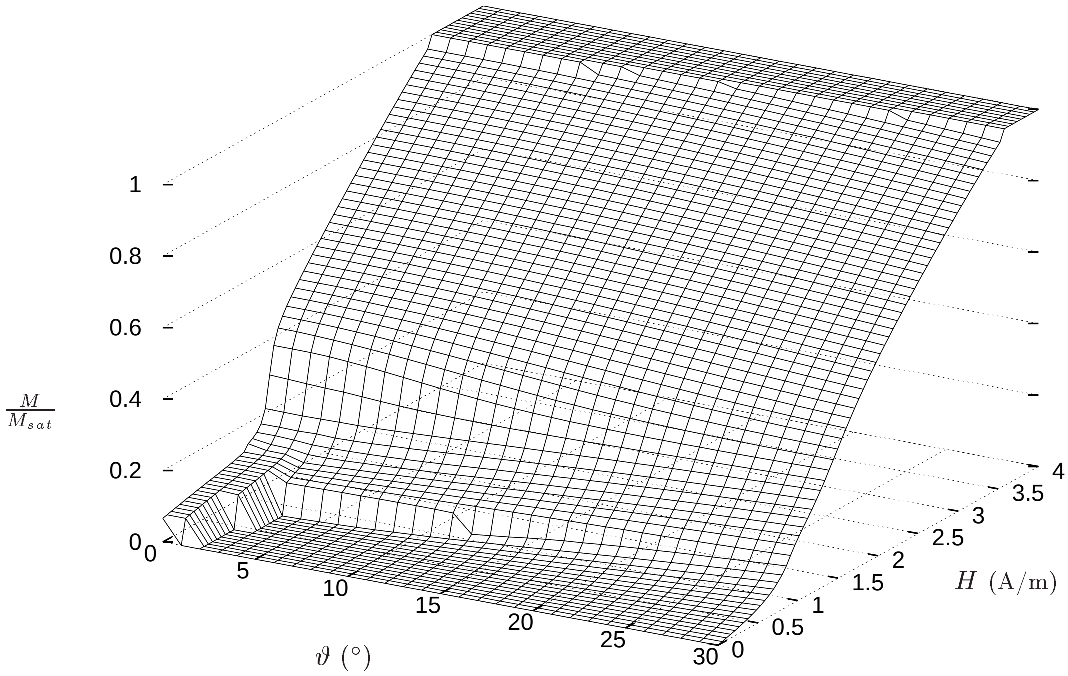
$$\mathcal{F}(H) = -J\sum_{i=0}^{n-2}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) - A\sum_{i=0}^{n-1}\cos^2(\vartheta_i - \vartheta) - HM\sum_{i=0}^{n-1}\cos\vartheta_i. \tag{5.13}$$

Itt ϑ mondja meg, hogy a rendszer anizotrópia által megszabott koordináta-rendszere hány fokot zár be a külső tér által kijelölt koordináta-rendszerrel. A vizsgálatot $A/|J|$=0.25-nél végeztük, ez felel meg Wang és munkatársai[19] számolásának és mérési illesztésének (Az ő Fe/Cr mintájuknál ezt az arányt találták.). A szimuláció szerint már kis szögeltérés ($\vartheta_0 \geq 0.15°$) is megszünteti a felületi spin-flop átmenet ugrását[5], a minta folytonosan fog eljutni az antiferromágneses minimumba kis tér esetén.

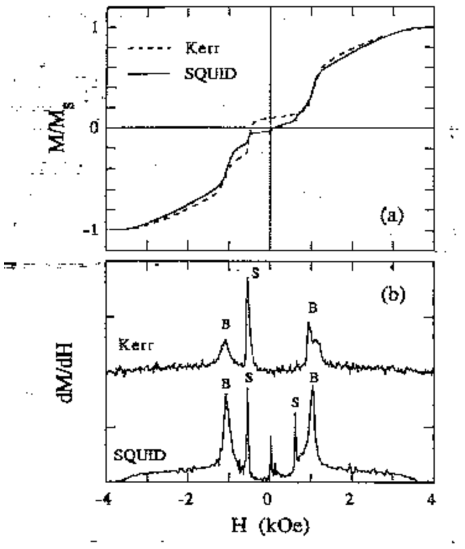
Az 5.9. ábráról leolvasható, hogy viszonylag nagy szögeltérés esetén is tapasztalható gyors változás az eredő mágnesezettségben, ami a legfelső réteg 90 fokos csavarodását jelzi. Növelve az anizotrópia és a külső tér által meghatározott tengelyek szögét, a mágnesezettség-ugrás fokozatosan csökken, majd eltűnik.



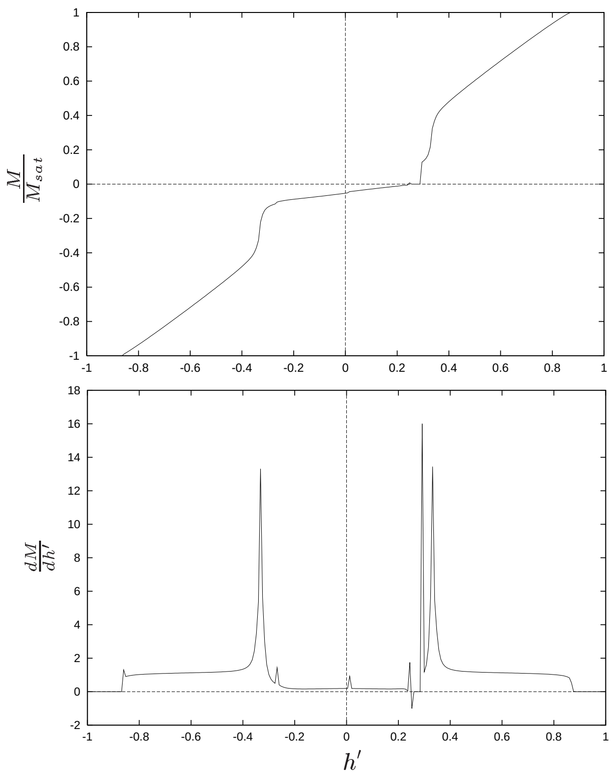
5.8. ábra: Az rendszer normált mágnesezettsége $A/|J|$ függvényében. A felületet állandó $A/|J|$ arány mellett vettük fel.



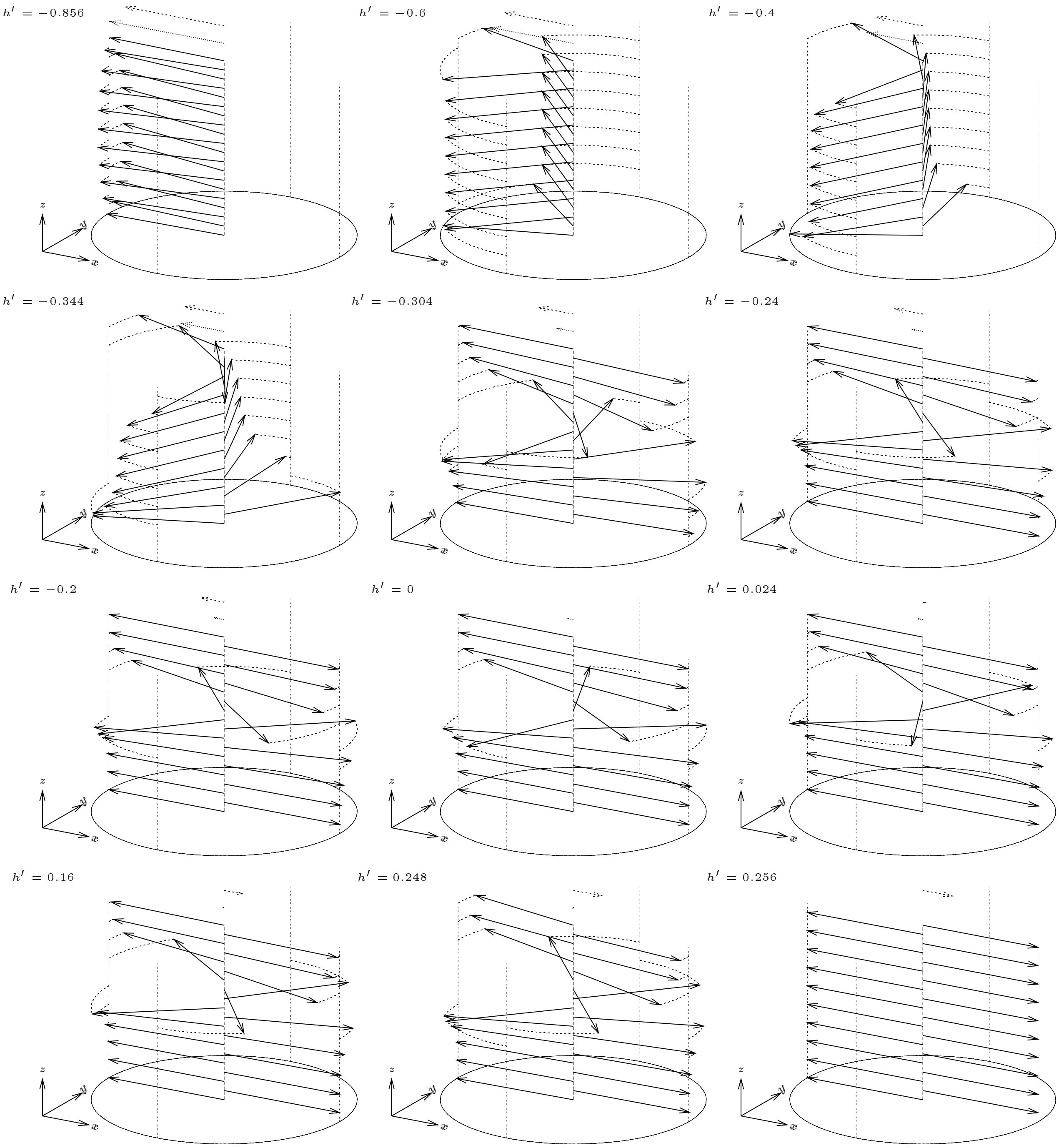
5.9. ábra: A spin-flop szögfüggése. Látható, hogy már kis ϑ esetén is megszűnik a mágnesezettség-ugrás.



5.10. ábra: (a) [Fe(40 Å)/Cr(11 Å)]$_{22}$ multiréteg $-M_S$-M_S mágnesezettséggörébje. A külső mágneses tér párhuzamos volt a minta könnyű tengelyével. A folytonos vonal SQUID mérés eredménye, míg a szaggatott vonal adatait magneto-optikai Kerr effektussal mérték. (b) Az (a) görbék numerikus deriváltjai. S a felületi, míg B a tömbi spin-flopnak felel meg. (Az ábra és a képaláírás [19] cikkből származik.)



5.11. ábra: 20 antiferromágnesesen csatolt réteg $-h_t' \rightarrow h_t'$ redukált mágnesezettség-görbéje és a görbe deriváltja. Csak a tömbi (SQUID-nek megfelelő) görbét szimuláltuk. A mérés jellemző ugrásait megkaptuk, ám nem a megfelelő helyeken, ami a program tökéletlen szabadenergia-minimum követésének következménye.



5.12. ábra: 20 antiferromágnesesen csatolt réteg alapállapota $h' = -1$ telítéstől nulla külső térig ($h' = 0$). Látható, hogy ebben a szakaszban nem tud kialakulni a felszíni spin-flop, mert a kezdetben szimmetrikus V szimmetrikusan (azaz a középső rétegeknél) törik ketté. A középen ragadt momentumok megfelelően nagy ellenkező irányú külső tér esetén rendeződnek, és ekkor már valóban felszíni spin-flop átmenet következik (5.3. ábrasorozat – 32. oldal).

5.3.3. Összehasonlítás Wang *et. al* eredményeivel

Egészen 1994-ig kellett várni[6] a felszíni spin-flop átmenet kísérleti kimutatásáig. Ekkor sikerült Wangnak és munkatársainak antiferromágnesesen csatolt vékonyréteg-rendszeren kimutatnia a felületi spin-flopot. A méréssorozatot MgO(110) egykristályon növesztett Fe/Cr(211) multirétegekkel végezték[19]. Itt szomszédos — rétegen belül ferromágnesesen csatolt — rétegek voltak antiferromágnesesen csatolva egymással a Cr távtartó rétegen keresztül[7].

Wang és munkatársai által minimalizált szabadenergia-függvény:

$$E = \frac{H_E}{2}\sum_{l=1}^{N-1}\cos\left(\alpha_l - \alpha_{l+1}\right) - \frac{H_A}{2}\sum_{l=1}^{N}\cos^2\alpha_l - H\sum_{l=1}^{N}\cos\alpha_l, \tag{5.14}$$

ahol H_E a rétegek közötti csatolási állandó, H_A pedig az effektív anizotrópia-energia. A mértékegységek itt is elméleti mértékegységek (lásd az összefoglaló táblázatot a 4. oldalon) „$M = 1$" további egyszerűsítéssel kiegészítve.

A számolásokat $N = 15$-re és 16-ra végezték el. Páratlan rétegszámnál csak tömbi spin-flop átmenet találtak. Az általuk használt állandókat a Fe/Cr rendszerekre kimért állandóknak[20] választották (náluk $H_A = 0.5\,\mathrm{kG}$, $H_E = 2.0\,\mathrm{kG}$). Ez ugyanolyan, mint az általunk is kiszámolt (5.1) naív antiferromágneses modell, egytengelyű anizotrópiával (28. oldal). A két energia-kifejezés egyenlő lesz a következő behelyettesítésekkel: $J = -\frac{H_E}{2}$, $A = \frac{H_A}{2}$, $M = 1$, $h = H$.

Méréseket is végeztek, melyeken valóban látható a felszíni spin-flopnak megfelelő mágnesezettség-ugrás (5.10. ábra). A teljes mágnesezettséget mérő SQUID-méréseken látható a felületi spin-flop, míg a felületi mágnesezettségre érzékeny Kerr mérésen csak a tömbi spin-flopnál találunk ugrást. Ezt a szerzők azzal magyarázzák, hogy ez esetében a minta szubsztrátoldali felületén történt meg az átmenet, így a minta felületének mágnesezettségére érzékeny Kerr mérés nem látta a mágnesezettség ugrást.

Az általunk végzett hiszterézis-szimulációk azt mutatják, hogy a rendszer aszimmetrikus viselkedése miatt nem is tapasztalhattak mindkét esetben felületi spin-flopot. Ugyanis telítési térből csökkentve a külső mágneses teret a momentumok a szimmetriát megőrizve „törnek ketté" (5.12. ábra). Ennek oka, hogy a kollektív gerjesztéshez nélkülözhetetlen $[-90:90]$ beállás most energia-maximum. Ezért a réteg-mágnesezettségek igyekeznek minél távolabb kerülni ettől az állapottól. Már nagyon kis anizotrópia elegendő a kollektív gerjesztés szétszakításához. A szétszakadás következtében a a minta középső momentumai kerülnek bizonytalan helyzetbe, ami kis tömbi mágnesezettség-ugrásokhoz vezet, de ez a jelenség nem a felületen indul. Továbbhaladva h' redukált külső mágneses térrel eljutunk a $[0:180]$ alapállapotba. Innen továbbmenve pedig valóban visszakapjuk a felületi spin-flopot (5.3. ábra).

Wang és csoportja a szimulációkon felül egy valódi rendszert is leírtak elméletükkel. Az adott minta uniaxiális anizotrópiával rendelkező 22 pár Fe/Cr vékonyréteg. SQUID mérés segítségével felvették a külső tér–eredő mágnesezettség függvényt, MOKE mérés segítségével pedig a felületet külön is megvizsgálták. Ezek a mérések láthatóak az 5.10. ábrán. Az ábra felirata szerint a görbéket -M_s–M_s irányban vették fel. Az előző bekezdésekben leírtak szerint azonban valószínűleg fordítva került a cikkbe az ábra, mert alulról felfelé menet nincsen (vagy nagyon kicsi) a felületen tapasztalható rétegmágnesezettség-ugrás. Ezt látszik megerősíteni az általunk szimulált görbe (5.11. ábra), ahol nagyobb mágnesezettség ugrás társul a felületi spin-flophoz, mint az S szakadáshoz, és a számolás tükrözöttje is jobban illik a mért eredményekhez. Megjegyzendő, hogy a program energia-ugrás keresési ‚lustasága' miatt a szimulációnk egyelőre csak iránymutató, mint pontos számolás. Ez főleg a túlságosan széles platón mutatkozik meg.

Szimulációinkat kvantitatíven is összehasonlíthatjuk Wang és munkatársai szimulációival. A program dinamikus üzemmódban (lásd 42. oldal) H_s=1.15 kG körüli felszíni spin-flopot jelez, míg a [19] cikkben H_s=0.93 kG szerepel. Ez utóbbi érték az elméleti ‚határ', amit az AF alapállapot által elmetszett energia-diagramból mi is kaptunk (5.13. ábra). Statikus üzemmódban (részletesebben lásd a 43. oldalon) használva a programot, H_s=0.8024 kG külső tér értéket kapunk. Ez (azonosíthatósági határon belül) megegyezik [21] dinamikus számolásának eredményével[8].

5.3.4. A spin-flop reprodukálhatóságáról

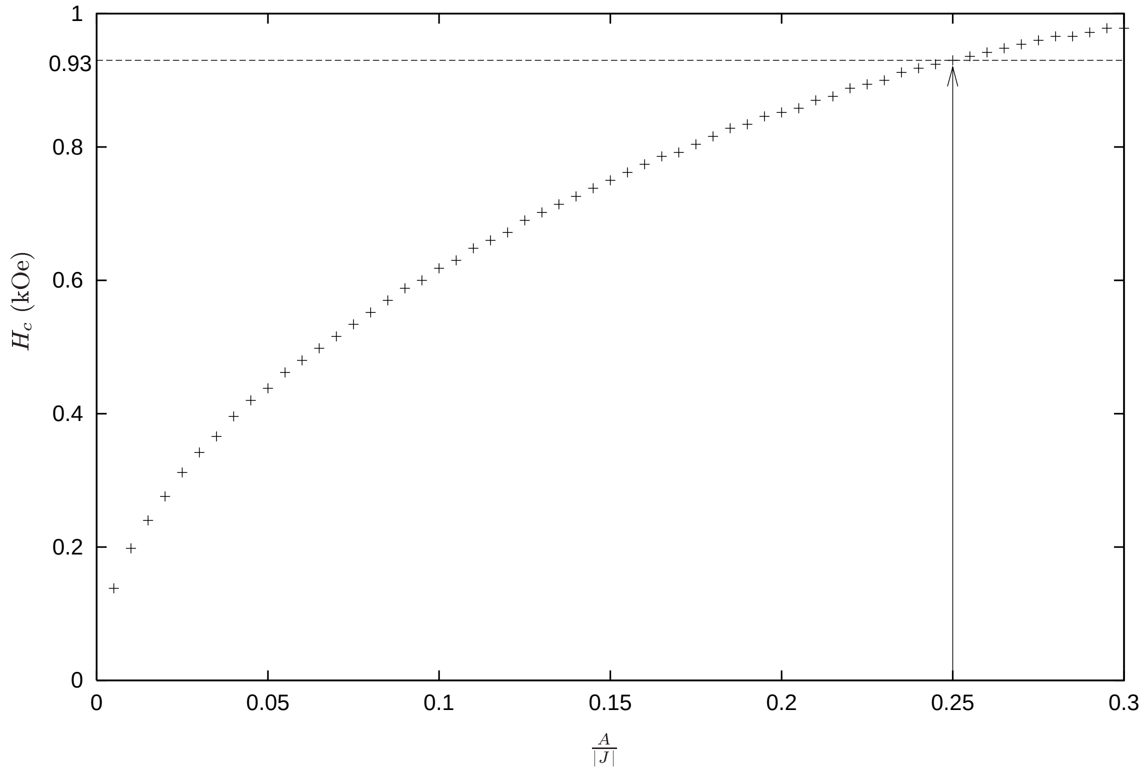
Kísérleti szempontból lényeges, hogy a spin-flopot mennyire könnyen lehet reprodukálni. Szimulációink azt mutatják, hogy mind az egytengelyű, mind a négyfogású anizotrópia esetén megoldható a spin-flop reprodu-

[5] Ezek a szimulációk pozitív telítési tértől negatív telítési térig történő mágnesezettség változtatással történtek, különböző ϑ értékek mellet.

[6] Mills-ék cikkei 1968-as keltezésűek, míg Kefferék 1973-ban jelentették meg számításaikat. A sokat hivatkozott Foner cikk, ami a tömbi antiferromágnes spin-flopot is tárgyalja, egy 1963-as kiadású könyvben[3] található.

[7] Fe/Cr(211) és (100) multirétegek csatolási állandóit átfogóan Eric E. Fullerton és csoportja vizsgálta[20].

[8] Sajnos a cikkben nincs benne az ugrás helye, így azt a cikk ábrájáról kellett leolvasni.



5.13. ábra: Az általunk végzett szimulációk alkalmazása a Mills által vizsgált rendszerre ($A/J = -0.25$). Jól látszik az egyezés.

kálhatósága.

Uniaxiális anizotrópia esetén ugyan telítésből csökkentve a teret csak már az ellenkező irányú mágneses tér esetén állt vissza az alapállapot, azonban a könnyű tengely irányának változtatásával jobban ellenőrizhetjük a minta viselkedését. Megfelelően nagy ($\vartheta > 15°$) elfordítás esetén már nem következik be az S kettészakadása. A külső mágneses tér megszüntetésével, majd a minta ismételt elfordításával nekünk tetsző alapállapotot hozhatunk létre.

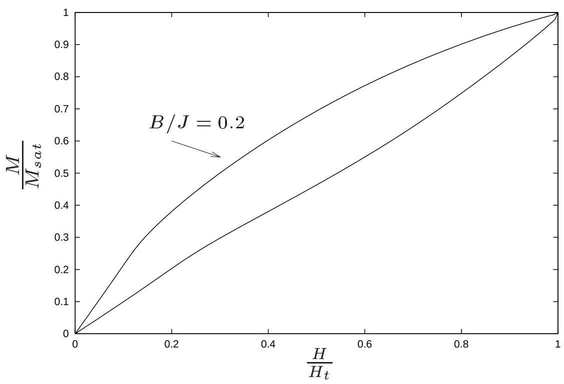
Négyfogású anizotrópia esetén is el kell forgatnunk a mintát minden spin-flop után, de a 90 fokos elfordítás után újra lehet mérni a spin-flopot.

6. fejezet

Kitekintés

A diplomamunka során felmerült legtöbb probléma még nem lezárt, így azok részletesebb kidolgozása az RMKI-ban (remélhetőleg) folytatandó munka része lesz. Legfontosabb feladat a szimulációs-program energia-minimalizálási részének fejlesztése. Visszatérő probléma ugyanis a fázishatároknál jelentkező ugrás helyének pontos meghatározása.

A még folyamatban lévő Fe/Cr vékonyréteg-szerkezet kiértékeléséhez is jelentős lépésekre van szükség. Alaposan vizsgálni kell a bikvadratikus tag tulajdonságait.



6.1. ábra: A bikvadratikus tag járuléka. Itt kivételesen a H_t telítési térre normáltuk az x tengelyt, mivel ezt lehet jól összehasonlítani a mérési eredményekkel. Négyfogású anizotrópiát használtunk, $A/|J| = 0.056$, $B/J = 0.2$ és $n = 10$ (A, B, J és n rendre az anizotrópia-, bikvadratikus-, bilineáris energia illetve a rétegszám). Jól látszik a bikvadratikus tag egyenestől eltérítő hatása. Az alsó (jelöletlen) görbénél $B = 0$, ekkor az eltérésért a négyfogású anizotrópia a felelős.

Folyamatban van további spin-flopra tervezett minták előállítása illetve mérése. Ezen további eredmények feldolgozásával is jobban megérthetjük a véges vékonyréteg-rendszerek fenomenologikus viselkedését.

A spin-flop jelenség jobb megértését segítendő, ^{57}Fe marker rétegekkel ellátott vékonyréteg minták készítése van folyamatban. A jelölő réteg felhasználásával lehetővé válik, hogy nagy biztonsággal megmondjuk egy adott (és nem csak a felületi) réteg mágnesezettségének szögét. Ez segíthet a megfelelő fenomenologikus modell kiválasztásában, mert csökkenti az azonos eredményeket adó különböző modellek számát.

A program szimulációira alapozott mérési tervet nemrég fogadták el ESRF-beli mérésre. Ez a terv tartalmaz többek között egy felületi spin-flop mérést különböző rétegszám (páros és páratlan) esetén, illetve négyfogású anizotrópiát tartalmazó mintákat is fogunk vizsgálni.

A minták paramétereinek vizsgálatakor érdekes jelenségekre bukkantunk. Egyrészt a szimmetria megtörésével megszüntethetjük a véletlen szerepét, így például a felületi spin-flop mindig ugyanarról az oldalról fog indulni. Aszimmetria-sértést (kompenzálatlanságot) egyenletesen elosztva (például a páros rétegek 10%-os vastagság növelésével) a rendszer viselkedése kevéssé változik. Ugyanakkora eredő kompenzálatlanságot egy-két rétegbe sűrítve (gondoljunk a páratlan rétegszámú esetre a pároshoz képest) alapvetően megváltoztathatja a rendszer viselkedését.

7. fejezet

Összefoglalás

7.1. Végesréteg-effektusok

Megmutattuk, hogy a két-alrács közelítéshez képest jelentősen új alapállapotai lehetnek a véges vékonyréteg-rendszereknek. Kis tereknél S vagy C alakú kollektív alapállapotot (aszerint, hogy a rétegszám páros vagy páratlan) tapasztalunk. Nagyobb tereknél a kollektív alapállapot folytonosan V alakba megy át. Mindig találunk egy olyan külső teret, amikor a két szélső momentum kivételével a többiek a két-alrácsnál is látható egzakt V alakot (falat) mutatják. Tovább növelve a külső terek a falból O hordó-állapotot kapjuk, majd telítődik a rendszer (I).

A számítógépes modellkísérletek alapján kijelenthetjük, hogy a rendszer (mint az várható), ha teheti inkább a felszíni (vagy egyéb, lokális hibahelyhez köthető) rétegeknél „perturbálódik” először, azaz itt kezdődnek az ugrások és a fázisátmenetek.

Vizsgáltuk a felületi spin-flop jelenségét is. Megvizsgáltuk az anizotrópia szerepét és azt találtuk, hogy egyedül uniaxiális anizotrópia esetén tapasztalható felületi spin-flop. Megmutattuk, hogy páros rétegszám esetén a nulla külső térnél AF $[0:180]$ álló momentumok a tömbi spin-flop érték alatt kicsavarodnak. Szimulációink mutatták az irodalomból ismert ugrásokat, bár a domén-fal jelleg nem volt egyértelmű. Felhívtuk a figyelmet, hogy a teljes hiszterézishurok bejárása esetén létezik egy másik végesréteg-effektus is, amikor telítésből csökkentve a teret a momentumok a minta középső rétegeinél frusztrálódnak, ismét mágnesezettség-ugrásokat keltve. Ez a jelenség azonban nem mérhető felületérzékeny (pl. MOKE) módszerekkel, mert nem a felületről indul.

7.2. Fe/FeSi

A csoportunk által korábban lemért és kiértékelt Fe/FeSi mintájához kerestünk a végesréteg-effektusokat is figyelembe vevő modellt. Megmutattuk, hogy az új (9+1) modell jobban illeszkedik az eredeti (8+2) modellnél. A jobb illeszkedés oka, hogy figyelembe vettük a korántsem elhanyagolható végesréteg-effektusokat. Az általunk használt 9+1 modellbeli alsó réteg lecsatolódásának okozója a szubsztrát amorf szerkezete.

7.3. Fe/Cr

A leuveni Fe/Cr mintán elvégzett neutron-reflektometriai mérések felhasználásával megpróbáltuk megérteni az ott tapasztalt tömbi spin-flop jelenségét. Megvizsgáltuk a vékonyréteg-szerkezet viselkedésének függését az anizotrópia/AF csatolás arányától és az anizotrópia könnyű tengelyének külső mágneses térrel bezárt szögétől (*misalignment*). Azt találtuk, hogy a minta forgatására sokkal kevésbé érzékeny a rendszer, mint az $A/|J|$ arány változására. $A/|J|$-re nagyságrendi felső becslést adtunk abból a tényből kiindulva, hogy Eddy Kunnen nem talált kiértékelhető eltérést a könnyű és a nehéz irányú mágneses hiszterézisgörbék között.

A. Függelék

A szimulációkhoz írt számítógépes programcsomag

A feladathoz saját fejlesztésű energia-minimalizáló programot készítettünk. A program rugalmas, azzal elvben tetszőleges véges paraméterű energiafüggvény minimalizálható[1]. Tömörsége és flexibilitása nagyrészt annak köszönhető, hogy a már meglévő programok (Maple, Gnuplot) lehetőségeit megpróbálja maximálisan kihasználni. A minimalizáláshoz szükséges deriváltakat például a Maple program számolja ki, majd az így keletkező függvényeket C nyelvű kódba fordítjuk. A szimuláció eredményei pedig Gnuplottal – a megfelelő adatátalakító szűrők lefuttatása után – tekinthetők meg. A már kész modellek között könnyen válthatunk, a szimuláció paramétereit menet közben változtathatjuk. A program kimenete a szimulációs log-file, ami egyrészt tartalmazza az azonosításhoz szükséges paramétereket (modell, konstansok, kiadott parancsok) és a szimuláció során nyert adatokat (külső mágneses tér, eredő mágnesezettség iránya és nagysága, a rendszer teljes szabadenergiája és a réteg-mágnesezettségek x tengellyel bezárt szöge).

A program még mindig fejlesztés alatt áll. Nem eléggé felhasználóbarát például a kezelői felülete. A közelövő tervei között szerepel a minta síkjából kiforduló momentumok szimulálása. Javítani kell a minimumkereső „motor"-on is, hogy még érzékenyebb legyen a lokális minimumok eltűnésére. A már kipróbált opciók:

- „globális" minimumkeresés[2],
- kezdőállapot (szögek) megadása, betöltése és kimentése,
- minimumkeresés egy pontban (ez a program alapeleme),
- minimumkeresés egyenes, hurok mentén (hiszterézis H külső tér változtatása esetén),
- minimumkeresés egyenes mentén, tetszőleges paraméter változtatásával,
- egyéb hasznos utasítások (pl. szabadenergia számolása adott konfigurációhoz).

A szimulációs program vezérlő része még nem tökéletes, így segéd-scriptek írásával kell megoldanunk a még be nem kódolt feladatokat (pl. egymásba ágyazott ciklusok). A sriptek adatfeldolgozó feladatot is ellátnak, a különböző ábrákhoz igazítják a szimuláció eredményét.

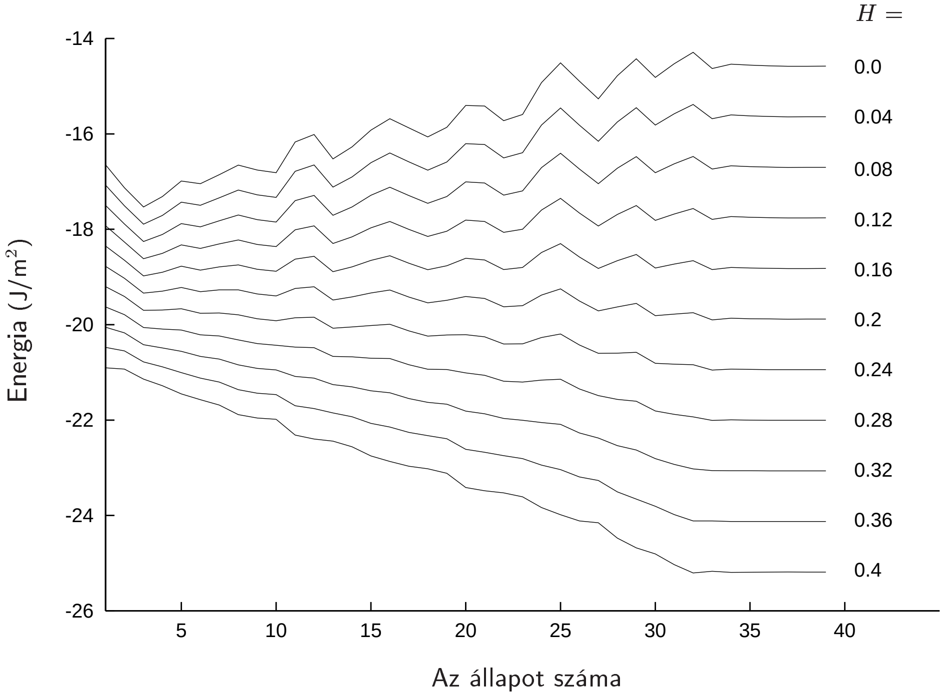
A szimulációk során felgyülemlett tapasztalat alapján jelenleg a programot két üzemmódban használjuk. Ezeket jellegüknél fogva ‚statikus' és ‚dinamikus' üzemmódoknak hívjuk.

A.1. Dinamikus üzemmód

Ez volt az első és egyben egyszerűbb használati mód. Ekkor egy adott kezdeti konfiguráció betöltése után az egyik paramétert (általában a külső mágneses teret) változtatjuk, és feljegyezzük a minimumokat. Ezen minimumok sorozatát tekintjük a rendszer „folytonos" fejlődésének. Fontos megjegyezni, hogy itt is végig adiabatikus alapállapot-keresés folyik, a rendszerben fizikailag *nincs* dinamika. A ‚dinamika' kifejezésen itt a mozgóképek folytonos változását értjük. A rendszer megfelelő szimulálásához megfelelő kis lépésközt tapasztalat útján lehet beállítani. Természetesen a szögeket nem jegyezzük fel minden lépés után, hiszen akkor nagyságrendileg $10\,000 - 100\,000$ szimulációs pontot tartalmazó táblázatokat kapnánk.

[1] Jelenlegi formájában azonban elvárás, hogy a bemenő változók síkban forgó szögek legyenek, mert pl. az értelmezési tartomány (egyelőre) rögzített.

[2] Nem igazán globális, csak a kezdéskor véletlenszerűen letapogatja a fázisteret, és a legkisebb függvényértéknél kezdi meg a minimalizációt.



A.1. ábra: A rendszer energiaútja különböző H külső tereknél.

A.2. Statikus üzemmód

Ennek az üzemmódnak a használatára az ugrások mágneses térbeli helyének pontosabb meghatározásához volt szükség. A program ugyanis nagyon érzékeny arra, hogyha egy eddigi lokális minimum a paraméterek folytonos változtatása miatt lokális maximummá válik, de a nyeregpontok felismerésében még nem jeleskedik.

Statikus üzemmódban a rendszer kiinduló állapota egy ‚enyhén gerjesztett' konfiguráció (részletesen lásd alább), melyre adott külső h' (redukált) mágneses tér esetén történt minimumkeresés. A külső tér függvényében a rendszer különböző minimumokat választott, ami jelzésértékű a spin-flop átmenet várható helyét és kiterjedését illetően.

Az ‚enyhén gerjesztett' (perturbált) állapot kiválasztására egy, a vizsgált vékonyréteg-rendszerből a program által természetesen adódó állapotot választottunk. „Folytonos" üzemmódban (azaz $h' = 0$, antiferromágneses alapállapot, majd h' fokozatos növelésével) eljutunk a spin-flopig. Ez a spinflop h'-ben jóval túl van a kívánt értéken, és csak az biztos, hogy ekkor az alapállapot már lokális maximum.

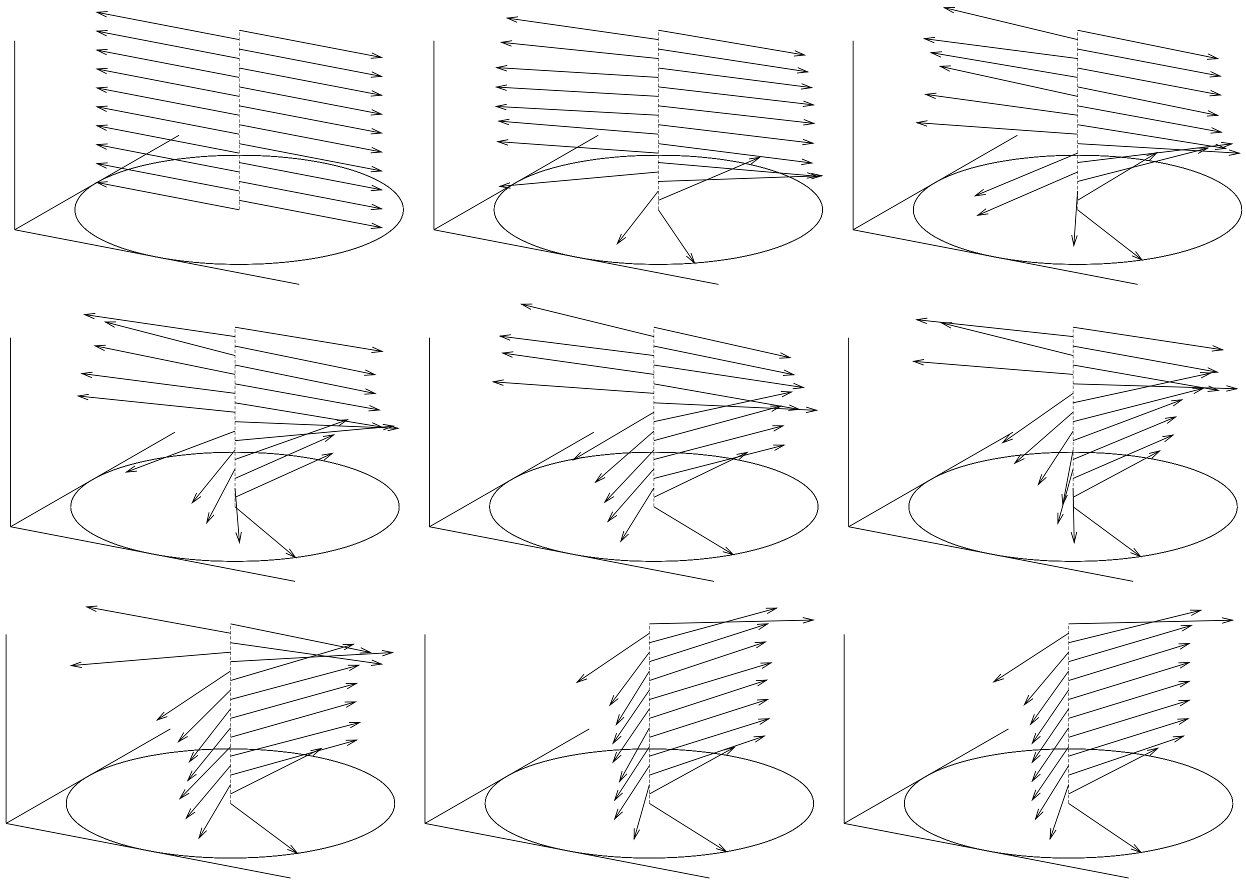
A lokális maximumból minimumba vezető „matematikai" út is sokat elárul a rendszerről. A program ugyanis konjugált-gradiens módszerrel[8] dolgozik, azaz szemléletesen „lerohan" az energia-lejtőn. Ezért, ha megvizsgáljuk azokat az állapotokat, amiket a rendszer felvesz ezen *matematikai* úton, értékes információkat nyerhetünk. Az A.1 ábráról például leolvasható, hogy a rendszer[3] már jóval a spin-flop megtörténte előtt (ez H=0.334 Tm értéknél következett be) el tudott volna jutni a kisebb energiájú állapotba. Közelítő képet kaphatunk a rendszer útjában álló energiaküszöbökről is[4].

Vessünk egy pillantást a matematikai minimalizálás során felvett állapotokra is! Ezek közül látható néhány az A.2. ábrán. Látszik az (amit sejthettünk is), hogy a perturbációk a szélső rétegeknél kezdődnek (erre lesz a gradiens – amerre a rendszer először „lép").

Az energia-út ismeretében, látva a leküzdendő akadályokat, választhatunk egy megfelelő kezdőállapotot. Ezek után pedig megvizsgálhatjuk, hogy a rendszer különböző kezdőfeltételekkel (külső tér, ϑ, $A/|J|$) elindítva hol lesz egyensúlyban. Minden egyes új kezdőfeltétel-halmazhoz újra betöltjük a gerjesztett állapotot, és abban az egy paramétertérbeli pontban minimalizálunk. Ezért hívjuk ezt „statikus" üzemmódnak. Ezzel az eljárással finomabb képet kaphatunk a rendszer ‚akadálykerülő' képességére. Fontos még, hogy ne legyen túlságosan perturbált a rendszer, azaz ne válasszunk a matematikai út végéről, mert akkor gyakorlatilag átsegítettük minden energiagáton.

[3] A most vizsgált rendszer négyfogású anizotrópiával rendelkezik, 20 kettősréteget tartalmaz. Az állandók értéke rendre M=4.0 Tm, J=-1.0 J/m^2, A=0.08 J/m^2.

[4] Ez egy lehetséges útja a rendszernek, de nem jelenti azt, hogy nincs még jobb, ami kisebb energiaküszöb leküzdésével jár. Pont ezt fogjuk kihasználni a „gerjesztett állapot" statikus vizsgálatánál.



A.2. ábra: A spin-flop minimalizálás során bejárt út néhány állomása. A bal felső ábrán látható az ugrás előtti állapot, míg a jobb alsó ábra az ugrás utáni egyensúlyi helyzetet mutatja. A második ábrán (legfelső sor, középső) látható állapotot használjuk enyhén gerjesztett állapotként. A minimalizálás során felvett állapotok (a másodiktól a nyolcadik kép) rendre megfelelnek A.1. ábra 3., 8., 12., 18., 22., 28. és 34. lépésének.

A statikus minimumkeresés első tapasztalataink szerint jól adja vissza a paraméterfüggés jellegét, azonban még mindig nem eléggé pontos. Amíg azonban nem készül el az alaposabban minimalizáló rutin, addig ezt az üzemmódot vagyunk kénytelenek használni.

A.3. Szög-szög függvények

Mint már említettük, a programcsomag még nincs üzemszerűen beépítve a többi (MOSFUN, EFFI) fittelőprogramba. A végesréteg-effektusokat ezért ezen illesztőprogramoknál másképp kellett figyelembe venni. Azt az utat választottuk ezért, hogy az általunk fittelt adatokat táblázatba foglaljuk, majd a MOSFUN meghívott egy ebből a táblázatból kiolvasó rutint és azt illesztette. A táblázat adataira folytonos függvényeket illesztettünk, így szögenként néhány paraméterrel le tudtuk írni a táblázatunkat.

A MOSFUN bemenő paramétere a legfelső réteg-mágnesezettség külső mágneses térrel bezárt szöge volt, és ebből kellett előállítani a többi szöget (jelen esetben 9-et). Ezt a szög-szög függvények polinomokkal való illesztésével oldottuk meg. Tíz antiferromágnesesen csatolt réteg esetén egyetlen függvényhalmaza elég volt a leíráshoz, míg a 9+1 modellhez két külön halmazra volt szükség. Ennek oka a szög-szög ‚függvények' többértékűsége miatt volt szükség. Szerencsénkre azonban két – viszonylag nagy – szögtartományban sikerült előállítani a megfelelő függvényeket, és így még mindig tudtuk illeszteni mindkét mérést, csak a két méréshez más-más paraméter-készletű modellt kellett használni.

B. Függelék

Atomi spin-flop

A fejezet címében hangsúlyozott ‚atomi' azt jelenti, hogy itt ténylegesen atomi spinek antiferromágneses rendeződéséről van szó. Dolgozatunkban a vékonyrétegek antiferromágneses csatolásával foglalkoztunk, ahol egy-egy makroszkópikus réteg volt AF csatolásban szomszédaival. Ettől függetlenül a fenomenológikus egyenletek megegyeznek. Ebben a függelékben a ‚hagyományos' számolások néhány eredményét mutatjuk be.

Könnyű irányban mágnesezett tömbi antifferomágnesben (például MnF_2 a Néel-hőmérséklete alatt) elsőrendű fázisátmenet, úgynevezett spin-flop figyelhető meg. A jelenség leírása megtalálható [3] 384-390. oldalain[1]. A jelenség lényege, hogy uniaxiális anizotrópia esetén a kezdetben antiferromágneses alapállapot egy kritikus külső tér-értéket elérve kihajlik.

B.1. Tömbi spin-flop

Nulla hőmérsékleten uniaxiális anizotrópiával rendelkező tömbi antiferromágneses anyagok esetében is két alapvetően eltérő alapállapot lehetséges. A momentumok állhatnak a térre merőlegesen, enyhén kihajolva, illetve a térrel párhuzamosan, egzaktul szembe egymással. Az uniaxiális energiagát biztosítja a párhuzamos alapállapot stabilitását, hiszen külső mágneses tér bekapcsolása esetén (anizotrópia nélkül) a merőleges beállás energiája mindig kisebb lenne, mint a párhuzamosé. A nulla hőmérsékletű számolások megegyeznek a dolgozatban is megtalálhatóval (5.1. fejezet, 28. oldal), ezért ezt itt nem ismételjük.

Hőfürdőbe helyezve a rendszert, vizsgálhatjuk a szuszceptibilitás hőmérsékletfüggését. A két alapállapot miatt érdemes a párhuzamos és a merőleges szuszceptibiltást külön-külön meghatározni. Átlagtér-közelítésben kapjuk[2], hogy a merőleges szuszceptibilitás a Néel hőmérséklet alatt független a hőmérséklettől, míg a párhuzamos szuszceptibilitás nulla hőmérsékleten nulláról indul, majd T_N-nél $\chi_{\shortparallel} = \chi_{\perp}$

B.2. Felületi spin-flop

D.L. Mills és W.M. Saslow elméleti számítások alapján megjósoltak egy másik elsőrendű fázisátmenetet is[16], az úgynevezett felületi spin-flopot. Ennek a fázisátmenetnek különböző mérési módszerekkel történő kimutatására (pl. az eredő mágnesezettség mérése, infravörös abszzorpciós spektrumbeli járulék, alacsony hőmérsékleti könnyű irányú szuszceptibilitási járulék) végeztek számolásokat. Felületi spin-flop számításaik során többször közelítették az eredeti kölcsönhatási tagokat azok elsőrendű korrekciójával.

F. Keffer és H. Chow [17] szerint Mills és munkatársa közelítéseik során elhagytak lényeges tagokat is, ezért a felületi spin-flop másképp fog lejátszódni, mint ahogy azt Mills és munkatársa megjósolta. Szerintük növekvő külső térrel a felületi spin-flop állapot tartománya is növekszik, ellentétben Mills jóslatával, aki szerint a felületi spin-flop $2\,|J|\,/H$ tartományra[3] terjed ki, azaz növekvő külső tér esetén *csökken*.

Mindkét cikkben nulla hőmérsékleten, átlagtér közelítésben, az uniaxiális anizotrópiával bővített antiferromágneses elsőszomszéd csatolásos modellt alkalmazták (lásd 28. oldal), majd addig közelítettek és hanyagolták el a magasabbrendű tagokat, amíg nem jutottak szerintük lényeges eredményhez. Keffer és Chow szerint a felületi spinflop fejlődése a következő: H_1 külső térnél (lásd a B.1. táblázatot) a felületi magnon gerjesztések frekvenciája nullához tart (magnon lágyulás) és kialakulnak a felületi spin-flop (FSP) régiók[4]. Ilyen régiók

[1] Simon Foner: Antiferromagnetic and Ferrimagnetic Resonance

[2] Például [3] 387. oldal vagy [2] 113. oldal.

[3] Az állandókat átváltottuk a dolgozatban használt mértékegység-rendszerre.

[4] A spin-flop mindig a külső mágneses térrel szemközt álló spineknél kezdődik, mert ők lesznek instabil helyzetben, amikor a lokális energia-minimumból kikerülnek.

Mágneses tér	Folyamat
$H_1 = \frac{2\sqrt{A\|J\|+A^2}}{M}$	A felületi magnononk frekvenciája eltűnik, FSP zónák megjelenése
$H_2 = \frac{2\sqrt{2A\|J\|-A^2}}{M}$	tömbi spin-flop (az AF és SF állapotok energiája megegyezik)
$H_3 = \frac{4\|J\|-2A}{M}$	A spin-flop állapot telítése (paramágneses fázishatár)

B.1. táblázat: A felületi spin-flop és a spin-flop átmenet lényeges állomásai Keffer és Chow[17] nyomán. H_1=H_s, $H_2 = H_c$ és $H_3 = H_t$. H_s-re csak szimulációs eredmény áll rendelkezésünkre. A Wang és munkatársai által használt adatokkal és modellel (5.3.3. fejezet) $H_1 = 1.12$ kG. Erre az értékre az általunk elvégzett szimulációk statikus és dinamikus üzemmódban rendre $H_s^D = 1.15$ és $H_s^S = 0.8$ kG értéket adtak. A Mills által is megadott elméleti határ pedig $H_s^E = 0.93$ kG.

nemcsak a felületen, hanem hibahelyeknél, diszlokációs vonalak mellett és egyéb inhomogenitásoknál is kialakulhatnak. A meglévő régiók H növekedtével lassan nőnek, majd H_2-t elérve robbanásszerűen kiterjednek az egész anyagra. Az FSP régió frontja Bloch-fal szerűen mozog. Mivel az FSP állapot energiája alacsonyabb, mint a tömbi spin-flop állapoté, a rendszer úgy kerüli meg az AF-SP energiagátat, hogy végig egyensúlyban marad. Ez a folyamat Keffer és Chow szerint teljesen reverzibilis, továbbá folytonos, azaz nem eredményez mágnesezettség ugrásokat.

C. Függelék

Analitikus számolások, megfontolások

C.1. AF-rendszer energia-minimuma

Vegyük az alábbi általános szabadenergia-függvényt:

$$\mathcal{F}(H) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{n-1} J_{ij}\cos(\vartheta_i - \vartheta_j) - H\sum_{i=0}^{n-1} M_i \cos\vartheta_i. \tag{C.1}$$

Itt megengedjük, hogy bármelyik réteg bármelyik másikkal kölcsönhasson. Természetesen $J_{ij} = J_{ji}$ és $J_{ii} = 0$, $(i = 0 \ldots n-1)$. A réteg-mágnesezettségek a rétegek síkjában fekszenek és a külső mágneses térrel ϑ_i szöget zárnak be. A rendszer szabadenergia-minimuma esetén a szögek szerinti deriváltaknak el kell tűnniük[1]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\vartheta_k} &= \frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{n-1}\delta_{ik}J_{ij}\sin(\vartheta_i - \vartheta_j) - \frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{n-1}\delta_{jk}J_{ij}\sin(\vartheta_i - \vartheta_j) + H\sum_{i=0}^{n-1}\delta_{ik}M_i\sin\vartheta_i = \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} J_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + HM_k\sin\vartheta_k.\end{aligned} \tag{C.2}$$

Vegyük a deriváltak összegét (minimumban ennek is el kell tűnnie):

$$\sum_{j=0}^{n-1}\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\vartheta_j} = \sum_{j=0}^{n-1}\sum_{i=0}^{n-1} J_{ij}\sin(\vartheta_i - \vartheta_j) + H\sum_{j=0}^{n-1} M_j\sin\vartheta_j \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.3}$$

Az összeg első tagja szimmetriaokokból nulla[2], ezért a második tagnak is el kell tűnnie. Írjuk át ezt a második tagot vektor jelöléssel!

$$\sum_{j=0}^{n-1} HM_j\sin\vartheta_j = \sum_{j=0}^{n-1}\mathbf{H}\times\mathbf{M}_j = \mathbf{h}\times\left(\sum_{j=0}^{n-1}\mathbf{M}_j\right) = \mathbf{H}\times\mathbf{M}_{össz} \tag{C.4}$$

Itt $\mathbf{M}_{össz}$ a rétegek eredő mágnesezettségét jelenti. Látható, hogy minimum esetén $\mathbf{H}$ párhuzamos $\mathbf{M}_{össz}$-el[3].

C.1.1. Lényeges paraméterek száma

Érdekes kérdés, hogy valójában hány darab független paraméterrel írható le a (C.1) rendszer. Vegyünk egy energia-minimumot, majd rögzítsük a szögeket. Ezek után skálázzuk át a paramétereket! Legyen $J'_{ij} = \alpha J_{ij}$, $M'_j = \beta M_j$, $H' = \gamma H$ ($\alpha > 0, \beta > 0$ és $\gamma > 0$). A vesszős mennyiségeket behelyettesítve (C.1) egyenletbe, egyensúly esetén a deriváltaknak ismét el kell tűnniük, azaz (C.2) analógiájára

$$\sum_{i=0}^{n-1} J'_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + H'M'_k\sin\vartheta_k = \alpha\sum_{i=0}^{n-1} J_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + \gamma\beta HM_k\sin\vartheta_k \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.5}$$

[1] A deriváltak zérus voltából azonban még nem következik, hogy minimumot találtunk.
[2] Az összes szögpár kétszer szerepel, $J_{ij} = J_{ji}$ és $\sin(\vartheta_i - \vartheta_j) = -\sin(\vartheta_j - \vartheta_i)$.
[3] És az is igaz, hogy egy irányba mutat, mert ellentétes beállás esetén szabad-energia maximumot kapunk.

Amennyiben az eredeti feltételrendszer teljesült, úgy utóbbi csak akkor teljesülhet minden j-re és tetszőleges konfigurációra, ha

$$\alpha = \gamma\beta \rightarrow \frac{\alpha}{\beta\gamma} = 1. \tag{C.6}$$

Ez viszont egyből csökkenti a független paraméterek számát, ugyanis

$$\frac{J'_{ij}}{M'_j H'} = \frac{\alpha J_{ij}}{\beta M_j \gamma H} = \frac{J_{ij}}{M_j H} = \text{konstans (minden } i\text{-re és } j\text{-re)} \tag{C.7}$$

Speciálisan elsőszomszéd antiferromágneses-csatolás esetén[4] (amikor $J_{ij} = J$, ha $j = i + 1$ és $J_{ij} = 0$ egyébként), valóban egy paraméter mentén felírható a rendszer összes állapota. Elegendő

$$\mathcal{F}(p)\text{-t vizsgálni, ahol } p = \frac{HM}{J}, \tag{C.8}$$

hiszen ha olyan úgy változtatjuk meg a paramétereket, hogy p közben nem változik, akkor a fenti levezetés értelmében nem jutunk új állapothoz[5]. Megfordítva: amíg p bejárja az értelmezési tartományát, a rendszer összes különböző állapotát megkapjuk. A dolgozatban az előzővel ekvivalens $p = \frac{HM}{|J|}$ paramétert választottuk.

C.2. Uniaxiális anizotrópia esete

Vegyük az uniaxiális anizotrópiát is tartalmazó általános csatolást megengedő energia-függvényt:

$$\mathcal{F}(H) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=0}^{n-1} J_{ij}\cos(\vartheta_i - \vartheta_j) - \sum_{i=0}^{n-1} A_i \cos^2\vartheta_i - H\sum_{i=0}^{n-1} M_i\cos\vartheta_i. \tag{C.9}$$

Végezzük el ezen a rendszeren is az előző vizsgálatokat! A deriváltba az uniaxiális anizotrópia miatt új tag kerül:

$$\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\vartheta_k} = \sum_{i=0}^{n-1} J_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + 2A_k\cos\vartheta_k\sin\vartheta_k + HM_k\sin\vartheta_k. \tag{C.10}$$

Egyensúly esetén ezen deriváltak mind nullák, így azok összege is eltűnik:

$$\sum_{k=0}^{n-1}\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\vartheta_k} = \sum_{k=0}^{n-1}\sum_{i=0}^{n-1} J_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + 2\sum_{k=0}^{n-1} A_k\cos\vartheta_k\sin\vartheta_k + H\sum_{k=0}^{n-1} M_k\sin\vartheta_k \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.11}$$

A csatolási mátrixot tartalmazó tag szimmetriaokokból ismét nulla. Vizsgálatainakban most szorítkozzunk az $A_k = A$ és $M_k = M$ esetre. Ekkor

$$A\sum_{k=0}^{n-1}\sin 2\vartheta_k + HM\sum_{k=0}^{n-1}\sin\vartheta_k \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.12}$$

Most már nem biztos, hogy a rendszer eredő mágnesezettsége párhuzamos lesz a külső térrel! Két-alrácsos modellt véve azonban a mellékfeltételek miatt triviálisan ismét párhuzamos konfigurációhoz jutunk.

C.2.1. Független paraméterek száma

Vizsgáljuk meg ismét a független paraméterek számát. Átskálázva a változókat a derivált

$$\frac{\partial\mathcal{F}'}{\partial\vartheta_k} = \alpha\sum_{i=0}^{n-1} J_{ik}\sin(\vartheta_i - \vartheta_k) + 2\beta A_k\cos\vartheta_k\sin\vartheta_k + \gamma HM_k\sin\vartheta_k. \tag{C.13}$$

[4]Az antiferromágneses rendszerek részletesebb tárgyalása megtalálható a 6. oldalon.

[5]Például kétszer akkora réteg-mágnesezettségek esetén fele lesz az a tér az eredetinek, ami ugyanazt a rétegmágnesezettség-konfigurációt állítja elő.

Itt rendre $J'_{ij} = \alpha J_{ij}$, $A'_i = \beta A_i$ és $H' M'_k = \gamma H M_k$[6] ($\alpha, \beta, \gamma > 0$). Ahhoz, hogy ugyanazt az állapotot kapjuk, most két egyenletet is teljesítenünk kell:

$$\frac{\beta}{\alpha} = 1 \text{ és } \frac{\gamma}{\alpha} = 1. \tag{C.14}$$

Ezek szerint ez a rendszer (az ekvivalencia-osztályok megtalálása után) két független paraméterrel jellemezhető[7]. Ez a két paraméter a dolgozatban

$$p_1 = \frac{A}{|J|} \text{ és } p_2 = \frac{hM}{|J|}. \tag{C.15}$$

p_i paraméterek ($i = 1, 2$) mértékegysége egységnyi. Választhattuk volna J-t is $|J|$ helyett, de a mostani választással $p_1 > 0$, ami jobb jelölésnek látszik. Vegyük észre, hogy fenti definícióval $p_2 = \frac{1}{4} h'$

C.3. Négyfogású anizotrópia

Vizsgáljuk meg a következő rendszer[8] alapvető tulajdonságait:

$$\mathcal{F}(H) = -J \sum_{i=0}^{n-1} \cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) + A \sum_{i=0}^{n} \sin^2 2\vartheta_i - HM \sum_{i=0}^{n} \cos\vartheta_i. \tag{C.16}$$

A jelölések itt is megegyeznek a dolgozatban végig használt jelölésekkel és mértékegységekkel. Részletesen lásd a 2.2. fejezetben a 4. oldalon.

C.3.1. Végtelen határeset – két-alrács

Vizsgáljuk meg először a két-alrácsos esetet, amit eddig is a végtelen határesetnek vettünk! A kihajolt állapot szabadenergia-függvénye:

$$\mathcal{F}(H) = -2J\cos(2\vartheta) + 2A\sin^2 2\vartheta_i - 2HM\cos\vartheta_i. \tag{C.17}$$

Nagy külső tereknél biztosan ez a stabil, de kis tereknél ($h' \approx 0$) most már az antiferromágneses alapállapot kétféleképpen is megvalósulhat: a $[-90:90]$ és a $[0, 180]$ beállás is stabilizálódik a négyfogású anizotrópia által, így mindkét lehetőséget figyelembe kell venni.

Határozzuk meg a minimum feltételét! $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \vartheta} \stackrel{!}{=} 0$-ból algebrai átalakítással kapjuk:

$$-2\,J\sin\vartheta\cos\vartheta + 16\,A\sin\vartheta\,(\cos\vartheta)^3 - 8\,A\sin\vartheta\cos\vartheta + HM\sin\vartheta \stackrel{!}{=} 0 \tag{C.18}$$

Örömmel tapasztaljuk, hogy a $\sin\vartheta = 0$ még mindig megoldás, azaz nagy tér esetén ferromágneses lesz a minta. Vizsgáljuk tovább a másik esetet!

$$-2\,J\cos\vartheta + 16\,A\,(\cos\vartheta)^3 - 8\,A\cos\vartheta + HM \stackrel{!}{=} 0 \tag{C.19}$$

Ez $\cos\vartheta$-ben harmadfokú egyenlet. Ugyan egzaktul megoldható, de H_t telítési mágnesezettség értéket belőle analitikusan számolni nem lehet.

C.3.2. Lényeges paraméterek száma

Vegük az általánosabb egyenletet(C.16), és határozzuk meg ismét a minimum szükséges feltételét!

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \vartheta_i} = Jf_1(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) + Af_2(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) + HMf_3(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) \stackrel{!}{=} 0 \tag{C.20}$$

A konkrét deriváltak kiszámolása egyszerű (ezek rendre az f_1, f_2 és f_3 függvények), de jelen esetben csak az számít, hogy a három taghoz összesen két paraméter tartozik, ugyanis leosztva például $J(\neq 0)$-val

$$f_1(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) + \frac{A}{J} f_2(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) + \frac{hM}{J} f_3(\vartheta_0, \vartheta_1, \ldots, \vartheta_n) \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.21}$$

Azaz egy adott szög-konfiguráció minimális lehet, hogyha $p_1 = \frac{A}{|J|}$ és $p_2 = \frac{hM}{|J|}$ állandó. Amennyiben egyik eredeti paraméter előjelét sem változtatjuk meg a transzformáció során, úgy minimális is lesz.

[6] Az utolsó tagnak elég volt egy skálafaktor, mert csak a szorzatuk szerepel a szabadenergia-függvényben.

[7] Végig nagyon fontos volt, hogy az egyes tagok skálafaktorai az összes elemnél egyformák legyenek. Például, ha $M'_1 = \gamma_1 M_1$ és $M'_2 = \gamma_2 M_2$ ahol $\gamma_1 \neq \gamma_2$, akkor „fizikailag” más rendszerről van szó, és nem is várható el, hogy újabb paraméter bevezetése nélkül leírható legyen.

[8] $\sin^2 2\vartheta_i = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos 4\vartheta$ azonosság felhasználásával már szembeötlő a négyfogású szimmetria (a konstansok a deriválásnál kiesnek).

C.3.3. „Csálé beállás”

Amennyiben a mintánk beállítása nem tökéletes, úgy ezt egy ϑ szög bevezetésével vehetjük figyelembe, ami megadja a rendszer aniotrópiája és a külső tér által bezárt szöget. Ekkor a szabadenergia-függvény

$$\mathcal{F}(\vartheta, H) = -J\sum_{i=0}^{n-1}\cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+1}) + A\sum_{i=0}^{n}\sin^2(2(\vartheta_i - \vartheta)) - HM\sum_{i=0}^{n}\cos\vartheta_i \tag{C.22}$$

A független paraméterek számának meghatározásához kövessük az előző részben alkalmazott gondolatmenetet! A derivált felírása után most az anizotrópiát tartalmazó tagban lesz különbség. Azonban ϑ-t már nem tudjuk kiemelni a többi állandóhoz hasonlóan, így ez lesz a harmadik független paraméter (p_3), amivel a rendszer viselkedését jellemezni tudjuk.

Irodalomjegyzék

[1] Günter Schatz, Alois Weidinger, Nuclear condensed matter physics (Nuclear methods and applications), John Wiley & Sons Ltd, Chichester 1996 (második kiadás)

[2] R.M. White, Quantum Theory of Magnetism (Second Corrected and Updated Edition), Springer-Verlag Berlin, 1983

[3] George T. Rado, Harry Suhl (editors), Magnetism, Volume I, Academic Press (1963)

[4] David Jiles, Introduction to Magnetism and Magnetic Materials, Chapman and Hall, London (1991)

[5] L. Marton (editor) Methods od Experimental Physics, Volume 11: Solid State Physics (edited by R.V. Coleman), Academic Press, New York (1974)

[6] Johannes Meersschaut, Magnetic multilayers studied with nuclear methods, Institut voor Kern- en Stralingsfysica; Katholieke Universiteit Leuven, Belgium (1998)

[7] Deák László, A szinkrotronsugárzás nukleáris rezonanciaszórása vékonyrétegeken, súroló beesésben, PhD értekezés, ELTE, Budapest (1999)

[8] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Numerical Recipes (The Art of Scientific Computing), Cambridge University Press (1989)

[9] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, Phys. Rev. Lett. **57**, 2442 (1986)

[10] E. Gerdau, R. Rüffer, H. Winkler, W. Tolksdorf, C.P. Klages, J.P. Hannon, Phys. Rev. Lett. **54**, 853 (1985)

[11] L. Bottyán, J. Dekoster, L. Deák, A.Q.R. Baron, S. Degroote, R. Moons D.L. Nagy, G. Langouche, Layer magnetization canting in ^{57}Fe/FeSi multilayer observed by synchrotron Mössbauer reflectometry, Hyperfine Interactions, **113** 295 (1998)

[12] J. Dekoster, S. Degroote, J. Meersschaut, R. Moons, A. Vantomme, L. Bottyán, L. Deák, E. Szilágyi, D.L. Nagy, A.Q.R. Baron, G. Langouche; Interlayer exchange coupling, crystalline and magnetic structure in Fe/CsCs-FeSi multilayers grown by molecular beam epitaxy grown by ion beam sputtering, megjelenik 1999-ben (Hyp. Int.)

[13] L. Deák, L. Bottyán, D.L. Nagy: Calculation of nuclear resonant scattering spectra of magnetic multilayers, Hyp. Int., **92** 1083 (1994)

[14] A.Q.R. Baron, J. Arthur, S.L. Ruby, A.J. Chumakov, G.V. Smirnov, G.S. Brown, Angular dependence of specular resonant nuclear scattering of x rays, Phys. Rev. B**50**, 10354 (1994)

[15] V.V. Ustinov, N.G. Bebenin, L.N. Romashev, V.I. Minin, M.A. Milyaev, A.R. Del, A.V. Semerikov, Magnetoresistance and magnetization of Fe/Cr(001) superlattices with noncollinear magnetic ordering, Phys. Rev. B **54**, 15958 (1996)

[16] D.L. Mills, W.M. Saslow, Surface Effects in the Heisenberg Antiferromagnet, Phys. Rev. **171** 488 (1968); D.L. Mills, Surface Spin-Flop State in a Simple Antiferromagnet, Phys. Rev. Lett. **20** 18 (1968)

[17] F. Keffer, H. Chow, Dynamics of the Antiferromagnetic Spin-Flop transition, Phys. Rev. Lett. **31**, 1061 (1973)

[18] F.C. Nörtemann, R.L. Stamps, A.S. Carriço, R.E. Camley, Finite-size effects on spin configurations in antiferromagnetically coupled multilayers, Phys. Rev. B **46**, 10847 (1992)

[19] R.W. Wang, D.L. Mills, Eric E. Fullerton, J. E. Mattson, S.D. Bader, Surface Spin-Flop Transition in Fe/Cr(211) Superlattices: Experiment and Theory, Phys. Rev. Lett. **72**, 920 (1994)

[20] Eric E. Fullerton, M.J. Conover, J.E. Mattson, C.H. Showers, S.D. Bader, Oscillatory interlayer coupling and giant magnetoresistance in epitaxial Fe/Cr(211) and (100) superlattices, Phys. Rev. B **48** 15755 (1993)

[21] S. Rakhmanova, D.L. Mills, Eric E. Fullerton, Low-frequency dynamic response and hysteresis in magnetic superlattices, Phys. Rev. B**57**, 476 (1998)

[22] J. Kohlhepp, M. Valkier, A. van der Graaf, F.J.A. den Broeder, Mimicking of a strong biquadratic interlayer exchange coupling in Fe/Si multilayers, Phys. Rev. B **55**, R696 (1997)

[23] M. Rührig *et al.*, Phys. Status Solidi A, **125**, 635 (1991); J. Unguris, R.J. Celotta, D.T. Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991)

[24] A. Chaiken, R.P. Michel, M.A. Wall; Structure and magnetism of Fe/Si multilayers grown by ion-beam sputtering, Phys. Rev. B **53**, 5518 (1996)

[25] J.A. Carlisle, A. Chaiken, R.P. Michel, L.J. Terminello, J.J. Jia, T.A. Callcott, D.L. Ederer; Soft-x-ray fluorescence study of buried silicides in antiferromagnetically coupled Fe/Si multilayers, Phys. Rev. B **53**, 8824 (1996)

[26] R. Rüffer, A.I. Chumakov, Hyp. Int. **97-98**, 589 (1996)

[27] W. Folkerts, Calculated magnetic phase diagrams and magnetoresistance curves for an antiferromagnetically coupled multilayer system, JMMM **94**, 302 (1991)

[28] E.W. Müller, MOSFUN, Internal report, Anorganische Chemie und Analitische Chemie, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, 1982

[29] H. Spiering, ftp://iacgu7.chemie.uni-mainz.de/pub/effi

[30] S. Adenwalla, G.P. Felcher, Eric E. Fullerton, S.D. Badler, Polarized-neutron-reflectivity confirmation of 90°magnetic structure in Fe/Cr(001) superlattices, Phys. Rev. B**53**, 2474 (1996)