

Atomi spindinamika véges hőmérsékleten

TDK dolgozat

Készítette: Rózsa Levente
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Természettudományi Kar
Fizikus MSc II. évfolyam

Témavezető: Dr. Udvardi László
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék

Dolgozat tartalmilag lezárva: 2011. 10. 27.
Végső formázás: 2012. 05. 11.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Az atomi spindinamika alapegyenlete: a sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet	2
2.1. Landau-Lifsic-egyenlet	2
2.2. Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet	3
2.3. Az effektív tér számítása	4
2.4. Sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet	6
2.5. A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet numerikus megoldása	8
3. A szimulációs program	9
4. A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet linearizált alakjának megoldása ferromágneses alapállapot körül	11
4.1. Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet lokális koordinátákban	11
4.2. Magnonspektrum	12
4.3. A mozgásegyenletek közelítő megoldása	14
4.4. A linearizált egyenletek megoldása $\mathbf{0}$ hullámszámon	18
4.5. A linearizált mozgásegyenletek megoldása véges hullámszámú külső gerjesztés esetén . . .	21
4.6. Perturbációszámítás a szimmetrikus nemdiagonális csatolásra	22
5. Szimulációs eredmények	25
5.1. Gerjesztés homogén mágneses térrel	25
5.2. Gerjesztés inhomogén mágneses térrel	30
5.3. Gerjesztés homogén mágneses térrel, rendezetlen rács esetén	32
5.4. Dinamikus struktúrafaktor	35
6. Összefoglalás	40

1. Bevezetés

A mágneses anyagok viselkedése napjainkban is széles körben kutatott terület, hiszen ezek rendkívül fontos szerepet játszanak az adattárolásban, illetve a spintronikában. Annak következtében, hogy ezekre a célokra egyre kisebb méretű mágneses szemcséket, illetve vékonyrétegeket használnak, illetve a számítógépek számítási sebessége egyre jobban nő, ezen anyagok vizsgálatára megfelelő eszköz lehet a numerikus szimuláció. Ezen rendszerek esetében a Monte Carlo-módszer mellett elterjedt a spindinamikai szimuláció is, mely a fenomenologikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenleten[1][2] alapszik. Ezt a módszert általában mikromágneses szimulációk esetén alkalmazzák[3], ahol az anyagot folytonos közegként kezelik, ami jó közelítés mikrométeres skálákon. Ennél kisebb méreteket vizsgálva azonban fontossá válik az anyagok atomos szerkezete, így célszerű lehet egy másik módszert, az atomi spindinamikát használni[4]. Ilyenkor az atomi mágneses momentumok közötti csatolást is érdemes valamilyen kvantummechanikai módszerrel, például a sűrűségfunkcionál-elmélet segítségével meghatározni.

Egy ferromágneses rendszer atomi szinten általában jól közelíthető a Heisenberg-moddal, mely valamilyen kicserélődési kölcsönhatást tételez fel egy rács szomszédos atomjai között, melynek következtében azok azonos irányban fognak beállni. A ferromágneses állapot körüli alacsony energiás gerjesztések, a magnonok vizsgálata is olyan következtetések levonására ad lehetőséget, melyek befolyásolják a vékonyrétegek viselkedését. Egyszerű Heisenberg-modell esetén a magnonspektrum könnyen kiszámítható, azonban más kölcsönhatások megengedése esetén a feladat jelentősen elbonyolódhat. Példa erre a hosszú távú dipól-dipól-kölcsönhatás, melynek hatására egy tömbi anyag, illetve egy vékonyréteg klasszikus elektrodinamikából számítható magnetosztatikus módusai jelentősen eltérhetnek[5]. Megmutatható[6], hogy ennek következtében a magnonspektrum minimuma eltolódhat a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ hullámszámtól, és a felületi hibák miatt a magnonok szóródhatnak is egymáson, a ferromágneses rezonancia vonalszélességének megváltozását és a rezonanciafrekvencia eltolódását okozva. Hasonló változások figyelhetők meg, ha makroszkopikus elmélet helyett diagrammatikus perturbációszámítás segítségével kezelik a magnon-magnon-szórást[7].

Jelen dolgozatban azonban a mágneses dipólusok közötti kölcsönhatás csak másodlagos szerepet kap, és elsősorban azt vizsgáljuk, hogy a spin-pálya-csatolás okozta Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás[8][9] milyen változásokat okoz a magnonok viselkedésében. A szimulációk során modellként egy tércentrált köbös rács (110) Miller-indexű felületén kialakított egy atom vastagságú mágneses réteget választottunk. Erről a rendszerről elméleti úton igazolható[10][11], hogy megjelenik benne a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás. Egy ilyen rendszer megvalósítása lehet a wolfrám (110) felületére epitaxiálisan növesztett egy atomsor vastag vas vékonyréteg. Hasonló kvázi kétdimenziós rendszerekben kiszámították ennek hatását a magnonspektrumra[12], és a fent említett rendszer esetén kísérletileg is igazolták[13], hogy a spektrum nem lesz szimmetrikus a Γ pontra és a minimumát véges hullámszámnál éri el. Ebből következik, hogy létezik olyan $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ hullámszámú magnon, amelynek megegyezik az energiája a Γ pontbeli magnon energiájával.

A dolgozat elején ismertetjük a dinamikát leíró sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletet (2. fejezet), majd röviden leírjuk a szimulációhoz használt atomi spindinamikai program működését (3. fejezet). A dolgozat további részében saját eredményeinket ismertetjük: a 4. fejezetben bemutatunk egy módszert arra, hogy a csatolások ismeretében kvantálás segítségével hogyan kapható meg a magnonspektrum, illetve hogyan oldható meg az egyébként nemlineáris Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet abban a közelítésben, ahol a ferromágneses egyensúlyi állapottól csak kis kitéréseket engedünk meg, így linearizálhatjuk a dinamikát. Az 5. fejezetben az elméleti úton számolt eredményeket összevetjük a programmal végzett szimulációkkal. Itt azt fogjuk megmutatni, hogy ha olyan rácsra végezzük a szimulációt, melyben hibák vannak, azaz a kváziimpulzus megmaradása nem teljesül, akkor a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következtében megváltozott spektrumban a $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ hullámszámú és a vele azonos energiájú, véges $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ hullámszámú, de azonos energiájú magnon közöttiszórási folyamatok felerősödnek. Ez a jelenség véges frekvenciájú, de $\mathbf{0}$ hullámszámú külső mágneses gerjesztés, azaz egy elektronspin-rezonancia (ESR) kísérlethez hasonló szimuláció esetén is megfigyelhető, ugyanis a rezonanciagörbe kiszélesedik. Végül a 6. fejezetben összefoglaljuk az elméleti, illetve szimulációs tapasztalatokat.

2. Az atomi spindinamika alapegyenlete: a sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet

2.1. Landau-Lifsic-egyenlet

Vizsgáljuk egy elektron mozgásának kvantummechanikai leírását. Ha az elektron a $\varphi_i(\mathbf{r})$ hullámfüggvénnyel (spinorral) leírható állapotban van, akkor a valószínűségi sűrűségfüggvénye, ami az adott pont környezetében való megtalálási valószínűséget adja meg, $\rho(\mathbf{r}) = \varphi_i^\dagger(\mathbf{r})\varphi_i(\mathbf{r})$. Ha az elektron mágneses viselkedését akarjuk leírni, a valószínűségi sűrűség mellett szükséges a mágnesezettségi sűrűség bevezetése is:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = -\mu_B \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Itt $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ a Bohr-magneton, $\boldsymbol{\sigma}$ pedig a három Pauli-mátrixot jelöli: mivel a hullámfüggvények itt spinorok, és a spinkomponensekben a mátrixszorzás szabályai szerint össze vannak szorozva a Pauli-mátrixokkal, a mágnesezettségi sűrűség itt egy valós térbeli vektor lesz. Ahhoz, hogy a mágnesezettségi sűrűségre mozgásegyenletet kapjunk, szükséges az időderiváltjának az ismerete. Ennek a indexű (valós térbeli) komponense:

$$\partial_t m_a(\mathbf{r}) = \mu_B (\partial_t (\varphi_i^\dagger(\mathbf{r})) \sigma_a \varphi_i(\mathbf{r}) + \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}) \sigma_a \partial_t \varphi_i(\mathbf{r})) \quad (2)$$

A hullámfüggvények időderiváltját pedig az időfüggő Schrödinger-egyenletből kaphatjuk meg:

$$i\hbar \partial_t \varphi_i(\mathbf{r}, t) = (H_0 + \mu_B \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma}) \varphi_i(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

Itt $H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ a Hamilton-operátor spintől nem függő része. A fenti egyenletet, illetve adjungáltját véve, és a megfelelő oldalról a Pauli-mátrixokkal, illetve a hullámfüggvény adjungáltjával szorozva a következő egyenleteket kapjuk (indexes írásmódban):

$$i\hbar \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) \sigma_a \partial_t \varphi_i(\mathbf{r}, t) = \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) \sigma_a (H_0 + \mu_B B_b \sigma_b) \varphi_i(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

$$i\hbar (\partial_t \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t)) \sigma_a \varphi_i(\mathbf{r}, t) = - \left((H_0 + \mu_B B_b \sigma_b) \varphi_i(\mathbf{r}, t) \right)^\dagger \sigma_a \varphi_i(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

A két egyenletet összeadva, a csak szorzóoperátorként megjelenő, a Pauli-mátrixokkal kommutáló potenciális energia tagok kiesnek, és az alábbi egyenletet kapjuk (koordináta-reprezentációban):

$$i\hbar \partial_t \left(-\frac{1}{\mu_B} m_a(\mathbf{r}, t) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) \sigma_a \Delta \varphi_i(\mathbf{r}, t) - (\Delta \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t)) \sigma_a \varphi_i(\mathbf{r}, t)) + \mu_B B_b \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) [\sigma_a, \sigma_b] \varphi_i(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

Itt a $[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c$ kommutátorazonosságot kihasználva, illetve közös divergenciára hozva az első tagot, az alábbi egyenletet kapjuk (ismét vektoros alakban), mely hasonlít a kontinuitási egyenletre[14]:

$$\partial_t \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \mathbf{j}_s - \frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B} \quad (7)$$

Itt $\mathbf{j}_s = -\mu_B \frac{\hbar}{2im} (\varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \nabla \varphi_i(\mathbf{r}, t) - (\nabla \varphi_i^\dagger(\mathbf{r}, t)) \boldsymbol{\sigma} \varphi_i(\mathbf{r}, t))$ a spin mágnesezettségi áramsűrűség. A következőkben olyan eseteket vizsgálunk, ahol nem folyik áram a rendszerben, így ez a tag nullának vehető[4]. Ez a számítás persze nem csak egy elektronra érvényes, hanem egy több elektront tartalmazó rendszerre is, ahol a sűrűséget és a mágnesezettséget egyrészecske-állapotokból számolt sűrűségek, illetve mágnesezettségek összegeként írhatjuk fel (mint a sűrűségfüggvény-elmélet Kohn-Sham-pályái esetén). A mágneses tér számításánál az adiabatikus közelítést[15] alkalmazzuk: a vizsgált térfogatot kisebb cellákra osztjuk fel (például egy kristályban a rácspontokban lévő atomok körüli gömbökre, melyek térfogata megegyezik az elemi cella térfogatával), és azon belül kiátlagoljuk a fenti Hamilton-operátort, majd ennek vesszük a mágnesezettségi sűrűség szerinti deriváltját:

$$\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})} \quad (8)$$

Ez az átlagolt mágnesezettség sokkal lassabban változik, mint ahogy az elektronok mozgását leíró folyamatok lezajlanak. Ekkor a fenti egyenlet az alábbi alakot ölti:

$$\frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

Ezt nevezik Landau-Lifsic-egyenletnek, mely alakilag megegyezik a $\frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m} = \gamma$ giromágneses aránnyal rendelkező, mágneses térben mozgó részecske klasszikus (Lorentz-erőből levezethető) mozgás-egyenletével. Azonban ez az egyenlet nem lineáris, ugyanis minden elemi cellára meg kell oldani, és adott elemi cellában a mágneses tér a többi cellában lévő mágnesezettség függvénye. A fenti egyenletben lát-szik, hogy a mágnesezettség vektor megváltozását egy rá merőleges irányú forgatónyomaték okozza, így (a klasszikus precessziós mozgáshoz hasonlóan) a vektor nagysága nem változik a mozgás során, ugyanis mindkét oldalt skalárisan szorozva $\mathbf{m}$ -mel, a következőt kapjuk:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \implies \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{m}^2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (10)$$

Így a Landau-Lifsic-egyenletet fel lehet írni a mágnesezettség irányába mutató egységvektorokra is, ha mindkét oldalt elosztjuk a mágnesezettség nagyságával. Ez a nagyság az anyagot jellemző telítési mágnesezettség, hiszen a teljes szilárd testben akkor egyezik meg mindenhol (azaz átlagosan is) a mágnesezettség a telítési értékével, ha minden elemi mágneses momentum ugyanabba az irányba mutat. Ezeket az egységvektorokat egy szilárd test rácspontjai esetében a továbbiakban $\boldsymbol{\sigma}_i$ -vel jelölve, ahol az i index a rácson belüli elhelyezkedést jelöli:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i(t)}{\partial t} = -\gamma \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times \mathbf{B}_i^{eff} \quad (11)$$

2.2. Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet

A fenti egyenletből az következik, hogy az elektronok mágneses momentuma végtelen hosszú ideig az effektív tér által kijelölt irány körül fog precesszálni. Bár ez az irány változhat a mozgás során, mivel az effektív tér függ a többi mágneses momentum irányától is, de nagy külső teret kapcsolva a rendszerre, leginkább annak az iránya fogja befolyásolni. A kísérletek szerint viszont külső mágneses tér hatására a mágnesezettség az ezen tér által kijelölt irányba fordul, anizotrop jelenségektől eltekintve. Ezért T. L. Gilbert az egyenlet módosítását javasolta a következő módon:

$$\frac{d\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\gamma \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r}) + \frac{\alpha}{M_S} \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \frac{d\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{dt} \quad (12)$$

Itt α egy dimenziótlan, fenomenologikusan bevezetett csillapítási konstans (a Gilbert-csillapítás), M_S pedig a mágnesezettség nagysága (a telítési mágnesezettség). Mivel a jobb oldal itt is merőleges az $\mathbf{m}$ vektor irányára, annak nagysága továbbra is időben állandó marad, így a fenti egyenlet is felírható az egységvektorokra is:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i(t)}{\partial t} = -\gamma \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times \mathbf{B}_i^{eff} + \alpha \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i(t)}{\partial t} \quad (13)$$

Vegyük mindkét oldal keresztszorzatát a $\boldsymbol{\sigma}_i$ vektorral:

$$\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} = -\gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) + \alpha \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t}) \quad (14)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} = -\gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) + \alpha \boldsymbol{\sigma}_i (\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t}) - \alpha \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} \quad (15)$$

A második keresztszorzatot itt átírtuk az ismert azonossággal, és kihasználtuk, hogy egységvektorokról van szó. Viszont a jobb oldal második tagja a vektor nagyságának megmaradása miatt $\mathbf{0}$, a harmadik tag helyére pedig az eredeti egyenletből vett értéket helyettesíthetjük:

$$\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} = -\gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) - \alpha \left(-\gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} + \alpha \boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} \right) \quad (16)$$

Ebből az egyenletből kifejezhető az eredetiben szereplő keresztszorzat értéke:

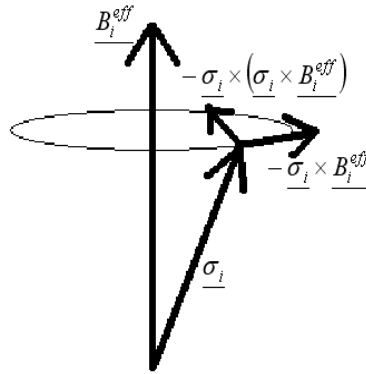
$$\boldsymbol{\sigma}_i \times \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff}) - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \left(-\gamma \boldsymbol{\sigma}_i \times \mathbf{B}_i^{eff} \right) \quad (17)$$

Ezt visszahelyettesítve az első egyenletbe, és bevezetve a $\gamma' = \frac{\gamma}{1+\alpha^2}$ jelölést, a Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletet kapjuk[16]:

$$\frac{\partial \sigma_i(t)}{\partial t} = -\gamma' \sigma_i(t) \times B_i^{eff} - \alpha \gamma' \sigma_i(t) \times (\sigma_i(t) \times B_i^{eff}) \quad (18)$$

$$\frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\gamma' \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r}) - \gamma' \frac{\alpha}{M_S} \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times (\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r})) \quad (19)$$

Az alábbi ábrán jobban látható, melyik tag okozza a σ_i vektor effektív tér körüli forgó mozgását, és melyik a tér irányában történő relaxációt:



1. ábra. A spinre ható forgatónyomaték két komponense

2.3. Az effektív tér számítása

Az effektív mágneses teret egy, az atom körüli kis térre átlagolt Hamilton-operátor (vagy a spinek szemiklasszikus kezelése esetén Hamilton-függvény) mágnesezettség szerinti deriváltjaként vezettük be. Egy rácsmodell esetén erre a Hamilton-függvényre jó közelítés, ha az energiát a különböző rácshelyeken vett spinek beállításának valamilyen bilineáris függvényeként írjuk fel. Legegyszerűbb esetben ez a bilineáris függvény lehet a két spin skalárszorzata, valamilyen csatolási állandóval szorozva, azaz a klasszikus Heisenberg-modell. Az ezt jellemző Hamilton-függvény a következő alakba írható:

$$H_{Heisenberg} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (20)$$

Itt az i, j indexek az elektronokat (a mi leírásunk esetében a szilárd test rácspontjait) indexelik, J_{ij} egy kölcsönhatást leíró konstans, a σ_i és σ_j vektorok pedig a korábban bevezetett, spin irányába mutató egységvektorok. A csatolási állandók definiálásánál ezentúl a fenti előjel-konvenciót használjuk, azaz a ferromágneses csatolásnak $J_{ij} < 0$ felel meg.

Ha a modellt ki szeretnénk terjeszteni úgy, hogy többek között a relativisztikus hatásokról, illetve a mágneses dipólusok közötti kölcsönhatásról is számot tudjon adni, akkor a kölcsönhatást leíró skalár helyére egy kétindexes tenzort írhatunk:

$$H_{Heisenberg} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_i^T J_{ij} \sigma_j \quad (21)$$

$$J_{ij} = \begin{bmatrix} J_{xx}^{ij} & J_{xy}^{ij} & J_{xz}^{ij} \\ J_{yx}^{ij} & J_{yy}^{ij} & J_{yz}^{ij} \\ J_{zx}^{ij} & J_{zy}^{ij} & J_{zz}^{ij} \end{bmatrix} \quad (22)$$

Itt megengedhetjük azt is, hogy ne csak a szomszédos rácspontok között jelenjen meg a kölcsönhatás. Ennek a modellnek egy lehetséges további általánosítása, ha a csatolási állandókat is függővé tesszük a

spinek beállításától, ebben az esetben ezeket a mozgásegyenlet megoldásával párhuzamosan mindig újra-számolva, ab initio szimulációt is végezhetünk, azonban a jelen dolgozatban használt program konstans csatolásokkal számol. Ezt a tenzort a következő módon bonthatjuk fel:

$$\mathbf{J}_{ij} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbf{J}_{ij}) \cdot \mathbf{I} + \left(\frac{\mathbf{J}_{ij} + \mathbf{J}_{ij}^T}{2} - \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbf{J}_{ij}) \cdot \mathbf{I} \right) + \frac{\mathbf{J}_{ij} - \mathbf{J}_{ij}^T}{2} \quad (23)$$

Itt az első tag egy egyetlen számmal jellemezhető tenzor (az egységtenzor konstansszorosa), $\frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbf{J}_{ij}) = J_{ij}$ helyettesítéssel a klasszikus modellt kapjuk vissza. A második tag egy szimmetrikus, nulla nyomú tenzor. Ilyen tenzorral írható le például a mágneses dipólusok közötti kölcsönhatást leíró energiatag:

$$E_{ij} = -\mathbf{m}_i \mathbf{B}_{ji} \quad (24)$$

Ez az i -edik helyen lévő dipólus potenciális energiája a j -edik dipólus terében. Ez a tér pedig dipólus rendig sorfejtve az alábbi alakba írható:

$$\mathbf{B}_{ji} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(3 \frac{\mathbf{r}_{ji} \circ \mathbf{r}_{ji}}{|\mathbf{r}_{ji}|^5} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{ji}|^3} \mathbf{I} \right) \mathbf{m}_j \quad (25)$$

Itt $\mathbf{r}_{ji}$ a j -ből i -be mutató helyvektor, a $\circ$ pedig a diadikus szorzatot jelenti, ami egy szimmetrikus tenzort ad eredményül, a teljes tenzor nyoma pedig nullának adódik. A harmadik tag pedig egy antiszimmetrikus tenzort ad, ami három számmal, azaz egy háromdimenziós vektorral jellemezhető, így a vele vett kvadratikus alak átírható a következő módon:

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_i^T \mathbf{J}_{ij} \boldsymbol{\sigma}_j = D_{ij} (\boldsymbol{\sigma}_i \times \boldsymbol{\sigma}_j) \quad (26)$$

Ez a tag írja le a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást. A Heisenberg-tag mellett figyelembe kell venni azt is, hogy a kristályszerkezetből adódóan megjelenhet egy olyan anizotrópia tag, amely a többi spin beállításától függetlenül azt írja le, egy adott spin számára milyen irányú beállítás a legkedvezőbb az adott rácspontban. Vékonyrétegek esetén a könnyűirány-anizotrópia a vezető tag, amely a következő Hamilton-függvénnyel vehető figyelembe:

$$H_{\text{anizotrop}} = \sum_i (K_x \sigma_{ix}^2 + K_y \sigma_{iy}^2 + K_z \sigma_{iz}^2) = \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i^T \begin{bmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_i \quad (27)$$

Az előjelek itt is úgy vannak megválasztva, hogy amilyen irányban kedvező a mágneses momentum beállása, az ahhoz tartozó anizotrópia együttható negatív. Ha figyelembe vesszük, hogy a $\boldsymbol{\sigma}_i$ vektorok normáltak, akkor a $\sigma_{iz}^2 = 1 - \sigma_{ix}^2 - \sigma_{iy}^2$ összefüggés használatával az anizotrópia leírható csupán két együttható bevezetésével, a harmadik ugyanis csak egy konstans eltolást okozna az energiában.

A Hamilton-függvény ezen két tagja felírható úgy, mint olyan tagok összege, melyek a $\boldsymbol{\sigma}_i$ egységvektor és egy másik vektor skalárszorozataként állnak elő, tehát a Hamilton-függvény $\boldsymbol{\sigma}_i$ szerinti negatív gradienséből egy mágneses tér dimenziójú vektort kapunk:

$$-\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\sigma}_i} = M_S V_C \mathbf{B}_i \quad (28)$$

Itt M_S a telítési mágnesezettség, V_C az elemi cella térfogata.

Ezenkívül a kristályra kívülről is rákapcsolhatunk valamilyen $\mathbf{B}$ mágneses teret. Ez általában olyan elektromágneses hullámból származik, mely a rács mérettartományában homogénnek tekinthető, illetve frekvenciája sokkal kisebb a rendszerben lejátszódó, az elektronok mozgását leíró folyamatok jellemző frekvenciájánál. Ekkor a Hamilton-függvény és a derivált a következő módon változik:

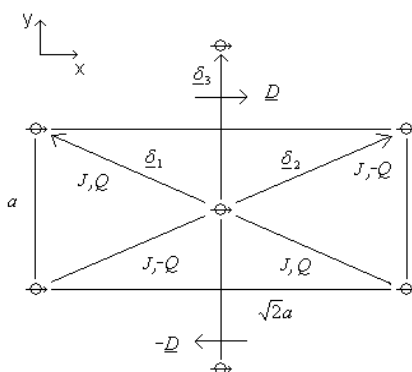
$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{J}_{ij} \boldsymbol{\sigma}_j + \sum_i (K_x \sigma_{ix}^2 + K_y \sigma_{iy}^2 + K_z \sigma_{iz}^2) - M_S V_C \mathbf{B} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \quad (29)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\sigma}_i} = M_S V_C (\mathbf{B}_i + \mathbf{B}) = M_S V_C \mathbf{B}_i^{\text{eff}} \quad (30)$$

Nézzük meg, hogyan viselkednek ezek a csatolási állandók a bevezetőben említett vas vékonyréteg esetén. Ezek az adatok egy másik programmal végzett számolásból származnak, az itt bemutatott szimulációk során adottuk tekintettük őket, illetve olyan egyszerűsítő modellekkel számoltunk, amelyek

tűkrözték ennek alapvető tulajdonságait, de csak kevesebb csatolási állandót tartalmaztak, így felgyorsítva a számolást. A későbbiek során mindig a z irányt nevezzük a síkra merőleges iránynak.

A modell esetében az első szomszédok között ferromágneses a csatolás, a második szomszédok között antiferromágneses, majd a harmadik szomszédok között ismét ferromágneses, és így tovább. Mindenképpen ez a legerősebb kölcsönhatás a spinek között - első szomszédok esetén a csatolási állandó 1 mRyd körüli érték -, és a távolsággal elég gyorsan lecseng, így a legtöbb szimulációban elég volt az első szomszédok közötti ferromágneses csatolást ($J < 0$) figyelembe venni. Az erősségben következő, az előzőnél egy nagyságrenddel kisebb tag a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás miatt fellépő antiszimmetrikus rész. Erről szimmetriai megfontolásokkal megmutatható[9], hogy az ehhez rendelhető $\mathbf{D}_{ij}$ vektor mindig a minta síkjában marad, és merőleges az i -edik és j -edik atom közötti rácsvektorra. Mivel a vektor a síkban helyezkedik el, a $\mathbf{J}_{ij}$ tenzor antiszimmetrikus részének xy komponense 0 lesz. Az első szomszédok közötti ferromágneses csatolásnál két nagyságrenddel kisebb az anizotrópia tag, mely x irányú beállást preferál a síkban ($K_x < 0, K_y > 0, K_z = 0$). A következő tag pedig a dipólusok közötti kölcsönhatás következménye. Ez egy meglehetősen lassan, exponenciális helyett hatványfüggvény szerint lecsengő tag, azonban még az első szomszédok esetén is két-három nagyságrenddel kisebb a ferromágneses csatolásnál. Ez egyrészt a diagonális tagok közötti eltéréshez vezet (a skalár Heisenberg-modellben ezek egyenlők), másrészt a diagonálison kívül is megjelenik, de a definiáló képletből leolvasható, hogy csak az xy komponensben lesz 0-tól eltérő járuléka, ugyanis a rácsvektorok az $x - y$ síkban helyezkednek el. Ha ebből csak az első szomszédok közötti nemdiagonális elemeket vesszük figyelembe ($\frac{1}{2}(J_{xy}^{ij} + J_{yx}^{ij}) = Q^{ij}$), a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást pedig csak a második szomszédok között, ezeket egy ábrába berajzolva az alábbi szimmetriákkal rendelkeznek:



2. ábra. Az alkalmazott csatolási állandók Fe/W(110) felületen

Itt az eredeti testcentrált köbös rács rácsállandóját a -val jelöltük, δ_1, δ_2 az első szomszédokra mutató helyvektorok, δ_3 pedig a második szomszédra mutat.

2.4. Sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet

Véges hőmérsékleten a fent említett, időben lassan változó tagok mellett figyelembe kell venni, hogy az elektronok spinje sok más, ezeknél gyorsabban változó paraméterrel (fononok, vezetési elektronok, magspin) való kölcsönhatás következtében is megváltozhat. Ugyanakkor ezen gyorsan változó paraméterek pontos leírása nem szükséges a spinek mozgásegyenletének adiabatikus közelítése esetén, ezért ezeknek a tagoknak a járulékát nem egy jól meghatározott mágneses térrel, hanem egy sztochasztikus folyamattal írhatjuk le, mely fluktuációkat okoz az effektív mágneses térben, és a mozgásegyenleten keresztül a spinek beállításában is. Ekkor a Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet a következő alakra módosul:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i(t)}{\partial t} = -\gamma' \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus}) - \alpha \gamma' \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times \left(\boldsymbol{\sigma}_i(t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus}) \right) \quad (31)$$

Ezt az egyenletet nevezzük sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletnek, mely egy sztochasztikus differenciálegyenlet multiplikatív zajjal. A fizikában előforduló sztochasztikus differenciálegyenleteket összefoglalóan Langevin-egyenletnek is szokták hívni, a multiplikatív zaj pedig arra utal, hogy a termikus tag az ismeretlen függvény szorzójaként jelenik meg.

Mivel a termikusnak nevezett mágneses tér nagyon sok, önmagukban kis járulékot adó részecskével való kölcsönhatás következménye, ezért megfelelően modellezhetjük valamilyen fehér zaj konstansszorosaként:

$$\mathbf{B}_i^{\text{termikus}}(t) = \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(t) \quad (32)$$

Itt magyarázatra szorul a szórásnégyzettel arányos D fizikai konstans, illetve a matematikai értelemben vett $\boldsymbol{\eta}$ fehér zaj. D jelölése a diffúziós együtthatóra utal, ugyanis a legkorábban vizsgált sztochasztikus fizikai probléma, a Brown-mozgás esetén a környezet hatása a mozgó részecskére ezen együtthatón keresztül vehető figyelembe. A Langevin-egyenlethez tartozó, valószínűségi sűrűségfüggvényre vonatkozó, determinisztikus differenciálegyenletet (Fokker-Planck-egyenlet) felírva megmutatható[17], hogy D értéke a következő lesz, ha kihasználjuk, hogy a termikus egyensúlyban lévő rendszer sűrűségfüggvényének a Boltzmann-eloszlást kell adnia:

$$D = \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \frac{k_B T}{V_C M_S \gamma'} \quad (33)$$

Itt T a hőmérséklet, k_B pedig a Boltzmann-állandó.

Hogy a fehér zaj tulajdonságait megvizsgálhassuk, tekintsük az alábbi (formális) sztochasztikus differenciálegyenletet:

$$\dot{X}(t) = a(X(t), t) + b(X(t), t)\eta(t)X(t_0) = X_0 \quad (34)$$

Itt a és b determinisztikus függvények, $\eta(t)$ a fehér zaj, $X(t)$ a sztochasztikus differenciálegyenlet megoldása (egy sztochasztikus folyamat), X_0 pedig egy valószínűségi változó (a kezdeti érték). Mivel belátható[18], hogy a létrejövő pálya klasszikus értelemben majdnem biztosan sehol sem differenciálható, a differenciálegyenlet helyett igazából egy integrálegyenletet szoktak megoldani:

$$X(t) = X_0 + \int_{t_0}^t a(X(t'), t') dt' + \int_{t_0}^t b(X(t'), t') dW(t') \quad (35)$$

Ennek megoldásához viszont értelmezni kell a sztochasztikus integrált. Ha ezt egyfajta Riemann-féle közelítő összegként próbáljuk felírni, akkor kiderül, hogy attól függően, hogy egy elemi dt hosszúságú időszakasz melyik pontjában helyettesítjük be $b(X(t), t)$ értékét, különböző eredményeket fogunk kapni a felosztás végtelenig való finomítása után, azaz az integrálegyenlet többféleképpen értelmezhető, és a megoldás is más lesz az értelmezéstől függően. Az integrálnak kétféle elterjedt értelmezése van, az Ito-féle, amely az integrálás folyamán nem tesz fel semmit a folyamat jövőbeli értékéről, ezért pénzügyi folyamatok leírásakor általában ezt használják. A másik értelmezés a Sztratonovics-féle, mely úgy fogható fel, hogy a rendszert igazából nem fehér zaj gerjeszti, hanem valamilyen véges időbeli korrelációjú szürke zaj, amelyet fehér zajjal közelítünk. A fizikai problémák leírásakor általában ez a helyzet, így ott gyakran ezt az értelmezést használják. A különböző differenciálegyenletek elkülönítésének érdekében eltérő jelöléseket vezettek be rájuk:

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t)dW(t) \quad \text{Ito-értelmezés} \quad (36)$$

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t) \circ dW(t) \quad \text{Sztratonovics-értelmezés} \quad (37)$$

Az értelmezések között csak akkor van eltérés, ha a $b(X(t), t)$ függvény valóban függ $X(t)$ -től. Így a $dX = dW, X_0 = 0$ egyenlet megoldása értelmezéstől függetlenül definiált, ezt nevezik egydimenziós Brown-mozgásnak vagy Wiener-folyamatnak. Ennek tulajdonságai: $W(0) = 0$ majdnem biztosan, $W(t) - W(s) \sim N(0, t - s) \forall t \geq s \geq 0$ esetén, azaz a különbségek normális eloszlásúak, és $\forall t_n > \dots > t_1 > 0$ esetén a $W(t_1), W(t_2) - W(t_1), \dots, W(t_n) - W(t_{n-1})$ valószínűségi változók függetlenek. Ekkor formálisan bevezethető a fehér zaj a $dW = \eta\sqrt{dt}$ összefüggés alapján, mely a Wiener-folyamat tulajdonságai miatt lényegében egy $N(0, 1)$ standard normális eloszlású valószínűségi változó, az alábbi tulajdonságokkal: $\langle \eta(t) \rangle = 0, \langle \eta(t)\eta(s) \rangle = \delta(t - s)$. Innen származik a fehér zaj elnevezés is, hiszen ha az autokorrelációs függvény Dirac-delta, akkor a spektruma, azaz időbeli Fourier-transzformáltja konstans lesz.

A sztochasztikus Landau-Lifshic-Gilbert-egyenlet esetén minden rácshelyen (i), minden koordinátában (α) független fehér zajt kell feltételezni, ekkor a várható érték, illetve a korrelációs függvény $\langle \eta_{i\alpha}(t) \rangle = 0, \langle \eta_{i\alpha}(t)\eta_{j\beta}(s) \rangle = \delta(t - s)\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$ alakú lesz. Ezenkívül mivel az egyenlet multiplikatív zajt tartalmaz, valamelyik értelmezését is ki kell választani a sztochasztikus differenciálegyenletnek, és ebben az esetben a Sztratonovics-értelmezés a szokásos választás.

2.5. A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet numerikus megoldása

Mivel a vizsgált egyenlet nem lineáris, ezért már a determinisztikus rész megoldása sem kereshető meg általános esetben analitikusan. Egész pontosan belátható[19], hogy a sztochasztikus egyenletnek csak két kölcsönható spin esetén van analitikus megoldása. Ezért valamilyen numerikus módszert kell alkalmazni. A szimulációs programban a sztochasztikus Heun-módszert alkalmaztuk, mely a determinisztikus változatához hasonlóan egy prediktor-korrektor módszer. Ennek előnye, hogy az általunk keresett Sztratonovics-értelemben vett megoldáshoz konvergál, illetve jó kompromisszumot jelent a kis számítási igényű, de pontatlan (ezért csak nagyon rövid időlépéssel használható) módszerek - mint a sztochasztikus Euler-módszer -, illetve a pontos, gyorsabban konvergáló, de bonyolult módszerek között. Esetünkben a következő egyenletet kell megoldani:

$$d\sigma_{i,a}(t) = A_{i,a}(\sigma_j, t) + B_{i,ab}(\sigma_j, t)\sqrt{2D} \circ dW_{i,b}(t) \quad (38)$$

$$A_{i,a}(\sigma_j, t) = \left(-\gamma' \sigma_i(t) \times B_i^{eff} - \alpha \gamma' \sigma_i(t) \times \left(\sigma_i(t) \times B_i^{eff} \right) \right)_a \quad (39)$$

$$B_{i,ab}(\sigma_j, t) = -\gamma' \varepsilon_{acb} \sigma_{i,c}(t) - \gamma' \alpha \varepsilon_{acd} \sigma_{i,c}(t) \varepsilon_{deb} \sigma_{i,e}(t) \quad (40)$$

Itt a, b, c, d, e Descartes-indexeket jelölnek. Az ehhez tartozó Heun-módszer képlete:

$$\sigma'_{i,a}(\tau_n) = \sigma_{i,a}(\tau_n) + A_{i,a}(\sigma_j, \tau_n)\Delta\tau_n + B_{i,ab}(\sigma_j, \tau_n)\sqrt{2D}\Delta W_{i,b}(\tau_n) \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{i,a}(\tau_{n+1}) &= \sigma_{i,a}(\tau_n) + \frac{1}{2} \left(A_{i,a}(\sigma_j, \tau_n)\Delta\tau_n + B_{i,ab}(\sigma_j, \tau_n)\sqrt{2D}\Delta W_{i,b}(\tau_n) \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \left(A_{i,a}(\sigma'_j, \tau_n)\Delta\tau_n + B_{i,ab}(\sigma'_j, \tau_n)\sqrt{2D}\Delta W_{i,b}(\tau_n) \right) \end{aligned} \quad (42)$$

Itt $\Delta W_{i,b}(\tau_n) \sim N(0, \tau_{n+1} - \tau_n)$ a Wiener-folyamat megváltozása az adott intervallumon, ami a szimuláció során egy normális eloszlású álvéletlen számmal helyettesíthető. A megoldás során figyelembe kell venni, hogy mivel nem tényleges differenciálhányadosokkal számolunk, a kapott közelítés nem őrzi meg az eredeti egyenlet szimmetriatulajdonságait, ebben az esetben például a spin megváltozása a második egyenletben nem merőleges az eredeti vektorra, így megváltozik a hossza. Ezért célszerű minden lépés után visszanyormálni a vektorokat[19], hogy a numerikus integrálás stabilabb legyen. Ugyanakkor elég kicsi lépésköz választásánál ez a hiba az egyes lépésekben nem túl nagy, így az általunk használt program csak bizonyos időközönként végzi el a visszanyormálást.

3. A szimulációs program

A kutatás kezdetekor rendelkezésre állt egy spindinamikai szimulációs program, mely zérus hőmérsékleten oldotta meg a Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletet. A program atomi egységekben számol ($e, m_e, \hbar$ egységnyinek választva), az energia dimenziójú mennyiségeket csatolási állandók tipikus nagyságrendjében, mRyd-ben kell megadni. Mivel a Boltzmann-állandót is egységnyinek vesszük, a hőmérséklet szintén energia dimenziójú, 1 mRyd 157,8935 K-nek felel meg. Az ezekhez az értékekhez igazított időegység (1 mRyd energiájú foton körfrekvenciájának reciproka) 48,5 fs. A Heun-módszerben alkalmazott időlépés beállítható a program bemeneti fájljában, a tesztek során ez nagyjából ennek ezredrésze, ekkor ugyanis a numerikus módszer elég pontos eredményeket ad pár ps hosszú szimulációk (pár százezer vagy egymillió lépés) elvégzése után is. Ez nagyságrendileg megfelel a [4] cikkben megadott 1 – 10 as időlépésnek, illetve 100 fs hosszú szimulációnak.

Az eredeti szimulációs program valamilyen hordozó anyagra felpárologtatott, néhány atom vastag mágneses vékonyrétegben szimulálja a mágneses momentumok mozgását. A rétegekben a rács típusát, az atomok távolságát, a rétegek távolságát a geometriát tartalmazó fájlból olvassa be. A spinek közötti csatolást leíró állandók helyére egy másik program által adott értékeket olvas be, ezek egy rétegben csak az atomok relatív elhelyezkedésétől függenek, viszont a különböző rétegek között eltérőek lehetnek. A csak a réteg sorszámától függő anizotrópia konstansokat (mindhárom térirányra) szintén a csatolási állandók fájlja tartalmazza. A spinek kezdeti konfigurációja lehet véletlenszerű, állhat mindegyik azonos irányban (ferromágneses eset), illetve beolvasható egy korábbi szimuláció végeredménye is. Beállítható, hogy a különböző irányokban szabad vagy periodikus határfeltétel legyen, illetve bizonyos rétegekre vagy a rács szélein rögzíthető a spinek beállása. Az alkalmazott külső mágneses tér tartalmazhat statikus, illetve időben harmonikusan változó tagot is, valamint beállítható, hogy a tér a teljes rácsra hasson-e, csak egy bizonyos rétegre, vagy csak egy rácspontra. A program a standard kimenetre kiírja a szimuláció legfontosabb paramétereit, illetve bizonyos számú lépésenként (mentési ciklus) a teljes rács energiáját. A kimeneti fájlba minden mentési ciklusban kiírja minden spin három komponensét olyan formátumban, hogy az esetleg egy újabb szimulációs bemeneti konfigurációjaként szolgálhasson.

Első feladatunk a program módosítása volt, hogy a lokális (belső kölcsönhatásból származó), illetve külső mágneses térhez adjon hozzá egy hőmérsékletfüggő tagot is, ezáltal véges hőmérsékletű szimulációt is lehetővé téve. Egy atom mágneses momentumát, azaz a cellatérfogát és a telítési mágnesezettség szorzatát egységnyinek választva (atomai egységekben $2\mu_B$), a lokális tér közvetlenül a csatolási, illetve anizotrópia állandókat tartalmazza az egységvektorokkal modellezett spinekkel összeszorozva, így a külső, illetve a termikus tér is ilyen energiaegységekben lesz megadva. Ekkor a Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet az alábbi alakú:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i(t)}{\partial t} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus}) - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(t) \times (\boldsymbol{\sigma}_i(t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus})) \quad (43)$$

A numerikus megoldáshoz használt Heun-módszer:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}'_i(n\Delta t) &= \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) + \left(-\frac{1}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t)) - \right. \\ &\quad \left. -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t))) \right) \Delta t \\ \boldsymbol{\sigma}_i((n+1)\Delta t) &= \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t)) - \right. \\ &\quad \left. -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\boldsymbol{\sigma}_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t))) \right) \Delta t + \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}'_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t)) - \right. \\ &\quad \left. -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} \boldsymbol{\sigma}'_i(n\Delta t) \times (\boldsymbol{\sigma}'_i(n\Delta t) \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(n\Delta t))) \right) \Delta t \end{aligned} \quad (44)$$

Itt minden lépésköz azonos (Δt), $\boldsymbol{\eta}_i$ pedig egy háromdimenziós standard normális eloszlású valószínűségi változó helyettesítési értéke. Itt a szórásban vettük figyelembe, hogy a Wiener-folyamat elemi megváltozása a lépésköz négyzetgyökével arányos, azaz nem a teljes időlépéssel kellene beszorozni a valószínűségi változó helyettesítési értékét: $D = \alpha \frac{T}{\Delta t}$. A normális eloszlású valószínűségi változó helyettesítési

értékét egy előre megírt függvény generálja két, a $(0, 1)$ intervallumon egyenletes eloszlású valószínűségi változó értékéből, a Kinderman-Monahan-féle hányadosalgoritmust[21] használva.

A szimuláció egymás után több hőmérsékleten is elvégezhető egy futás során, ehhez megadható a vizsgált hőmérséklettartomány, illetve hogy itt mekkora legyen a léptetési távolság. A következő hőmérsékleten mindig az előző hőmérséklet végső konfigurációjából indul ki, illetve minden ilyen váltáskor lenormálja a program a spineket, erre ugyanis nincs minden időintegrálási lépés után szükség a rövid időlépés miatt, de több hőmérsékleten történő futtatáskor ez célszerű, ugyanis a tapasztalatok alapján nagyjából egymillió integrálási lépés után még csak pár tízezred az eltérés az egységnyi hosszról. Ezzel a módszerrel felvehető a termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggése, és vizsgálható például a kritikus pont körüli viselkedés. Ebben az esetben a spinkonfigurációt sem minden mentési ciklusban írja ki a program, hanem csak minden hőmérsékleten az utolsó beállást, így nem az idő, hanem a hőmérséklet függvényében vizsgálhatjuk a változást.

Jelen dolgozat célja az, hogy a rendszerben megjelenő kvázirészecske gerjesztéseket (magnonokat) vizsgálja, és erre alkalmas módszer, ha adott frekvenciájú külső gerjesztő homogén mágneses tér mellett egy erre merőleges statikus tér amplitúdóját változtatjuk valamekkora lépésekben, egy ferromágneses rezonancia kísérletet szimulálva. Az amplitúdó változtatása teljesen a hőmérséklet változtatásának megfelelően megy végbe: a bemeneti fájlban meg kell adni ezen mágneses tér irányát, minimális és maximális amplitúdóját, valamint a léptetést. A következő mágneses térnél a kezdő konfiguráció az előző futás végső konfigurációja, és minden mágneses térnél felveszi a program a termodinamikai mennyiségeket, valamint a végső konfigurációt fájlba is kiírja.

A program többféle termodinamikai mennyiséget számol (mágnesezettség, szuszceptibilitás, Binder-kumuláns, energia, hőkapacitás), ezek segítségével kaphatunk információt a rendszer egészéről, míg maguk a kiírt spinkonfigurációk a mikroszkopikus változások vizsgálatára alkalmasak. Ezen mennyiségek számításához a program minden mentési ciklusban kiátlagolja a spinek komponenseit a rácsra $(\langle m_x \rangle, \langle m_y \rangle, \langle m_z \rangle)$, illetve ezek négyzeteit is átlagolja a rácsra $(\langle m_x^2 \rangle, \langle m_y^2 \rangle, \langle m_z^2 \rangle)$, a normálás miatt $\langle m_x^2 \rangle + \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle = 1$, valamint kiszámolja az energiát is. Ezután ezekből a mennyiségekből, illetve különböző hatványaikból időbeli átlagokat számol, így kaphatók a különböző termodinamikai mennyiségek.

Láttuk, hogy az általunk vizsgált vas rétegben az első szomszédok között ferromágneses csatolás van, az anizotrópia konstansok pedig az x irányú beállást preferálják. Ezért a későbbiek során egy x irányú ferromágneses beállítás körüli kis kitéréseket vizsgálunk, ezt az eredeti iránytól vett átlagos eltérést jól jellemzi az $S = \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2 - \langle m_z \rangle^2$ szórásnégyzet jellegű mennyiség, melyet az alábbi számolásokban használni fogunk.

4. A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet linearizált alakjának megoldása ferromágneses alapállapot körül

4.1. Landau-Lifsic-Gilbert-egyenlet lokális koordinátákban

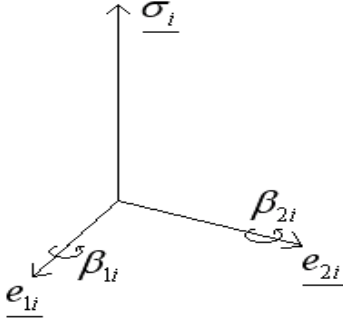
Az előzőekben ismertettük az sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletet, amely egy nemlineáris sztochasztikus differenciálegyenlet, illetve differenciálegyenlet-rendszer, ha rácson számolunk. A továbbiakban azon saját eredményeinket ismertetjük, melyek az egyenlet linearizálásával kapcsolatosak, ugyanis linearizálás után analitikus megoldás kereshető az egyenletekre, amely összevethető a szimulációs eredményekkel.

Először vizsgáljuk meg, mi történik, ha a lokális koordinátarendszert minden időpillanatban az adott rácshelyen lévő spin jelenlegi állásához igazítjuk. A sztochasztikus Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletet felírva a lokális mágneses momentumokra ($\mathbf{M}_i = M_i \boldsymbol{\sigma}_i = M_S V_C \boldsymbol{\sigma}_i$) vonatkozóan:

$$\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial t} = -\gamma' \mathbf{M}_i \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus}) - \frac{\alpha \gamma'}{M_i} \mathbf{M}_i \times (\mathbf{M}_i \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus})) \quad (46)$$

$$\mathbf{B}_i^{eff} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{M}_i} = -\frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{\sigma}_i} \quad (47)$$

Korábban láttuk, hogy a Landau-Lifsic-Gilbert-egyenletben a spin időderiváltja merőleges a pillanatnyi beállásra, így a hossza nem változik. Az alábbi ábrán látható, a spinre merőleges egységvektorokat ($\mathbf{e}_{1i}, \mathbf{e}_{2i}$), illetve azok körüli elforgatásokat (β_{1i}, β_{2i}) bevezetve, megkaphatjuk a spin elemi megváltozását, mely kifejezhető ezen szögekkel:



$$\boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{e}_{1i} = \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{e}_{2i} = \mathbf{e}_{1i} \mathbf{e}_{2i} = 0 \quad (48)$$

$$\mathbf{e}_{1i} \times \boldsymbol{\sigma}_i = -\mathbf{e}_{2i}, \quad \mathbf{e}_{2i} \times \boldsymbol{\sigma}_i = \mathbf{e}_{1i} \quad (49)$$

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_i = -\Delta \beta_{1i} \mathbf{e}_{2i} + \Delta \beta_{2i} \mathbf{e}_{1i} \quad (50)$$

$$\mathbf{B}_{i\perp}^{eff} = \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} \mathbf{e}_{2i} - \frac{1}{M_i} \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} \mathbf{e}_{1i} \quad (51)$$

3. ábra. A spinre merőleges egységvektorok és a szögváltozók

Itt a $\perp$ jelölés arra utal, hogy csak a mágneses tér spinre merőleges komponensét fejeztük ki, hiszen a vektoriális szorzás miatt csak ez marad meg az egyenletben. Írjuk fel ismét az egységvektorokra vonatkozóan az egyenleteket:

$$M_i \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} = -M_i \gamma' \boldsymbol{\sigma}_i \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus}) - \alpha \gamma' M_i \boldsymbol{\sigma}_i \times (\boldsymbol{\sigma}_i \times (\mathbf{B}_i^{eff} + \mathbf{B}_i^{termikus})) \quad (52)$$

Fejtsük ki az egyenleteket a fenti koordinátarendszerben lévő komponensek szerint, kihasználva, hogy a jobb oldal $\boldsymbol{\sigma}_i$ irányú komponense $\mathbf{0}$:

$$M_i \left(\mathbf{e}_{1i} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} \right) = \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} - \alpha \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} + \gamma' M_i \mathbf{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{termikus} + \alpha \gamma' M_i \mathbf{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{termikus} \quad (53)$$

$$M_i \left(\mathbf{e}_{2i} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial t} \right) = \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} + \alpha \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} - \gamma' M_i \mathbf{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{termikus} + \alpha \gamma' M_i \mathbf{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{termikus} \quad (54)$$

$$M_i \frac{\partial \beta_{2i}}{\partial t} = \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} - \alpha \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} + \gamma' M_i \mathbf{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{termikus} + \alpha \gamma' M_i \mathbf{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{termikus} \quad (55)$$

$$M_i \frac{\partial \beta_{1i}}{\partial t} = -\gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} - \alpha \gamma' \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} + \gamma' M_i \mathbf{e}_{1i} \mathbf{B}_i^{termikus} - \alpha \gamma' M_i \mathbf{e}_{2i} \mathbf{B}_i^{termikus} \quad (56)$$

Formálisan ezekben az egyenletekben már csak additív zaj van, amely egyszerűbben kezelhető, például gyorsabban konvergáló numerikus módszerek találhatók a megoldásra. Viszont minden elemi lépés után el kell forgatni a tengelyeket is a globális koordinátarendszerben, ez pedig multiplikatív zajává teszi az egyenleteket:

$$\Delta \sigma_i = -\Delta \beta_{1i} e_{2i} + \Delta \beta_{2i} e_{1i} \quad (57)$$

$$\Delta e_{2i} = \Delta \beta_{1i} \sigma \quad (58)$$

$$\Delta e_{1i} = -\Delta \beta_{2i} \sigma \quad (59)$$

Ez a módszer inkább akkor lehet hasznos, ha az effektív teret könnyebb a lokális koordinátarendszerben meghatározni, ami ab initio számolások esetén előfordulhat, viszont a jelenleg vizsgált program keretei között erre nincs szükség, mivel ez a globális Descartes-koordinátarendszerben megadott csatolásokkal számol. Viszont maga az átalakítás ötlete a következőkben még hasznosnak bizonyul.

4.2. Magnonspektrum

A rácsrezgésekhez hasonlóan vizsgálhatjuk egy mágneses rendszer egyensúlyi állapot körüli kis gerjesztéseit is. Transzlációs szimmetriával bíró rendszerek esetén ezek spinhullámok (magnonok) lesznek. A lokális koordinátarendszerben felírt egyenletek itt azért hasznosak, mert azok a csillapítás és a hőmérsékleti zaj nélkül a Hamilton-féle kanonikus egyenletekre emlékeztetnek:

$$M_i \frac{\partial \beta_{2i}}{\partial t} = \gamma \frac{\partial E}{\partial \beta_{1i}} \quad (60)$$

$$M_i \frac{\partial \beta_{1i}}{\partial t} = -\gamma \frac{\partial E}{\partial \beta_{2i}} \quad (61)$$

Ha nincs Gilbert-csillapítás, akkor $\gamma' = \gamma$, így a fenti egyenletben már ezt a jelölést használtuk. Vezessük be az alábbi változókat, hogy az egyenletek megszokott formáit kapjuk vissza:

$$q_i = \sqrt{\frac{M_i}{\gamma}} \beta_{2i}, \quad p_i = \sqrt{\frac{M_i}{\gamma}} \beta_{1i} \quad (62)$$

$$q_i = \frac{\partial E}{\partial p_i}, \quad p_i = -\frac{\partial E}{\partial q_i} \quad (63)$$

Az eddig felírt egyenletek egzaktak, azonban minden spinhez egy lokális koordinátarendszert kellett rögzíteni. Ferromágneses alapállapot esetén minden spin azonos irányban áll, ezt a globális irányt rögzítjük, és vezessük be az ezen irány körüli kis szögkitéréseket: β_{1i}, β_{2i} , illetve ezek átskálázott változatait: p_i, q_i . Ha csak kis kitéréseket engedünk meg az alapállapottól, azaz nem túl nagy külső tér mellett vizsgáljuk a rendszert, az energia sorbafejthető ezen szögek szerint. Itt a lineáris tagnak el kell tűnnie, különben nem beszélhetnénk egyensúlyi állapotról, így az első el nem tűnő tag a másodrendű lesz. Itt alkalmazzuk azt a közelítést, hogy csak ezt a másodrendű tagot tartjuk meg, ebben a rendben ugyanis még a szögek szimmetrikusan jelennek meg, míg magasabb rendű számolásoknál már figyelni kell arra, hogy melyik tengely körül végezzük először a forgatást:

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(A_{ij} p_i p_j + B_{ij} p_i q_j + B_{ji} p_j q_i + C_{ij} q_i q_j \right) \quad (64)$$

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j}, \quad B_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial q_j}, \quad C_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} \quad (65)$$

$$\dot{q}_i = \sum_j \left(A_{ij} p_j + B_{ij} q_j \right), \quad \dot{p}_i = -\sum_j \left(B_{ji} p_j + C_{ij} q_j \right) \quad (66)$$

A kvázirészecske-gerjesztéseket úgy kaphatjuk meg, ha a kanonikus változókra kiradjuk a szokásos $[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ kommutációs relációkat, így megkvantálva őket. Vezessük be a magnonok keltő és eltüntető operátorait az $a_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q_i + ip_i)$, $a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q_i - ip_i)$ definíciókkal, ekkor ezek valóban bozonikus keltő és eltüntető operátorok lesznek: $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$. Ezek segítségével felírva a spinhullámokra vonatkozó Hamilton-operátor a következő alakú:

$$\frac{1}{\hbar}H_{SW} = \frac{1}{\hbar}E_0 + \frac{1}{4}\sum_i(A_{ii} + C_{ii}) + \frac{1}{4}\sum_{i,j}(A_{ij} + iB_{ij} - iB_{ji} + C_{ij})a_i^+a_j + \quad (67)$$

$$+ \frac{1}{4}\sum_{i,j}(-A_{ij} + iB_{ij} + iB_{ji} + C_{ij})a_i^+a_j^+ + h.c. \quad (68)$$

Transzlációs szimmetria esetén a bevezetett együttthatók között fennállnak az alábbi összefüggések: $A_{ij} = A(i-j)$, $B_{ij} = B(i-j)$, $C_{ij} = C(i-j)$, illetve a parciális deriválások felcserélhetősége miatt $A_{ij} = A_{ji}$, $C_{ij} = C_{ji}$, ez utóbbi viszont nem igaz a B_{ij} együttthatókra, mivel azok első indexben impulzus, másodikban koordináta szerinti deriváltakat tartalmaznak. A reciproktérben bevezetett keltő és eltüntető operátorok segítségével a Hamilton-operátor az alábbi alakú lesz:

$$a(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}a_i, \quad [a(\mathbf{k}), a^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (69)$$

$$h(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\sum_j(A_{0j} + iB_{0j} - iB_{j0} + C_{0j})e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (70)$$

$$w(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\sum_j(-A_{0j} - iB_{0j} - iB_{j0} + C_{0j})e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar}H_{SW} = & \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\left(h(\mathbf{k})a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + h(-\mathbf{k})a^+(-\mathbf{k})a(-\mathbf{k}) + w^*(-\mathbf{k})a^+(\mathbf{k})a^+(-\mathbf{k}) + \right. \\ & \left. + w(\mathbf{k})a(-\mathbf{k})a(\mathbf{k})\right) + \frac{1}{4}\sum_i(A_{ii} + C_{ii}) + \frac{1}{\hbar}E_0 \end{aligned} \quad (72)$$

Az együttthatók fentebb ismertetett szimmetriái segítségével belátható, hogy $h(\mathbf{k})$ valós, és hogy $w(\mathbf{k}) = w(-\mathbf{k})$, így H_{SW} továbbra is önadjungált lesz. Bogoljubov-transzformációval diagonalizálható az operátor:

$$b(\mathbf{k}) = u(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + v(\mathbf{k})a^+(-\mathbf{k}) \quad (73)$$

$$b^+(\mathbf{k}) = u^*(\mathbf{k})a^+(\mathbf{k}) + v^*(\mathbf{k})a(-\mathbf{k}) \quad (74)$$

$$[b(\mathbf{k}), b^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \implies |u(\mathbf{k})|^2 - |v(\mathbf{k})|^2 = 1 \quad (75)$$

Ezeket az új keltő és eltüntető operátorokat behelyettesítve a Hamilton-operátorba, akkor fognak eltűnni a nemdiagonális tagok, ha a következő egyenlet is teljesül:

$$u(\mathbf{k})^2w^*(-\mathbf{k}) + v(\mathbf{k})^2w(\mathbf{k}) - u(\mathbf{k})v(\mathbf{k})h(\mathbf{k}) - u(\mathbf{k})v(\mathbf{k})h(-\mathbf{k}) = 0 \quad (76)$$

A fenti összefüggésekből az együttthatók meghatározhatók. A konstans tagokat elhagyva az energia az alábbi alakú:

$$\frac{1}{\hbar}H_{SW} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\left(\omega(\mathbf{k})b^+(\mathbf{k})b(\mathbf{k}) + \omega(-\mathbf{k})b^+(-\mathbf{k})b(-\mathbf{k})\right) \quad (77)$$

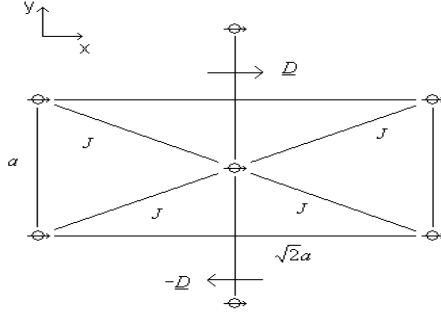
$$\omega(\mathbf{k}) = |u(\mathbf{k})|^2h(\mathbf{k}) + |v(\mathbf{k})|^2h(-\mathbf{k}) - u(\mathbf{k})v^*(\mathbf{k})w^*(-\mathbf{k}) - u^*(\mathbf{k})v(\mathbf{k})w(\mathbf{k}) \quad (78)$$

$$\omega(-\mathbf{k}) = |v(\mathbf{k})|^2h(\mathbf{k}) + |u(\mathbf{k})|^2h(-\mathbf{k}) - u(\mathbf{k})v^*(\mathbf{k})w^*(-\mathbf{k}) - u^*(\mathbf{k})v(\mathbf{k})w(\mathbf{k}) \quad (79)$$

Az operátor ebben az esetben független harmonikus oszcillátorok Hamilton-operátorainak összege lesz. Ezen harmonikus oszcillátorokhoz tartozó bozonikus gerjesztéseket nevezzük magnonoknak.

Példaként vizsgáljuk itt is a bevezetőben említett vas vékonyréteget. A csatolási állandók nagyságrendjét, illetve előjelét már felsoroltuk az effektív térről szóló fejezetben, és említettük, hogy minden csatolási állandó típusból csak a legnagyobb abszolút értékűvel fogunk számolni az egyszerűség kedvéért. Most tovább egyszerűsítve a helyzetet, tegyük fel, hogy a dipólusok közötti kölcsönhatás teljességgel elhanyagolható: $J_{xx} = J_{yy} = J_{zz} = J < 0$ a diagonális elemekre, és $Q = 0$ a nemdiagonális szimmetrikus részre, bár később kiszámoljuk, hogy ez utóbbi egyébként sem jelenik meg a szögek szerinti másodrendű

sorfejtésben. Legyen az anizotrópia $K_x < 0, K_y = 0$, ekkor a ferromágneses beállítás x irányú lesz. A Hamilton-függvény ekkor a következő alakú:



$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_1} J \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_2} D_{ij} (\sigma_i \times \sigma_j) + K_x \sum_i \sigma_{ix}^2 \quad (80)$$

4. ábra. A csatolási állandók

Mivel az x irányú ferromágneses állapot körül vizsgáljuk az eltéréseket, β_{1i} az y tengely, β_{2i} pedig a z tengely körüli kis elfordulásnak felel meg. A σ_i vektorokat ebben a globális koordinátarendszerben kell sorbafejteni a szögek szerint. Ekkor a magnonspektrum a következő alakú lesz:

$$\sigma_i \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2} \\ \beta_{2i} \\ -\beta_{1i} \end{bmatrix} \quad (81)$$

$$\hbar A_{00} = \hbar C_{00} = -4J - 2K_x \quad (82)$$

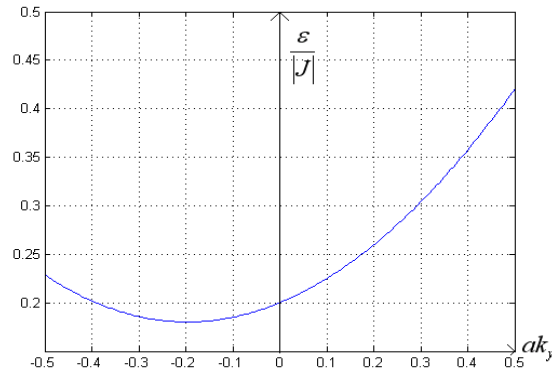
$$\hbar A_{01} = \hbar C_{01} = J \quad \text{első szomszédokra} \quad (83)$$

$$\hbar B_{02} = -\hbar B_{20} = D \quad \text{második szomszédokra} \quad (84)$$

$$\hbar \omega(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar h(\mathbf{k}) = -4J \left(1 - \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} a k_x\right) \cos\left(\frac{1}{2} a k_y\right) \right) + 2D \sin(a k_y) - 2K_x \quad (85)$$

A Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következtében a spektrum nem lesz szimmetrikus a Γ pontra a Brillouin-zónában: $\varepsilon(\mathbf{k}) \neq \varepsilon(-\mathbf{k})$. Ezt az aszimmetriát sikerült kísérletileg is kimutatni az általunk vizsgált Fe/W(110) felület esetén, spinpolarizált elektronok energiavesztésének mérésével[13]. A későbbiekben megvizsgáljuk, hogy az általunk használt szimulációs program segítségével hogyan figyelhető meg ez az eltérés.

A $D = 0.1|J|, K_x = -0.1|J|$ értékeket behelyettesítve, a Γ pont környékén így néz ki a spektrum ($k_x = 0$):



5. ábra. A magnonok spektruma

4.3. A mozgásegyenletek közelítő megoldása

Az előzőekben láttuk, hogyan lehet a mozgásegyenleteket kanonikus egyenletekké alakítani, majd megkvantálni, ha nincs csillapítás, illetve hőmérsékletből származó zaj. Általában azonban ezektől nem

tekinthetünk el, viszont ha a zaj nem túl nagy - például a ferromágneses-paramágneses fázisátalakulás hőmérsékleténél lényegesen kisebbnek kell lennie -, akkor továbbra is igaz lesz, hogy a rendszer a ferromágneses alapállapot körül fog tartózkodni. Ezért a szögek szerint vett alacsony rendű sorfejtés itt is alkalmazható lesz, csak az eredményt a csillapított, illetve zajjal gerjesztett mozgásegyenletekbe kell beírni.

A továbbiakban használjuk a szimulációs program által használt mértékegységeket, azaz mind a mágneses teret, mind a hőmérsékletet mérjük energia dimenzióban. Ekkor a Hamilton-függvény a következő alakú:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_i J_{ij} \sigma_j + K_x \sum_i \sigma_{ix}^2 + K_y \sum_i \sigma_{iy}^2 - B \sum_i \sigma_i \quad (86)$$

Homogén külső teret feltételeztünk, ugyanis a kísérletekben tipikusan használt mikrohullámú gerjesztések a rács méretskáláján térben homogénnek tekinthetők. Itt már 0-nak vettük a K_z együtthatót, hiszen ez a spinek normáltsága miatt mindenképpen kitranszformálható a kifejezésből $\sigma_{iz}^2 = 1 - \sigma_{ix}^2 - \sigma_{iy}^2$ helyettesítéssel és a másik két anizotrópia konstans megváltoztatásával. Továbbra is feltételezzük, hogy a rendszer viselkedését az első szomszédok közötti ferromágneses csatolás határozza meg leginkább. Továbbá azt is tegyük fel, hogy a síkon belül az anizotrópia az x irányú beállást preferálja, azaz legyen $K_x < 0$ és $K_y > 0$, mint az alapmodell, a vas vékonyréteg esetén. Ekkor β_{1i} az y tengely, β_{2i} pedig a z tengely körüli kis elfordulásnak felel meg. A ferromágneses alapállapot persze akkor jó feltételezés, ha nincsenek szögekben lineáris rendben eltérítő tagok az energiában, azaz a ferromágneses állapot tényleg egyensúly. Azért, hogy lássuk, mely tagok szerepelnek a lineáris egyenletben, és melyek okoznak csak perturbációt, eggyel magasabb rendben fejtünk sorba a szögekben, mint amikor a spinhullámokra vonatkozó Hamilton-operátort származtattuk. Viszont harmadrendű sorfejtés esetén már nem mindegy, hogy az első elforgatást melyik tengely mentén végezzük, hiszen fordított sorrend esetén más lesz a spin végső beállása. Ezért a következőkben feltételezzük, hogy először az y tengely körül forgatunk β_{1i} szöggel.

Ezen feltételezések mellett a spinek a következő módon fejthetők sorba:

$$\sigma_i = \begin{bmatrix} \cos(\beta_{1i}) \cos(\beta_{2i}) \\ \sin(\beta_{2i}) \cos(\beta_{1i}) \\ -\sin(\beta_{1i}) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2} \\ \beta_{2i} - \frac{\beta_{2i}^3}{6} - \frac{1}{2} \beta_{1i}^2 \beta_{2i} \\ -\beta_{1i} + \frac{\beta_{1i}^3}{6} \end{bmatrix} \quad (87)$$

A csatolásokat tartalmazó tag ekkor a következő alakú:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_i J_{ij} \sigma_j &\approx \frac{1}{2} \sum_i \left(\sum_j J_{xx}^{ij} \left(1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2} \right) + \sum_j \left(J_{yx}^{ij} + J_{xy}^{ij} \right) \cdot \right. \\ &\quad \cdot \left(\beta_{2i} - \frac{\beta_{2i}^3}{6} - \frac{1}{2} \beta_{1i}^2 \beta_{2i} \right) + \sum_j \left(J_{zx}^{ij} + J_{xz}^{ij} \right) \left(-\beta_{1i} + \frac{\beta_{1i}^3}{6} \right) \Bigg) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(- \left(\frac{J_{yx}^{ij} + J_{xy}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{2i} \beta_{1j}^2 + \beta_{2i} \beta_{2j}^2 + \beta_{2j} \beta_{1i}^2 + \beta_{2j} \beta_{2i}^2 \right) + \right. \\ &\quad + \left(\frac{J_{yx}^{ij} - J_{xy}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{2j} \beta_{1i}^2 + \beta_{2j} \beta_{2i}^2 - \beta_{2j} \beta_{1j}^2 - \beta_{2i} \beta_{2j}^2 \right) + \\ &\quad + \left(\frac{J_{zx}^{ij} + J_{xz}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{1i} \beta_{1j}^2 + \beta_{1i} \beta_{2j}^2 + \beta_{1j} \beta_{1i}^2 + \beta_{1j} \beta_{2i}^2 \right) + \\ &\quad + \left(\frac{J_{zx}^{ij} - J_{xz}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{1i} \beta_{1j}^2 + \beta_{1i} \beta_{2j}^2 - \beta_{1j} \beta_{1i}^2 - \beta_{1j} \beta_{2i}^2 \right) - \\ &\quad - \left(\frac{J_{zy}^{ij} + J_{yz}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{1i} \beta_{2j} + \beta_{1j} \beta_{2i} \right) + \left(\frac{J_{zy}^{ij} - J_{yz}^{ij}}{2} \right) \left(\beta_{1j} \beta_{2i} - \beta_{1i} \beta_{2j} \right) + \\ &\quad \left. + J_{yy} \beta_{2i} \beta_{2j} + J_{zz} \beta_{1i} \beta_{1j} \right) \end{aligned} \quad (88)$$

Csak akkor lesz ferromágneses az alapállapot, ha a lineáris tagok eltűnnek, ez akkor teljesül, ha $\sum_j J_{yx}^{ij} = \sum_j J_{xy}^{ji} = \sum_j J_{zx}^{ij} = \sum_j J_{xz}^{ji} = 0$. Az antiszimmetrikus rész a rácshelyben és a Descartes-koordinátákban vett felcserélésre is előjelet vált, a szimmetrikus rész egyikre sem, emiatt $J_{yx}^{ij} = J_{xy}^{ji}$ automatikusan teljesül (persze hasonló összefüggések a többi Descartes-koordinátát tartalmazó komponensre is felírhatók). Az antiszimmetrikus része a szögekben lineáris kifejezésben szereplő összegeknek mindig eltűnik a rács szimmetriája miatt. Ha a szimmetrikus részben a dipól-dipól-kölcsönhatást vesszük csak figyelembe, ez olyan járulékot ad, amely egyrészt csak J_{xy}^{ij} -t befolyásolja, mert ebben a síkban található a spinek, másrészt a szomszédokra összegezve ez is eltűnik, azaz a ferromágneses állapot valóban egyensúly lesz.

A továbbiakban csak olyan tagokat hagyjunk meg, amelyek a vizsgált vas vékonyréteg esetén is megjelennek, és mindegyik típus esetén csak azokra a szomszédokra, amelyek esetén a csatolás a legnagyobb abszolút értékű. Diagonális kölcsönhatás csak első szomszédok között legyen: J_{xx}, J_{yy}, J_{zz} , itt azt is feltesszük, hogy az első szomszédok a diagonális csatolás szempontjából ekvivalensek, ami a vas vékonyréteg esetén a koordinátarendszer helyes megválasztásával elérhető. A Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás a másodszomszédok között jelenjen meg: $\frac{1}{2}(J_{yz}^{ij} - J_{zy}^{ji}) = D^{ij}$. Egyes szimulációkban megengedünk szimmetrikus nemdiagonális részt is csak az első szomszédok között ($\frac{1}{2}(J_{xy}^{ij} + J_{yx}^{ji}) = Q^{ij}$), ez utóbbi viszont csak perturbatív járulékot ad, mivel a sorfejtésben vett együtthatói harmadrendűek.

Ezután kiszámolhatjuk a külső térhez, illetve az anizotrópiához tartozó tagokat is ebben a közelítésben:

$$K_x \sum_i \sigma_{ix}^2 + K_y \sum_i \sigma_{iy}^2 \approx K_x \sum_i \left(1 - \beta_{1i}^2 - \beta_{2i}^2\right) + K_y \sum_i \beta_{2i}^2 \quad (89)$$

$$-B \sum_i \sigma_i \approx -\sum_i \left(B_x \left(1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2}\right) + B_y \left(\beta_{2i} - \frac{\beta_{2i}^3}{6} - \frac{1}{2}\beta_{1i}^2\beta_{2i}\right) + B_z \left(-\beta_{1i} + \frac{\beta_{1i}^3}{6}\right) \right) \quad (90)$$

Látszik, hogy ha a ferromágneses irányra merőleges mágneses teret kapcsolunk be, akkor az megváltoztatja az alapállapotot, hiszen itt lineáris tagok is megjelentek. Viszont ha ezek nagyon kis amplitúdójúak, illetve időben is periodikusan változnak, akkor továbbra is számolhatunk az x irányú ferromágneses beállással.

Írjuk fel a kvadrátikus Hamilton-függvényt, melyből a közelítő mozgásegyenleteket származtatjuk:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\langle i,j \rangle_1} \left(J_{xx} \left(1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2}\right) + J_{yy}\beta_{2i}\beta_{2j} + J_{zz}\beta_{1i}\beta_{1j} \right) + \sum_{\langle i,j \rangle_2} D^{ij} \left(\beta_{1i}\beta_{2j} - \beta_{1j}\beta_{2i} \right) + \\ & + K_x \sum_i \left(1 - \beta_{1i}^2 - \beta_{2i}^2\right) + K_y \sum_i \beta_{2i}^2 - \sum_i \left(B_x \left(1 - \frac{\beta_{1i}^2}{2} - \frac{\beta_{2i}^2}{2}\right) + B_y\beta_{2i} - B_z\beta_{1i} \right) \end{aligned} \quad (91)$$

A mozgásegyenletek ebben az egységrendszerben:

$$\frac{\partial \sigma_i}{\partial t} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \sigma_i \times \left(-\frac{\partial H}{\partial \sigma_i} + \mathbf{B}_i^{\text{termikus}} \right) - \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \sigma_i \times \left(\sigma_i \times \left(-\frac{\partial H}{\partial \sigma_i} + \mathbf{B}_i^{\text{termikus}} \right) \right) \quad (92)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial \sigma_i} = -\frac{\partial H}{\partial \beta_{2i}} \mathbf{e}_y + \frac{\partial H}{\partial \beta_{1i}} \mathbf{e}_z \quad (93)$$

Ezeket a szögek szerint kifejtve az alábbi alakra egyszerűsíthetjük:

$$\begin{aligned} (1 + \alpha^2)d\beta_{2i} = & \left(-zJ_{xx}\beta_{1i} + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{zz}\beta_{1j} + \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}\beta_{2j} - 2K_x\beta_{1i} + B_x\beta_{1i} + B_z \right) dt + \\ & + \left(\sigma\beta_{1i} \circ dW_{ix} + \sigma \circ dW_{iz} \right) - \alpha \left(-zJ_{xx}\beta_{2i} + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{yy}\beta_{2j} - \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}\beta_{1j} - \right. \\ & \left. - 2K_x\beta_{1i} + 2K_y\beta_{2i} + B_x\beta_{2i} - B_y \right) dt - \alpha \left(\sigma\beta_{2i} \circ dW_{ix} - \sigma \circ dW_{iy} \right) \end{aligned} \quad (94)$$

$$\begin{aligned}
(1 + \alpha^2)d\beta_{1i} = & - \left(-zJ_{xx}\beta_{2i} + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{yy}\beta_{2j} - \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}\beta_{1j} - 2K_x\beta_{2i} + 2K_y\beta_{2i} + B_x\beta_{2i} - B_y \right) dt - \\
& - \left(\sigma\beta_{2i} \circ dW_{ix} - \sigma \circ dW_{iy} \right) - \alpha \left(-zJ_{xx}\beta_{1i} + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{zz}\beta_{1j} + \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}\beta_{2j} - \right. \\
& \left. - 2K_x\beta_{1i} + B_x\beta_{1i} + B_z \right) dt - \alpha \left(\sigma\beta_{1i} \circ dW_{ix} + \sigma \circ dW_{iz} \right)
\end{aligned} \tag{95}$$

Itt z az első szomszédok számát jelöli J_{xx} szorzójaként, $dW_{i\alpha}$ a Wiener-folyamat differenciális alakja. A Wiener-folyamat deriváltjára ($dW_{i\alpha}(t) = \eta_{i\alpha}(t)\sqrt{dt}$) teljesülnek a fehér zajt jellemző feltételek: $\langle \eta_{i\alpha}(t) \rangle = 0$, $\langle \eta_{i\alpha}(t)\eta_{j\beta}(t') \rangle = \delta(t-t')\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. A hőmérsékleti zaj nagyságát $\sigma = \sqrt{2\alpha T}$ adja meg ebben az egységrendszerben. Ez már egy lineáris, állandó együtthatós egyenletrendszer, amelynek formális, azaz mátrixalakban felírt megoldása analitikusan kiszámítható. Valamivel szemléletesebb eredményt kaphatunk, ha a csatolt rácshelyek helyett áttérünk olyan változókra, amelyekben diagonális a mátrix, egyelőre az 1, 2 indexektől eltekintve. Általánosan az egyenlet a következő alakú, ha a rácshelyekben vett indexekből vektorokat alakítunk ki:

$$d\beta = \mathbf{A}\beta dt + \mathbf{B}(d\mathbf{W})\beta + \mathbf{a}dt + \mathbf{b}(d\mathbf{W}) \tag{96}$$

Itt az $\mathbf{A}$ mátrix translációs szimmetriával rendelkezik, így az a Fourier-transzformációt leíró mátrixszal diagonalizálható:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^+, \quad \mathbf{V} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{R}_0} & e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{R}_0} & \dots \\ e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{R}_1} & e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{R}_1} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{97}$$

Itt $\mathbf{k}$ a Brillouin-zóna belsejében megengedett értékeket veheti fel, ezeket a rácsméret, illetve rácstípusa határozza meg. Legyen $\mathbf{V}^+\beta = \hat{\beta}$ a Fourier-transzformáltakból álló vektor ($\hat{\beta}(\mathbf{k}_j) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}_j\mathbf{R}_i}\beta_i$). Az erre vonatkozó egyenlet:

$$d\hat{\beta} = \mathbf{D}\hat{\beta}dt + \mathbf{V}^+\mathbf{B}(d\mathbf{W})\mathbf{V}\hat{\beta} + \mathbf{V}^+\mathbf{a}dt + \mathbf{V}^+\mathbf{b}(d\mathbf{W}) \tag{98}$$

A multiplikatív zajt tartalmazó tag az eredeti rács indexeiben diagonális, azaz minden változó a saját rácspontján vett zaj x komponensével van összeszorozva konstanstól eltekintve, az $\mathbf{A}$ mátrixot diagonalizálva viszont csatoltakká válnak az egyenletek:

$$(\mathbf{V}^+\mathbf{B}(d\mathbf{W})\mathbf{V}\hat{\beta})_i \sim \sum_{j,l} e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_l)\mathbf{R}_j} \hat{\beta}_l \circ dW_{jx} \tag{99}$$

A fizikai megfontolások miatt azonban célszerű a Fourier-transzformációs diagonalizálást használni, ugyanis a kísérletileg mérhető mennyiségek általában a Fourier-komponensekkel fejezhetők ki. Az egyszerűség kedvéért így tegyük fel, hogy a hőmérséklet nagyon alacsony, mivel a kitéréseket is kicsinek tételeztük fel, ez a kettő szorzatával arányos multiplikatív zaj elhanyagolhatóvá válik.

Az additív zajt tartalmazó tagot átírva:

$$(\mathbf{V}^+\mathbf{b}(d\mathbf{W}))_j \sim \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}_j\mathbf{R}_i} dW_{i\alpha} = dW_{\alpha}(\mathbf{k}_j) \tag{100}$$

Belátható, hogy az így bevezetett mennyiség deriváltja ($dW_{\alpha}(\mathbf{k}_i)(t) = \eta_{\alpha}(\mathbf{k}_i)(t)\sqrt{dt}$) is rendelkezik a fehér zaj tulajdonságaival: $\langle \eta_{\alpha}(\mathbf{k}_i)(t) \rangle = 0$, $\langle \eta_{\alpha}(\mathbf{k}_i)(t)\eta_{\beta}^*(\mathbf{k}_j)(t') \rangle = \langle \eta_{\alpha}(\mathbf{k}_i)(t)\eta_{\beta}(-\mathbf{k}_j)(t') \rangle = \delta(t-t')\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. Így ez a tag a transzformáció után is könnyen kezelhető, megtarthatjuk az egyenletben.

A differenciálegyenlet determinisztikus, inhomogén tagjának alakja:

$$(\mathbf{V}^+\mathbf{a}dt)_j \sim \delta_{j0} \tag{101}$$

Ez azért teljesül, mert az eredeti egyenletekben csak olyan tagok szerepeltek az (lineáris differenciálegyenlet értelemben) inhomogén részben, melyek térben (azaz fizikailag) homogén gerjesztést írtak le, azaz a Fourier-transzformáltban ez csak a $\mathbf{0}$ hullámszámon fog megjelenni.

Így az egyenletek a következő alakúak:

$$\begin{aligned}
(1 + \alpha^2)d\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) = & \left(-zJ_{xx}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{zz}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - 2K_x\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \right. \\
& + B_x\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \sqrt{n}\delta_{i0}B_z \Big) dt + \sigma \circ dW_z(\mathbf{k}_i) - \alpha \Big(-zJ_{xx}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + \\
& + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{yy}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) - 2K_x\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + 2K_y\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + \\
& + B_x\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - \sqrt{n}\delta_{i0}B_y \Big) dt + \alpha\sigma \circ dW_y(\mathbf{k}_i)
\end{aligned} \tag{102}$$

$$\begin{aligned}
(1 + \alpha^2)d\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) = & - \Big(-zJ_{xx}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{yy}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) - 2K_x\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + \\
& + 2K_y\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) + B_x\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - \sqrt{n}\delta_{i0}B_y \Big) dt + \sigma \circ dW_y(\mathbf{k}_i) - \alpha \Big(-zJ_{xx}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \\
& + \sum_{\langle j \rangle_1} J_{zz}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \sum_{\langle j \rangle_2} D^{ij}e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{R}_j}\hat{\beta}_2(\mathbf{k}_i) - 2K_x\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + B_x\hat{\beta}_1(\mathbf{k}_i) + \\
& + \sqrt{n}\delta_{i0}B_z \Big) dt - \alpha\sigma \circ dW_z(\mathbf{k}_i)
\end{aligned} \tag{103}$$

4.4. A linearizált egyenletek megoldása 0 hullámszámon

A fenti egyenleteket úgy oldjuk meg, hogy legyen a B_z gerjesztés időfüggő ($B_z \cos \omega t$), B_x időfüggetlen, és $B_y = 0$. Vizsgáljuk a $\mathbf{0}$ hullámszámú komponens - ez a különböző rácshelyeken vett szögkitérések átlagának felel meg -, mivel csak itt jelenik meg a külső mágneses térrel vett gerjesztés. A csillapítás miatt sejthető, hogy a homogén egyenletek megoldása exponenciálisan lecsengő lesz, így hosszú idő múlva csak a gerjesztésre adott válasz jelenik meg, ami így szintén a $\mathbf{0}$ hullámszámmra koncentrálódik. A kapott egyenletek a hullámszám indexeket elhagyva:

$$(1 + \alpha^2)d\hat{\beta}_2 = \left(-z(J_{xx} - J_{zz}) - 2K_x + B_x \right) \hat{\beta}_1 dt + \sqrt{n}B_z \cos \omega t dt + \sigma \circ dW_z - \tag{104}$$

$$- \alpha \left(-z(J_{xx} - J_{yy}) - 2(K_x - K_y) + B_x \right) \hat{\beta}_2 dt + \alpha\sigma \circ dW_y \tag{105}$$

$$(1 + \alpha^2)d\hat{\beta}_1 = - \left(-z(J_{xx} - J_{yy}) - 2(K_x - K_y) + B_x \right) \hat{\beta}_2 dt + \sigma \circ dW_y - \tag{106}$$

$$- \alpha \left(-z(J_{xx} - J_{zz}) - 2K_x + B_x \right) \hat{\beta}_1 dt - \alpha\sqrt{n}B_z \cos \omega t dt - \alpha\sigma \circ dW_z \tag{107}$$

Látszik, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás itt nem jelenik meg a rács szimmetriái miatt. Ez azt fogja jelenteni, hogy ha csak homogén gerjesztést használunk, akkor nem fogjuk tudni kimutatni, hogy ez a kölcsönhatás hogyan változtatja meg a rendszer viselkedését.

Először keressük a homogén egyenletrendszer megoldását, szokás szerint exponenciális alakban:

$$d\hat{\beta}_2 = \omega_{01}\hat{\beta}_1 dt - \alpha\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt \tag{108}$$

$$d\hat{\beta}_1 = -\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt - \alpha\omega_{01}\hat{\beta}_1 dt \tag{109}$$

$$\omega_{01} = \frac{1}{1+\alpha^2} \left(-z(J_{xx} - J_{zz}) - 2K_x + B_x \right) \tag{110}$$

$$\omega_{02} = \frac{1}{1+\alpha^2} \left(-z(J_{xx} - J_{yy}) - 2(K_x - K_y) + B_x \right) \tag{111}$$

$$\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_1 \sim e^{\lambda_{\pm} t} \tag{112}$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(-\alpha(\omega_{01} + \omega_{02}) \pm \sqrt{-4\omega_{01}\omega_{02} + \alpha^2(\omega_{01} - \omega_{02})^2} \right) \tag{113}$$

A csillapítás miatt látszik, hogy időben exponenciálisan lecsengő megoldást kapunk, amelynek hatása eltűnik, ha elég sok idő múlva, azaz a tranziensek lecsengése után számoljuk ki a ferromágneses iránytól vett eltéréseket. A gyök alatt lévő rész általában negatív, mert a Gilbert-csillapítás jellemzően 1-nél jóval kisebb szám ($\alpha \approx 0.01 - 0.1$).

Vizsgáljuk most az időben periodikus gerjesztésre adott választ:

$$d\hat{\beta}_2 = \omega_{01}\hat{\beta}_1 dt - \alpha\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt + \sqrt{n}\frac{B_z}{1+\alpha^2} \cos \omega t dt \quad (114)$$

$$d\hat{\beta}_1 = -\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt - \alpha\omega_{01}\hat{\beta}_1 dt - \sqrt{n}\frac{\alpha B_z}{1+\alpha^2} \cos \omega t dt \quad (115)$$

$$\hat{\beta}_{2,p} = b_1 \cos \omega t + b_2 \sin \omega t, \quad \hat{\beta}_{1,p} = a_1 \cos \omega t + a_2 \sin \omega t \quad (116)$$

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+\alpha^2)\omega_{02}(\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_{01}\omega_{02}) - \alpha^2\omega^2(\omega_{01} + \omega_{02}) \\ \alpha\omega(-\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_{02}^2) \\ \alpha\omega^2(\omega_{01} + \omega_{02}) \\ \omega(\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_{01}\omega_{02}) \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{(\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_{01}\omega_{02})^2 + \alpha^2\omega^2(\omega_{01} + \omega_{02})^2} \sqrt{n}\frac{B_z}{1+\alpha^2} \quad (117)$$

A lineáris differenciálegyenletek elméletéből ismert módon a p indexszel jelölt partikuláris megoldás egy azonos frekvenciájú válasz lesz, melyen rezonanciaszerű viselkedés figyelhető meg. A szimuláció az $S = \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2 - \langle m_z \rangle^2$ szórásnégyzet jellegű mennyiséget számolja, de mivel a nevező mind a négy konstans esetén azonos volt, és a rezonancia jellegét elsősorban ez befolyásolja, a fenti képletből a szimulációs eredményekre nézve is következtetéseket vonhatunk le. Éppen ezért határozzuk meg a nevező szélsőértékeit:

$$B_{x\pm} = -\frac{1}{2} \left(-z(2J_{xx} - J_{zz} - J_{yy}) - 2(2K_x - K_y) \pm \sqrt{(-z(J_{yy} - J_{zz}) - 2K_y)^2 + 4\omega^2(1-\alpha^2)} \right) \quad \text{minimumok} \quad (118)$$

$$B_{x,max} = -\frac{1}{2} \left(-z(2J_{xx} - J_{zz} - J_{yy}) - 2(2K_x - K_y) \right) \quad \text{maximum} \quad (119)$$

Leolvasható a képletből, hogy a minimumok, amelyek a szimulációs eredményekben, azaz reciprokot véve csúcsoknak felelnek meg, jól elkülönülnek egymástól, és a távolságukat nem csak a rendszer jellemzői befolyásolják, hanem a gerjesztő frekvencia is. A számításokban ezért további egyszerűsítéseket vezetünk be, amelyek a görbe szerkezetét csak kis mértékben befolyásolják: legyen $J_{xx} = J_{yy} = J_{zz} = J, K_y = 0$. Ekkor a képletek az alábbi alakra egyszerűsödnek:

$$\omega_0 = \frac{1}{1+\alpha^2}(B_x - 2K_x) \quad (120)$$

$$\lambda_{\pm} = -\alpha\omega_0 \pm i\omega_0 \quad (121)$$

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_0((1-\alpha^2)\omega^2 - (1+\alpha^2)^2\omega_0^2) \\ \alpha\omega(-\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_0^2) \\ 2\alpha\omega^2\omega_0 \\ \omega(\omega^2 - (1+\alpha^2)\omega_0^2) \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{((1+\alpha^2)\omega_0^2 - \frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2}\omega^2)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^4}{(1+\alpha^2)^2}} \sqrt{n}\frac{B_z}{1+\alpha^2} \quad (122)$$

Itt a nevezőt már úgy rendeztük, hogy jobban látszon rajta, hogyan viselkedik a külső mágneses tér (ω_0) változtatásának hatására. Ez a görbealak hasonló a csillapított-gerjesztett harmonikus oszcillátor amplitúdójának gerjesztő frekvenciától való függését leíró, négyzetes Lorentz-görbére emlékeztető függvényhez.

Ezután vizsgáljuk meg a hőmérsékletfüggő részt:

$$d\hat{\beta}_2 = \omega_{01}\hat{\beta}_1 dt - \alpha\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt + \sigma' \circ dW_z + \alpha\sigma' \circ dW_y \quad (123)$$

$$d\hat{\beta}_1 = -\omega_{02}\hat{\beta}_2 dt - \alpha\omega_{01}\hat{\beta}_1 dt + \sigma' \circ dW_y - \alpha\sigma' \circ dW_z \quad (124)$$

Itt $\sigma' = \frac{\sigma}{1+\alpha^2}$ az átskálázott szórás. Ennek az inhomogén résznek a megoldása:

$$\hat{\beta}_{2,termikus} = \frac{1}{2}\sigma' \left((\alpha - i) \int_0^t e^{\lambda_+(t-s)} \circ dW_y + (\alpha + i) \int_0^t e^{\lambda_-(t-s)} \circ dW_y \right) + \quad (125)$$

$$+ \frac{1}{2}\sigma' \left((1 + i\alpha) \int_0^t e^{\lambda_+(t-s)} \circ dW_z + (1 - i\alpha) \int_0^t e^{\lambda_-(t-s)} \circ dW_z \right) \quad (126)$$

$$\hat{\beta}_{1,termikus} = i\frac{1}{2}\sigma' \left((\alpha - i) \int_0^t e^{\lambda_+(t-s)} \circ dW_y - (\alpha + i) \int_0^t e^{\lambda_-(t-s)} \circ dW_y \right) + \quad (127)$$

$$+ i\frac{1}{2}\sigma' \left((1 + i\alpha) \int_0^t e^{\lambda_+(t-s)} \circ dW_z - (1 - i\alpha) \int_0^t e^{\lambda_-(t-s)} \circ dW_z \right) \quad (128)$$

Ezután ezen folyamatok várható értékét, illetve szórásnégyzetét kell kiszámolni, ugyanis a szimuláció során kapott S mennyiség ezektől függ. Mivel csak determinisztikus függvények sztochasztikus integráljai szerepelnek a kifejezésben, át lehet térni Ito-kalkulusra, ebben az esetben ugyanis egyszerűen ugyanazt a függvényt kell integrálni mindkét értelmezésben. Itt a következő összefüggéseket alkalmazhatjuk, amikor időben, illetve valószínűségi számítási értelemben vesszük a várható értékeket:

$$\langle \int_0^t g(s) \circ dW \rangle = \langle \int_0^t g(s) dW \rangle = 0 \quad (129)$$

$$\langle (\int_0^t g(s) \circ dW)^2 \rangle = \langle (\int_0^t g(s) dW)^2 \rangle = \langle \int_0^t g^2(s) ds \rangle \quad (130)$$

$$\langle e^{\lambda_{\pm} t} \rangle = 0 \quad \text{exponenciális lecsengésre} \quad (131)$$

$$\langle \sin \omega t \rangle = \langle \cos \omega t \rangle = 0 \quad (132)$$

$$\langle \sin^2 \omega t \rangle = \langle \cos^2 \omega t \rangle = \frac{1}{2} \quad (133)$$

Ebből a szórásnégyzetek összegére a következő eredményt kapjuk (a várható érték mindkét folyamat esetén 0):

$$\langle \hat{\beta}_2^2 \rangle + \langle \hat{\beta}_1^2 \rangle = \frac{\omega^2 + (1 + \alpha^2)\omega_0^2}{2 \left(\left((1 + \alpha^2)\omega_0^2 - \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2} \omega^2 \right)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^4}{(1 + \alpha^2)^2} \right)} n \frac{B_z^2}{1 + \alpha^2} + \frac{(1 + \alpha^2)\sigma'^2}{\alpha\omega_0} \quad (134)$$

Mindkét tag jól értelmezhető: az első a várt rezonanciaszerű viselkedést írja le, a második pedig arra vonatkozik, hogy a hőmérséklet valamelyest igyekszik eltéríteni a ferromágneses iránytól a spineket, a ferromágneses iránnyal párhuzamos külső tér pedig az ezzel párhuzamos beállást preferálja, így az eltérés mértékét ezek aránya, $\frac{2T}{B_x - 2K_x}$ fogja meghatározni. Érdekes még megjegyezni, hogy a gerjesztésből származó tag arányos a rácsmérettel (n), a hőmérsékletből származó tag viszont nem. A szimuláció során az S mennyiség kiszámolásánál viszont átlagoljuk a spinek beállítását a rácsra ($\langle m_z \rangle = \frac{1}{n} \sum_i \sigma_{iz}$), míg a szögváltozók Fourier-transzformálásánál $\sqrt{n}$ -nel osztottunk ($\hat{\beta}(\mathbf{0}) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_i \beta_i$), ugyanis így kaptunk a Fourier-térben is fehér zajt. Ez azt fogja okozni, hogy a külső gerjesztés miatt megjelenő tag a szimuláció esetén független lesz a rácsmérettől, míg a termikus tag $\frac{1}{n}$ szerint csökken, így minél nagyobb rácsot veszünk, a zaj hatása annál kisebb lesz.

A négyzetes Lorentz-görbe esetén a nevező vizsgálatával közelítőleg meghatározhatjuk a csúcsok helyét, vagyis a nevező minimumát, illetve a félérték-szélességet, azaz azon ω_0 -ok távolságát, melyeknél a nevező a minimum kétszerese:

$$\omega_{0,min} = \pm \frac{\sqrt{1 - \alpha^2}}{1 + \alpha^2} \omega \approx \pm \omega \quad (135)$$

$$\Delta\omega_0 = \frac{\sqrt{1 - \alpha^2 + 2\alpha}}{1 + \alpha^2} \omega - \frac{\sqrt{1 - \alpha^2 - 2\alpha}}{1 + \alpha^2} \omega \approx 2\alpha\omega \quad (136)$$

4.5. A linearizált mozgásegyenletek megoldása véges hullámszámú külső gerjesztés esetén

A Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás ugyan az eredeti mozgásegyenletekben megjelenik, de ha $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztést alkalmazunk, akkor a $\mathbf{0}$ hullámszámon vett válaszban már eltűnik, pedig ez az egyedüli olyan, mely nem cseng le hosszú idő elteltével. Az eltűnést egyrészt a rács szimmetriája magyarázza: ez okozza, hogy az együttthatókból álló mátrix diagonalizálása Fourier-transzformációnak felel meg, ami fizikailag azt jelenti, hogy a $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztés nem tud a kváziimpulzus megmaradásával más hullámszámú magnonokat is gerjeszteni. Másrészt azt is felhasználtuk a számolás során, hogy az időben periodikus gerjesztés is $\mathbf{0}$ hullámszámú, ami a valódi kísérletekben a mikrohullámú gerjesztés miatt jó közelítés. A szimulációban ezt kétféleképpen küszöbölhetjük ki: egyrészt lehetséges, hogy a kristály nem tökéletes, a vékonyrétegen lyukak, illetve szigetek találhatók, hiszen a tényleges mintákat nem lehet tökéletesen elkészíteni. Ennek hatására már nem csak a $\mathbf{0}$ hullámszámú komponens gerjeszthető homogén térrel. Ezen lyukak hatását könnyen modellezhetjük, ha bizonyos spineket egységvektor helyett $\mathbf{0}$ -ra állítunk be, ekkor ezek nem vesznek részt a dinamikában. Másrészt egy szimuláció esetén a gerjesztő térre természetesen tetszőleges diszperziós relációt felvehetünk, így véges hullámszámú gerjesztést is létrehozhatunk. A következőkben vizsgáljuk ez utóbbi hatását a linearizált mozgásegyenletekre. Persze annak érdekében, hogy ezt a szimulációval is össze tudjuk vetni, szükséges a spineket Fourier-transzformáltjainak időbeli átlagát számolni, azaz az S mennyiséget így módosítani: $S(\mathbf{k}) = \langle |m_y^2(\mathbf{k})| \rangle + \langle |m_z^2(\mathbf{k})| \rangle + \langle |m_y^2(-\mathbf{k})| \rangle + \langle |m_z^2(-\mathbf{k})| \rangle - \langle |m_y(\mathbf{k})|^2 \rangle - \langle |m_z(\mathbf{k})|^2 \rangle - \langle |m_y(-\mathbf{k})|^2 \rangle - \langle |m_z(-\mathbf{k})|^2 \rangle$

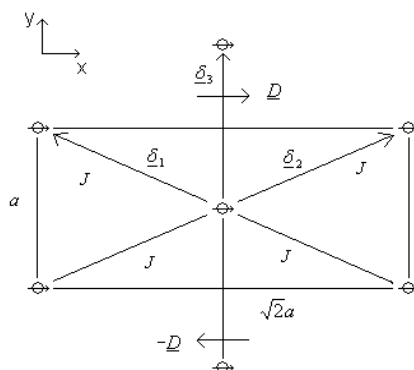
Tehát legyen a gerjesztő tér $B_z = 2B_z \cos \omega t \cos \mathbf{k}_0 \mathbf{r}$, $B_x = 2B_x \cos \mathbf{k}_0 \mathbf{r}$, ahol $\mathbf{k}_0$ a Brillouin-zónában megengedett hullámszám. A csatolások, illetve az anizotropia értéke $J_{xx} = J_{yy} = J_{zz} = J$, $K_y = 0$. Ekkor a következő egyenletekben marad meg az időfüggő gerjesztés:

$$\begin{aligned} d\hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0) &= \hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) dt + i\hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0) dt - \alpha \hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0) dt + i\alpha \hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) \cdot \\ &\quad \cdot \hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) dt + \sqrt{n} \frac{B_z}{1+\alpha^2} \cos \omega t dt + \sigma' \circ dW_z(\pm \mathbf{k}_0) + \alpha \sigma' \circ dW_y(\pm \mathbf{k}_0) \end{aligned} \quad (137)$$

$$\begin{aligned} d\hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) &= -\hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0) dt + i\hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) dt - \alpha \hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) \hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) dt - i\alpha \hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) \cdot \\ &\quad \cdot \hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0) dt - \sqrt{n} \frac{\alpha B_z}{1+\alpha^2} \cos \omega t dt + \sigma' \circ dW_y(\pm \mathbf{k}_0) - \alpha \sigma' \circ dW_z(\pm \mathbf{k}_0) \end{aligned} \quad (138)$$

$$\hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) = \frac{1}{1+\alpha^2} \left(-zJ + 2J \left(\cos \pm \mathbf{k}_0 \delta_1 + \cos \pm \mathbf{k}_0 \delta_2 \right) + B_x - 2K_x \right) \quad (139)$$

$$\hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) = \frac{1}{1+\alpha^2} \left(2D \sin \pm \mathbf{k}_0 \delta_3 \right) \quad (140)$$



6. ábra. A szomszédokba mutató rácsvektorok

A megfelelő, szomszédos rácsponthoz mutató vektorok az ábrán láthatók. Az időben nem lecsengő megoldások a $\mathbf{k}_0$ és a $-\mathbf{k}_0$ hullámszámú komponensre jelennek meg, és ezek esetében már a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás is megmarad. Oldjuk meg a homogén egyenletrendszert:

$$\hat{\beta}_2(\pm \mathbf{k}_0), \hat{\beta}_1(\pm \mathbf{k}_0) \sim e^{\lambda \pm t} \quad (141)$$

$$\lambda_{\pm} = -\alpha(\hat{J}(\pm \mathbf{k}_0) \pm \hat{D}(\pm \mathbf{k}_0)) + i(\hat{D}(\pm \mathbf{k}_0) \pm \hat{J}(\pm \mathbf{k}_0)) \quad (142)$$

Ezután az egyenlet inhomogén részének megoldása következik, de az időfüggő gerjesztésre adott válasz pontos értéke rendkívül bonyolult, számunkra viszont elég a rezonancia szerkezetét vizsgálni. Vezessük be a következő egyszerűsítő jelöléseket: $\hat{J}(\mathbf{k}_0) = \hat{J}(-\mathbf{k}_0) = \hat{J}$, $\hat{D}(\mathbf{k}_0) = -\hat{D}(-\mathbf{k}_0) = \hat{D}$. Ezek használatával a szórásnégyzetek összeadása után az alábbi eredményt kapjuk (a várható értékek továbbra is 0-k):

$$\begin{aligned} & \langle |\hat{\beta}_{1,p}(\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{2,p}(\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{1,p}(-\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{2,p}(-\mathbf{k}_0)|^2 \rangle \sim \\ & \sim \left(\left((1+\alpha^2)\hat{J}^2 - \left(\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2}\omega^2 + (1+\alpha^2)\hat{D}^2 - 2\omega\hat{D} \right) \right)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^2}{1+\alpha^2} \left(\frac{\omega}{\sqrt{1+\alpha^2}} - \sqrt{1+\alpha^2}\hat{D} \right)^2 \right)^{-1} \cdot \\ & \cdot \left(\left((1+\alpha^2)\hat{J}^2 - \left(\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2}\omega^2 + (1+\alpha^2)\hat{D}^2 + 2\omega\hat{D} \right) \right)^2 + \frac{4\alpha^2\omega^2}{1+\alpha^2} \left(\frac{\omega}{\sqrt{1+\alpha^2}} + \sqrt{1+\alpha^2}\hat{D} \right)^2 \right)^{-1} \end{aligned} \quad (143)$$

Vizsgáljuk ezeket a kifejezéseket α -ban vezető rendben, nézzük a tényezőkre külön-külön, hogy melyik nevező mikor lesz minimális, ugyanis a csúcsok elég élesek, ezért ez továbbra is megfelelő közelítést ad az eredményre. Ez esetben négy minimum lesz $\hat{J}$ -vel kifejezve, melyeket átrendezve megkapható a B_x -től való függés is:

$$\hat{J}(\mathbf{k}_0) = \left(-zJ + 2J(\cos \mathbf{k}_0 \delta_1 + \cos \mathbf{k}_0 \delta_2) + B_x - 2K_x \right) \quad (144)$$

$$\hat{J}_{min} \approx \pm(\omega - \hat{D}), \pm(\omega + \hat{D}) \quad (145)$$

$$\Delta \hat{J} \approx 2\alpha\omega \quad (146)$$

Itt ismét megjelenik az a megkettőződés, amely miatt pozitív és negatív nagyságú mágneses térre is lesz rezonancia. Ez a két csúcs szétválasztható a szimuláció során, ha ω elég nagy, ilyenkor elég csak abban a tartományban elvégezni a szimulációt, ahol az egyik csúcs található. Érdekesebb viszont a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás miatti megkettőződés, ennek nagyságát ugyanis a rendszer paraméterei határozzák meg, és nem a külső tér frekvenciája. Ezen csúcsok távolsága közelítőleg $4D \sin \mathbf{k}_0 \delta_3$, ami megegyezik a $\mathbf{k}_0$ és $-\mathbf{k}_0$ hullámszámú magnon energiakülönbségének a korábban számolt magnonspektrumban, azaz a varakozásnak megfelelően, ha ezzel a módszerrel vizsgáljuk a rendszert, amely összekapcsolja a $\mathbf{k}_0$ és $-\mathbf{k}_0$ hullámszámokat, mindkét magnonfrekvencia környékén rezonanciát kapunk. Ezek akkor lesznek szétválaszthatók, ha a félérték-szélesség kisebb a csúcsok távolságánál: $4D \sin \mathbf{k}_0 \delta_3 > 2\alpha\omega$. Ehhez az szükséges, hogy a felhasadáshoz képest a csillapítás és a gerjesztő frekvencia ne legyen túl nagy.

Megvizsgálható a hőmérsékleti zajra adott válasz is, ennek időben el nem tűnő része az alábbi alakú lesz:

$$\langle |\hat{\beta}_{1,t}(\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{2,t}(\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{1,t}(-\mathbf{k}_0)|^2 \rangle + \langle |\hat{\beta}_{2,t}(-\mathbf{k}_0)|^2 \rangle \sim \frac{(1+\alpha^2)\hat{J}^2\sigma'^2}{\alpha\hat{J}(\hat{J}^2 - \hat{D}^2)} \quad (147)$$

Ez $\hat{D} = 0$ esetben visszaadja azt az eredményt, amit a $\mathbf{0}$ hullámszámú esetben kaptunk, csak ott ω_0 szerepelt $\hat{J}$ helyett, azaz ez is egy olyan tag, amely lényegében a hőmérséklet és a külső tér amplitúdójának hányadosával arányos. Ez azt írja le, hogy a külső statikus tér növelésével egyre inkább abban az irányban állnak be a spinek, ezt a hőmérsékleti zaj egyre kevésbé tudja ellensúlyozni.

4.6. Perturbációszámítás a szimmetrikus nemdiagonális csatolásra

A linearizált egyenletekkel való számolás után vizsgáljuk meg a szimmetrikus nemdiagonális rész hatását is. Láttuk, hogy ha az energiát magasabb rendben fejtjük sorba, akkor ez egy harmadrendű járulékot okoz:

$$\Delta H = \sum_{\langle i,j \rangle_1} -Q^{ij} \left(\beta_{2i}\beta_{1j}^2 + \beta_{2i}\beta_{2j}^2 + \beta_{2j}\beta_{1i}^2 + \beta_{2j}\beta_{2i}^2 \right) \quad (148)$$

Ha a mozgásegyenleteket is magasabb rendben fejtjük sorba, akkor ennek a deriváltjából is lesznek megmaradó, szögekben másodrendű tagok:

$$\frac{\partial \Delta H}{\partial \beta_{2i}} = - \sum_{\langle j \rangle_1} Q^{ij} \left(\beta_{1j}^2 + \beta_{2j}^2 + 2\beta_{2j}\beta_{2i} \right) \quad (149)$$

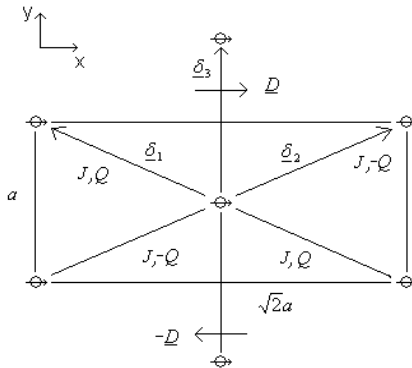
$$\frac{\partial \Delta H}{\partial \beta_{1i}} = - \sum_{\langle j \rangle_1} 2Q^{ij} \beta_{2j}\beta_{1i} \quad (150)$$

Ha továbbra is feltételezzük, hogy a szögkitérések kicsik, akkor ezek a tagok perturbációként kezelhetők a lineáris egyenletben. Ezen perturbáció hatása főleg akkor lehet érdekes, ha maga a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nem jelent meg a válaszfüggvényben, de arra számítunk, hogy esetleg egy ilyen típusú csatolás mégis hozhat valamilyen látható változást. Így vizsgáljuk azt az esetet, ahol a rács szabályos, és csak térben homogén gerjesztés van. Ilyenkor a klasszikus perturbációs számítás módszere szerint járhatunk el: először megoldjuk a linearizált egyenleteket, majd ezen nulladrendű megoldást behelyettesítve a perturbációs tagba, azt magát gerjesztésként kezelhetjük a lineáris egyenletre nézve, így kapunk egy jobb közelítést az egyenlet megoldására.

A linearizált egyenletek a Fourier-komponensekre áttérve szétcsatolódnak, így továbbra is ezekben a változóknak érdemes számolni. Ezért a perturbációs tagot is fejezzük ki ezekkel a Fourier-komponensekkel. A $\mathbf{k}$ hullámszámú komponensekre $(\hat{\beta}_1(\mathbf{k}), \hat{\beta}_2(\mathbf{k}))$ vonatkozó egyenletek esetén a megjelenő tagok a következő alakúak:

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_{\langle j \rangle_1} Q^{ij} \left(\beta_{1j}^2 + \beta_{2j}^2 + 2\beta_{2j}\beta_{2i} \right) \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{\sqrt{n}} &= \frac{1}{\sqrt{n}} 2Q \sum_{\mathbf{k}'} \left(\left(\hat{\beta}_1(\mathbf{k}')\hat{\beta}_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \hat{\beta}_2(\mathbf{k}')\hat{\beta}_2(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \right) \cdot \right. \\ &\quad \cdot \left(\cos \mathbf{k}\delta_1 - \cos \mathbf{k}\delta_2 \right) + 2\hat{\beta}_2(\mathbf{k}')\hat{\beta}_2(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\ &\quad \cdot \left. \left(\cos \mathbf{k}'\delta_1 - \cos \mathbf{k}'\delta_2 \right) \right) \end{aligned} \quad (151)$$

$$\sum_i \sum_{\langle j \rangle_1} 2Q^{ij} \beta_{2j}\beta_{1i} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}}{\sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{n}} 4Q \sum_{\mathbf{k}'} \hat{\beta}_2(\mathbf{k}')\hat{\beta}_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \left(\cos \mathbf{k}'\delta_1 - \cos \mathbf{k}'\delta_2 \right) \quad (152)$$



7. ábra. A szomszédokba mutató rácsvektorok

A fenti számolásban kihasználtuk, hogy a dipólusok közötti kölcsönhatásból származó csatolásnak az ábrán látható szimmetriája van. A perturbációból az a tag lesz érdekes, amelyet külső gerjesztésként értelmezve, a rá adott válasz hosszú időre átlagolva is megmaradó járulékot ad. A lineáris egyenlet

megoldásából így csak azokat a tagokat vesszük figyelembe, amelyek az eredeti külső gerjesztésre (a változó mágneses térre) adott választ tartalmazzák, mert a homogén differenciálegyenlet megoldása minden komponensre időben exponenciálisan lecseng. Így a perturbáció kifejezésében csak a $\mathbf{0}$ hullámszámú komponenseket érdemes megtartani: $\mathbf{k}' = \mathbf{0}, \mathbf{k} = \mathbf{k}' = \mathbf{0}$. Viszont ekkor a $\cos$ -t tartalmazó tagok (amelyek a csatolás szimmetriája miatt jelentek meg) 0-vá teszik a kifejezést, azaz a perturbációs számítás első rendjében ez nem fog olyan gerjesztésként hatni a rendszerre, melyre adott válasz hosszú időn át megmarad. Ugyanez elmondható magasabb rendekben is, mert ott ismét csak exponenciálisan lecsengő megoldásokat lehet majd a kifejezésbe helyettesíteni.

Összességében tehát elmondható a lineáris közelítésben, hogy időfüggő külső gerjesztés hiányában a ferromágneses iránytól vett szögkitérések időben exponenciálisan lecsengenek, kivéve egy tagot, mely a hőmérséklet és a ferromágneses iránnyal párhuzamos effektív tér hányadosával arányos, azaz egyedül a hőmérséklet hoz létre némi rendezetlenséget a rendszerben. Időben periodikus, a ferromágneses irányra merőleges, de térben homogén gerjesztés esetén a ferromágneses iránnyal párhuzamos statikus tér változtatásának függvényében rezonanciaszerű viselkedés figyelhető meg. Ennek a rezonanciának az alakja nem függ sem a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás értékétől, sem a dipólusok közötti kölcsönhatás (perturbációként kezelt) nem diagonális részétől, ezek hatása ugyanis tökéletes rácsban kiesik. Ha viszont a gerjesztés véges hullámszámú, vagy a rácsban lyukak vannak, a rezonancia alakja megváltozik, így ezen paraméterek hatása is kimutatható.

5. Szimulációs eredmények

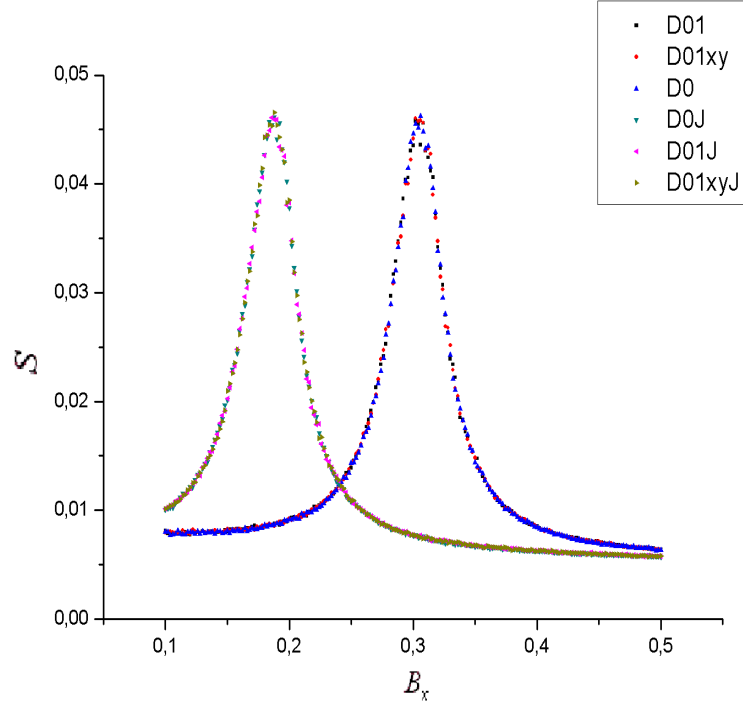
5.1. Gerjesztés homogén mágneses térrel

A fenti elméleti számításokat a továbbiakban összevetjük saját szimulációs eredményeinkkel. A kiindulási modell legyen a vasrétegnek megfelelő centrált téglalaprács, a skalár Heisenberg-modellnek megfelelően első szomszédok közötti ferromágneses csatolással. Ezen csatolás értékét egységnyiinek választottuk az egyszerűség kedvéért: $J = -1$. Minden szimuláció esetén szükség volt egy $K_x > 0$ értékű anizotrópia konstansra, különben a kétdimenziós rendszer nem tudna ferromágnesesen rendeződni, és ez kijelöli a rendeződés irányát is. Ezt az alapmodellt bizonyos szimulációk esetén kiegészítettük Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatással (D), szimmetrikus nemdiagonális csatolással (Q), illetve eltérő diagonális csatolási elemekkel is (J_{xx}, J_{yy}, J_{zz}). Az így kapott eredményeket összehasonlítva skalár Heisenberg-modellre vonatkozókkal megvizsgálható ezen paraméterek hatása a szimulációból számolt mennyiségekre. A szimulációt minden esetben a ferromágneses alapállapotból indítottuk, mivel tudtuk, hogy ettől nem nagyon fog eltérni, azonban véletlenszerű kezdeti beállásnál tovább kellett volna várni, hogy egy ehhez hasonló állapot alakuljon ki. A vizsgált rendszer mérete 32×32 atom volt, periodikus határfeltétellel. A korábban említettek szerint a termikus zaj hatása csökkenthető a rácsméret növelésével (legalábbis az egyenletek lineáris közelítésében), viszont a számolási idő is nő ebben az esetben, ezért ezt a rácsméretet választottuk, hogy nem túl hosszú számolási idő után kevésbé zajos eredményeket kapjunk. A szimulációból számolt mennyiség $S = \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2 - \langle m_z \rangle^2$, ennek értékét vizsgáltuk a B_x homogén, statikus mágneses tér változtatása mellett, miközben állandó frekvenciájú, erre merőleges irányú, kis amplitúdójú B_z teret is alkalmaztunk. Várakozásunk szerint az $S - B_x$ grafikonokon megfigyelhető az a rezonanciagörbe, melynek képletét a lineáris közelítésben meghatároztuk.

A kis amplitúdóra azért volt szükség, hogy a rendszer ne nagyon térjen el a ferromágneses alapállapottól, ugyanis ekkor a lineáris közelítés nem érvényes: például a spinek normáltsága miatt $\langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle = 1$, így az $S \approx \frac{2}{3}$ (itt $\langle m_y \rangle \approx \langle m_z \rangle \approx 0$) már lényegében olyan rendszert ír le, amelyben a spinek teljesen össze-vissza állnak. Ezért B_z értékét célszerű volt úgy beállítani, hogy $S < 0.1$ maradjon a teljes szimuláció során.

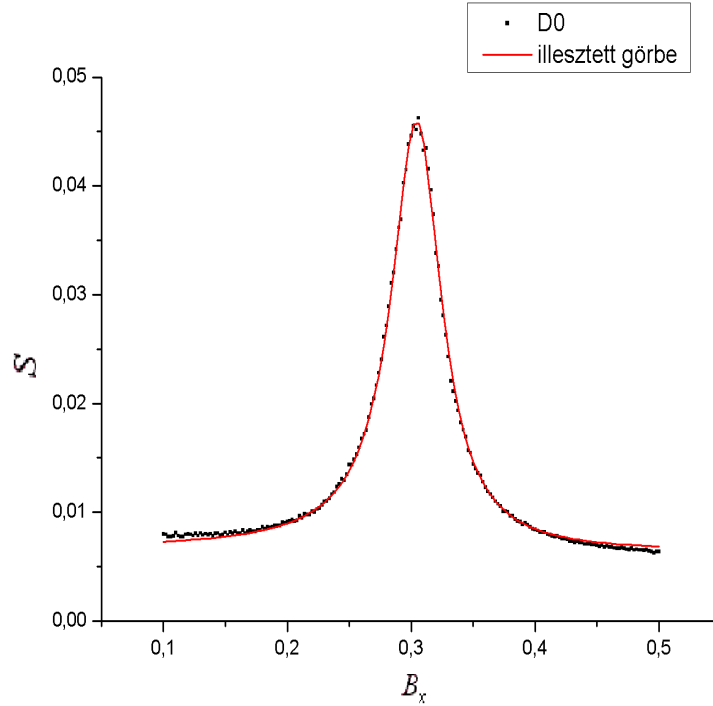
Egy másik kérdés volt a gerjesztő frekvencia, illetve a Gilbert-csillapítás megválasztása. A linearizált egyenletből azt kaptuk, hogy minél nagyobb a gerjesztő frekvencia, annál nagyobb külső mágneses térről kapjuk a csúcst, azaz a hőmérséklet hatása annál kisebb lesz. Ezt a hatást szintén erősíti, ha az anizotrópia értékét nagynak választjuk, ugyanis ez is stabilizálja a ferromágneses beállást: a lineáris közelítés szerint folyamatosan bekapcsolt, $-2K_x$ nagyságú homogén térrel ekvivalensen viselkedik. Ha a csillapítás is nagy, az a vonalszélességet növeli, így elég ritkábban felvenni a mérési pontokat, azaz nagyobb lépésekben változtatni a mágneses teret. Másrészt ez növeli a homogén egyenlet megoldásának lecsengési sebességét is (az exponens arányos volt α -val), így kevesebb idő után úgy lehet venni, hogy a tranziensek már lecsengtek, azaz el lehet kezdeni az átlagolást.

Azonban hátránya is van annak, ha csak nagy mágneses tereknél tudunk mérni, ugyanis lehetséges, hogy az érdekes változások kis mágneses térről, illetve gerjesztő frekvenciánál következnek be. Ennek eléréséhez azonban csökkenteni kell a csillapítást, illetve az anizotrópiát is, viszont mindkét lépés instabilabbá teszi a rendszert, jelentősen növelve azt az időt, amit az átlagolás előtt, illetve az alatt el kell tölteni. Ha nem elég sokáig átlagolunk, akkor a ténylegestől lényegesen eltérő görbék kaphatunk. Ez a legegyszerűbben úgy mutatható ki, ha ugyanazon tartományon elvégezzük a szimulációt a mágneses teret felfelé, illetve lefelé változtatva is. Ha a két görbe jelentősen eltér, akkor egyértelmű, hogy az átlagolás előtti, illetve az alatti idő túl rövid. A nagyságrendek érzékeltetésére: $\alpha = 0.05, K_x = -0.1$ értékek mellett a szimulációk során elég volt 150 időegységet várni az átlagolás előtt, és 350 időegységig átlagolni, hogy jó statisztikájú görbék kaphatók. Ha viszont az $\alpha = 0.01, K_x = -0.05$ értékeket használtuk, akkor már csak 1500 időegység eltelté után, további 1500 időegységre történő átlagolással kaptunk jó eredményt, azaz a szimulációs idő hatszorosára nőtt (ez valós időben 1, illetve 6 napot jelent közelítőleg).



8. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, azzal együtt ($D = 0.1$), illetve szimmetrikus nemdiagonális csatolással ($J_{xy} = -0.01$), valamint ugyanezek a diagonális elemek megváltoztatásával ($J_{xx} - J_{yy} = J_{xx} - J_{zz} = -0.03$, a többi paraméter $J = -1$, $\omega = 0.5$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$)

Először vizsgáljuk meg, mi lesz a csatolási paraméterek megváltoztatásának hatása. Az itteni eredmény igazolja a lineáris közelítés azon jóslatát, hogy $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztés esetén sem a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás (D01 szimuláció), sem a még ezen felül bekapcsolt szimmetrikus nemdiagonális csatolás (D01xy szimuláció) nem hoz létre lényegében semmilyen változást a görbe alakjában az eredeti (D0) szimulációhoz képest, a rács szimmetriája miatt. Ezek esetén a csúcs helye nagyjából $2|K_x| = 0.2$ értékkel van eltolódva a gerjesztő ω frekvenciához képest, ez is megegyezik a lineáris modell jóslatával: ez pontosan a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnon energiája. Ha a diagonális elemeket megváltoztatjuk (J indexű szimulációk), akkor a csúcs eltolódik, mégpedig szintén a lineáris modell jóslatának megfelelő mértékben: az eltolás közelítőleg $-z(J_{xx} - J_{yy}) = -0.12$, ahol $z = 4$ az első szomszédok száma.

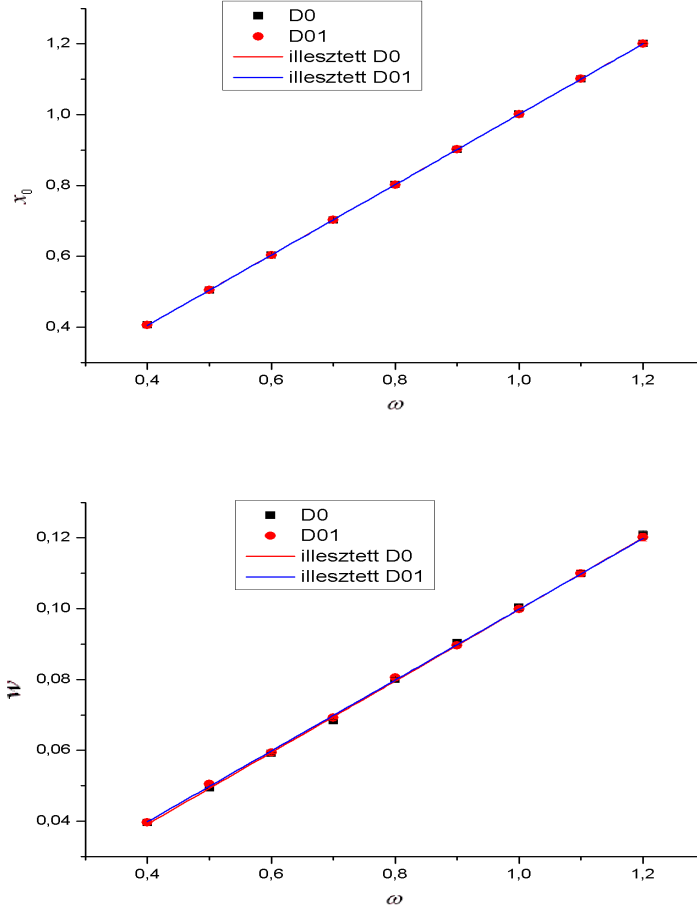


9. ábra. A kapott gerjesztési spektrum Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, az illesztett görbével ($J = -1$, $\omega = 0.5$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$)

A szimulációs adatokra az alábbi görbét illesztettük: $S = C + \frac{A}{((B_x - E)^2 - x_0^2) + x_0^2 w^2}$, ez ugyanis hasonlít a lineáris közelítésben kapott eredményhez. Ugyan itt mind a számlálót (A), mind a hőmérsékleti háttér (C) konstansnak vettük, de ezek elég lassan változó függvények, és a lineáris közelítés nem egzakt, így ezzel kisebb hibát vettünk, mintha egy bonyolultabb nemlineáris függvényt próbálnánk illeszteni. A többi paraméter jelentése: E a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnon energiájának -1 -szerese, x_0 a gerjesztő frekvencia, w a félérték-szélesség. Ezek a lineáris közelítésben, α -ban legalacsonyabb rendben $2K_x = -0.2$, $\omega = 0.5$ és $2\alpha\omega = 0.05$ értéket vesznek fel. Mivel a kifejezésben az utóbbi három paraméter összegei, illetve szorzatai szerepelnek, ezért az illesztés nagyon érzékeny az értékükre. Ezért E értékét az illesztésnél -0.2 értékre rögzítettük, ugyanis ez az eltolás könnyen leolvasható az ábráról, és így a csúcshelyén, illetve a félérték-szélességen vizsgálhatjuk a lineáris közelítés pontosságát. Az illesztés a paraméterek értékeire a következő eredményeket adta, az ábrán látható módon elég pontosan illeszkedő görbe mellett:

	érték	hiba
A	2,44E-05	2,27E-07
E	-0,2	0
C	0,00639	3,91E-05
w	0,04929	2,59E-04
x_0	0,50425	7,41E-05

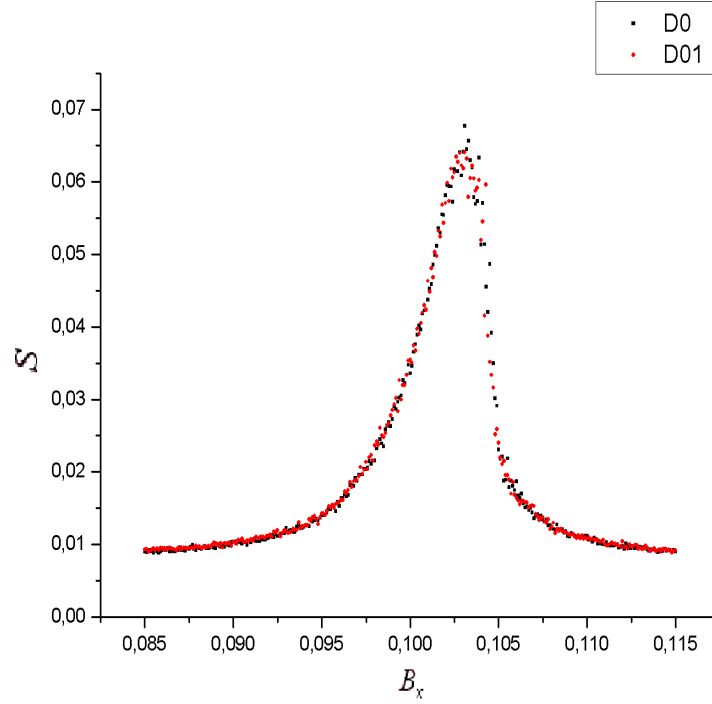
Itt x_0 és w nagyon jó közelítéssel megegyezik a lineáris közelítésből számolt értékkel.



10. ábra. A csúcs helye és a félérték-szélesség a gerjesztő frekvencia változtatásának függvényében ($\omega = 0.4 - 1.2$)

Ezután a szimulációt elvégeztük különböző gerjesztő frekvenciák mellett is, azt 0.4 és 1.2 között változtatva 0.1 nagyságú lépésekben. Minden esetben a fenti görbét illesztettük a szimulációs adatokra az $E = -0.2$ érték rögzítése mellett. Ekkor az x_0 paraméternek lényegében meg kell egyeznie ω -val, a w félérték-szélesség pedig $2a\omega = 0.1\omega$ értékű a lineáris közelítésben. Ezért egyeneseket illesztettünk a mért adatokra a gerjesztő frekvencia függvényében, és a táblázatokból láthatóan jó közelítéssel 0 tengelymetszetű, 1, illetve 0.1 meredekségű egyeneseket kaptunk. Az is a lineáris közelítést igazolja, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül ($D=0$ szimuláció), illetve annak 0.1-es értékénél ($D=0.1$ szimuláció) felvett görbékből származtatott egyenesek között lényegében semmi különbség nincs, adott gerjesztési frekvencia esetén a két különböző szimulációból számított értékekre illesztett görbék w , illetve x_0 paraméterei a legtöbb esetben hibahatáron belül megegyeznek.

x_0	$D = 0$		$D = 0.1$	
	érték	hiba	érték	hiba
metszéspont	0,0076	1,26E-04	0,0075	1,29E-04
meredekség	0,9936	1,86E-04	0,9936	1,86E-04
w	$D = 0$		$D = 0.1$	
	érték	hiba	érték	hiba
metszéspont	-0,0013	4,94E-04	-1,79E-04	4,98E-04
meredekség	0,1011	7,76E-04	0,1000	7,71E-04

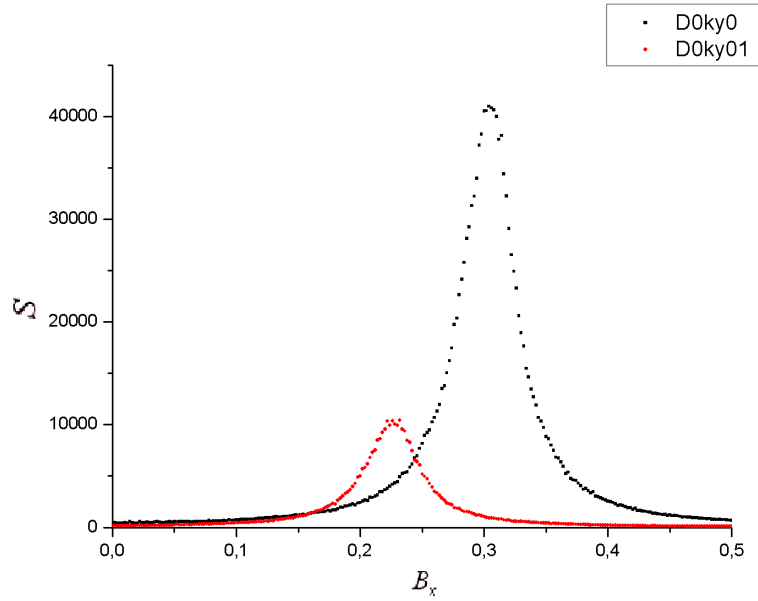


11. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, illetve azzal együtt ($D = 0.1$) alacsonyabb gerjesztő frekvencia, illetve csillapítás mellett ($J = -1$, $\omega = 0.2$, $\alpha = 0.01$, $T = 0.01$, $K_x = -0.05$)

Elvégeztük a szimulációt úgy is, hogy csökkentettük a gerjesztő frekvenciát és a csillapítást. Ahhoz, hogy ω értékét lényegesen csökkenteni tudjuk, érdemes volt a K_x anizotrópia konstans is kisebb abszolút értékűre (-0.05) állítani, ugyanis ez befolyásolja, hogy a rezonancia helye mennyire tolódik el a gerjesztő frekvenciától. Erre a szimulációra azért volt szükség, mert elképzelhetőnek tartottuk, hogy részletesebb felbontás mellett esetleg mégis megjelenik a görbék alakja között eltérés a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következtében. De az ábráról leolvasható, hogy a lineáris közelítés itt is helyes becslést adott a rendszer viselkedésére, hiszen a két görbe továbbra is lényegében egyforma.

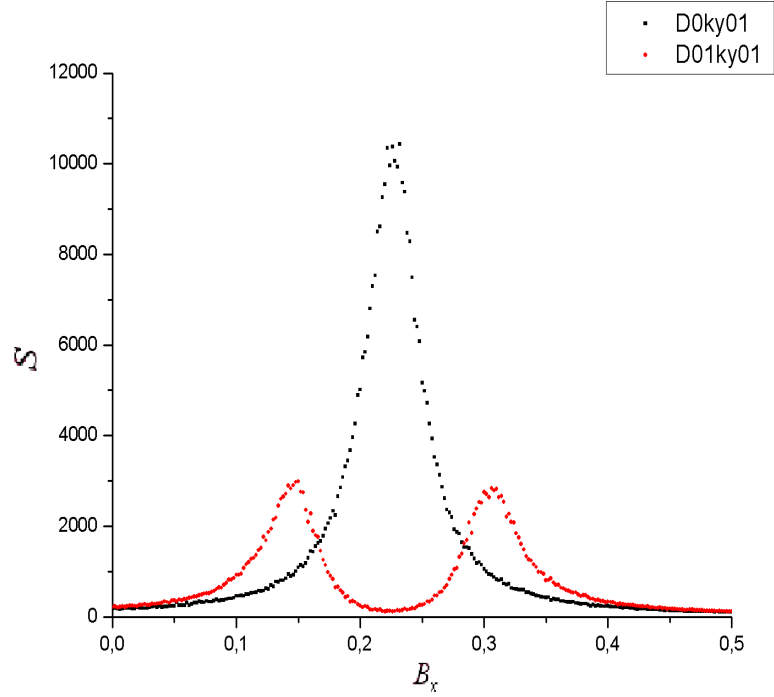
5.2. Gerjesztés inhomogén mágneses térrel

A homogén térrel végzett gerjesztés ugyan visszaadta a lineáris közelítés eredményét, azonban éppen ezért nem tudta kimutatni a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következményét a rendszer viselkedésére nézve. A programot ezért úgy módosítottuk, hogy a gerjesztő frekvencia és hullámszám egymástól függetlenül beállítható legyen, azaz tetszőleges diszperziós relációjú mágneses térrel lehessen szimulációt végezni. Ezután a program bemenetében meg kellett adni a vizsgálandó $\mathbf{k}_0$ hullámszámvektort. Ezután a program módosította ezt a megadott hullámszámvektort a legközelebbi olyan értékre, amely a Brillouin-zónában megengedett, azaz amelyre a $\cos \mathbf{k}_0 \mathbf{r}$ függvény periodikus lesz, ha $\mathbf{r}$ -et eltoljuk a teljes rács méretével. Erre azért volt szükség, mert továbbra is periodikus határfeltételt használtunk, illetve a linearizált egyenletek levezetésénél is láttuk, hogy pontosan az ilyen hullámszámú komponensek jelentek meg. Ezután minden pontban kiszámolta a program a statikus, illetve időfüggő mágneses teret, az amplitúdót a fenti $\cos \mathbf{k}_0 \mathbf{r}$ fázisfaktorról beszorozva, majd lefuttatva a szimulációt. A statikus tér amplitúdóját továbbra is adott lépésekben változtattuk, míg a frekvencia állandó maradt. A szimulációból számolt mennyiség itt az $\langle \mathbf{m}(\mathbf{k}_0) \rangle = \langle \sum_i \cos(\mathbf{k}_0 \mathbf{R}_i) \boldsymbol{\sigma}_i \rangle$ képlettel definiált cos-transzformált, illetve a négyzetre emelt kifejezés átlaga volt (az átlagolást itt időben kell elvégezni). Ebből definiáltuk az $S(\mathbf{k}_0) = \langle m_y^2(\mathbf{k}_0) \rangle + \langle m_z^2(\mathbf{k}_0) \rangle - \langle m_y(\mathbf{k}_0) \rangle - \langle m_z(\mathbf{k}_0) \rangle$ mennyiséget, amely a lineáris közelítésben számolt, $\mathbf{k}_0$ és $-\mathbf{k}_0$ Fourier-komponensű $\hat{\beta}$ szögeket is tartalmazza, így a várákozás szerint az ott ismertetett görbealakot kell kapnunk rá.



12. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, $\mathbf{0}$ hullámszámnál, illetve minimális hullámszámnál ($J = -1$, $\omega = 0.5$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$)

Elvégeztük a szimulációt Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, $\mathbf{0}$, illetve minimális y irányú hullámszám esetén (D0ky0, illetve D0ky01 szimulációk), mert a spektrumban y irányú hullámszámok esetén várunk felhasadást, ha a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást is bekapcsoljuk. A minimális hullámszám értéke $\sqrt{2}ak_y = 2\pi \frac{\sqrt{2}}{16}$, ahol a a rácsállandó, mert továbbra is 32×32 -es rácson végeztük a szimulációt. Itt megfigyelhető a csúcs eltolódása (ennek értéke a lineáris közelítésben $4(1 - \cos \frac{1}{2}ak_y) = 4(1 - \cos \frac{2\pi}{32})$), ami annak a következménye, hogy itt egy nagyobb energiájú magnont gerjesztünk, hiszen a gerjesztési energia $\omega - B_{x,max}$ a lineáris közelítésből számolt eredmény alapján.

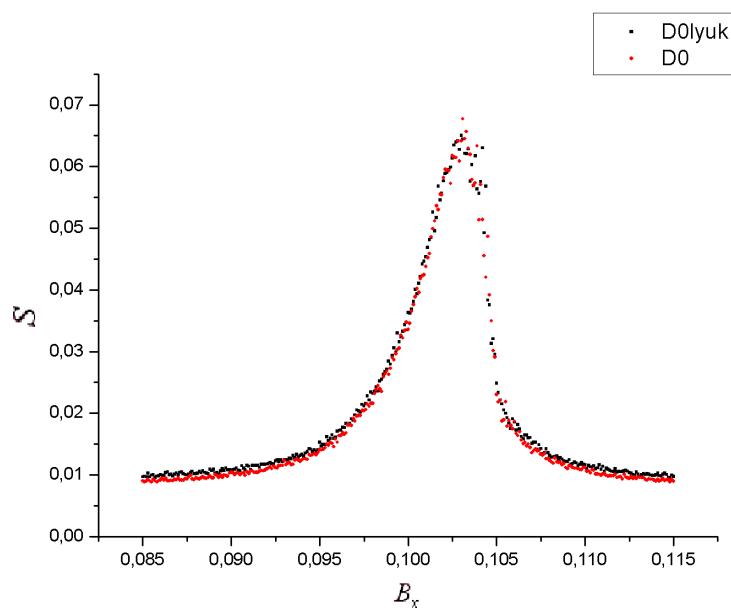


13. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, illetve azzal együtt ($D = 0.1$) minimális hullámszámnál ($J = -1$, $\omega = 0.5$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$)

Ezután elvégeztük a szimulációt úgy is, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást is figyelembe vettük (D01ky01 szimuláció). Itt is a lineáris közelítéssel jól egyező eredményt kaptunk: a csúcs két részre hasadt, melyek távolsága nagyjából $4D \sin \frac{2\pi}{16}$. Így itt már valóban sikerült kimutatnunk azt a különbséget, amelyet a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás az ellentétes irányban haladó (ellentétes hullámszámhoz tartozó) magnonok energiája között hoz létre.

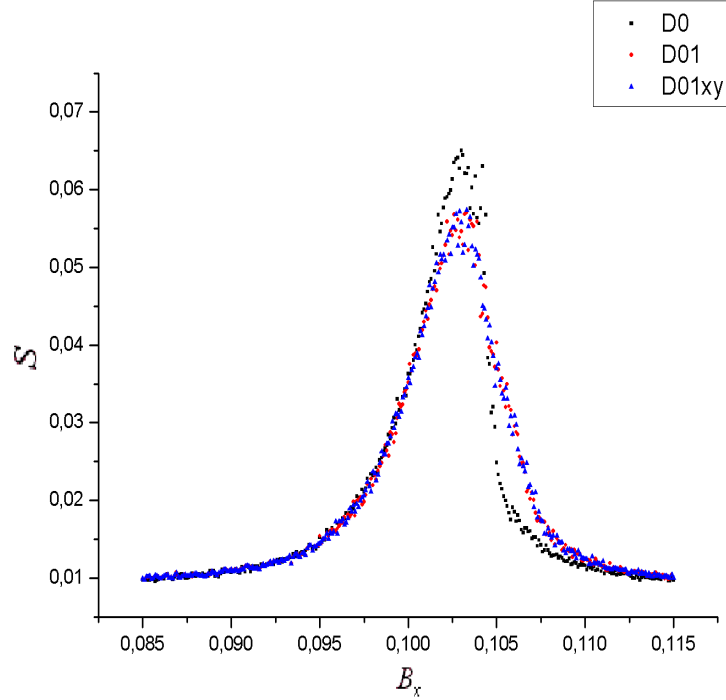
5.3. Gerjesztés homogén mágneses térrel, rendezetlen rács esetén

A mozgásegyenletek lineáris közelítésének megoldásakor említettük, hogy az okozta $\mathbf{0}$ hullámszámon a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás eltűnését, hogy a rács teljesen szabályos volt, viszont ha néhány rácspontból hiányoznak atomok, akkor ez a viselkedés megváltozhat. Ezért készítettünk egy olyan programot, amely képes beolvasni a rácson a spinek beállítását (ezt az eredeti spindinamikai program is el tudja végezni, hiszen annak a kezdeti konfigurációját is be lehet olvasni fájlból), majd egy véletlenszerűen kiválasztott rácspontból indulva, első szomszédokon áthaladva felépít egy spinekből álló cseppet, melynek méretét a program bemenetén állíthatjuk be, majd a csepp minden elemén a spinek értékét $\mathbf{0}$ -ra állítja. Mivel a kimenet ugyanolyan formájú, mint a bemenet, ezt a spineket kinullázó programot többször egymás után lefuttatva, a rácson több különálló, kisebb-nagyobb cseppet lehet létrehozni, melyeken a spinek értéke $\mathbf{0}$ lesz. Utána a kapott rácsot meg lehet adni a spindinamikai szimulációs program kezdeti konfigurációjaként, és mivel a 0 nagyságú spinek nem hoznak létre effektív teret a többi rácsponton, ezzel el lehet érni azt a hatást, amit az ezekről a rácspontokról hiányzó atomok okoznak. A szimulációs program mindig megpróbálja lenormálni a spineket, ha a mágneses tér amplitúdója vagy a hőmérséklet változik (erre a numerikus számolás hibái miatt van szükség), ezért ezt a normálást úgy kellett megváltoztatni, hogy a 0 nagyságú spineket ne vegye figyelembe. A szimulációt itt is el lehet ezután ugyanúgy végezni, mint a szabályos rács esetén: adott frekvenciájú, időben periodikusan változó B_z tér mellett a kiindulási ferromágneses beállítás irányával párhuzamos B_x tér amplitúdóját változtatva. A szimulációból szerzett ábrázolandó mennyiség itt is $S = \langle m_y^2 \rangle + \langle m_z^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2 - \langle m_z \rangle^2$, csak azt kell figyelembe venni, hogy a spindinamikai program nem érzékeli a 0 értékre beállított spineket, ezekkel viszont nyilván nem érdemes számolni az átlagolás során, így az átlagokat utólag kell átskálázni annak megfelelően, hogy ténylegesen hány spin volt a rendszerben.



14. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, ha a spinek közül 50 véletlenszerűen ki van nullázva, illetve szabályos rácsban ($J = -1$, $\omega = 0.2$, $\alpha = 0.01$, $T = 0.01$, $K_x = -0.05$)

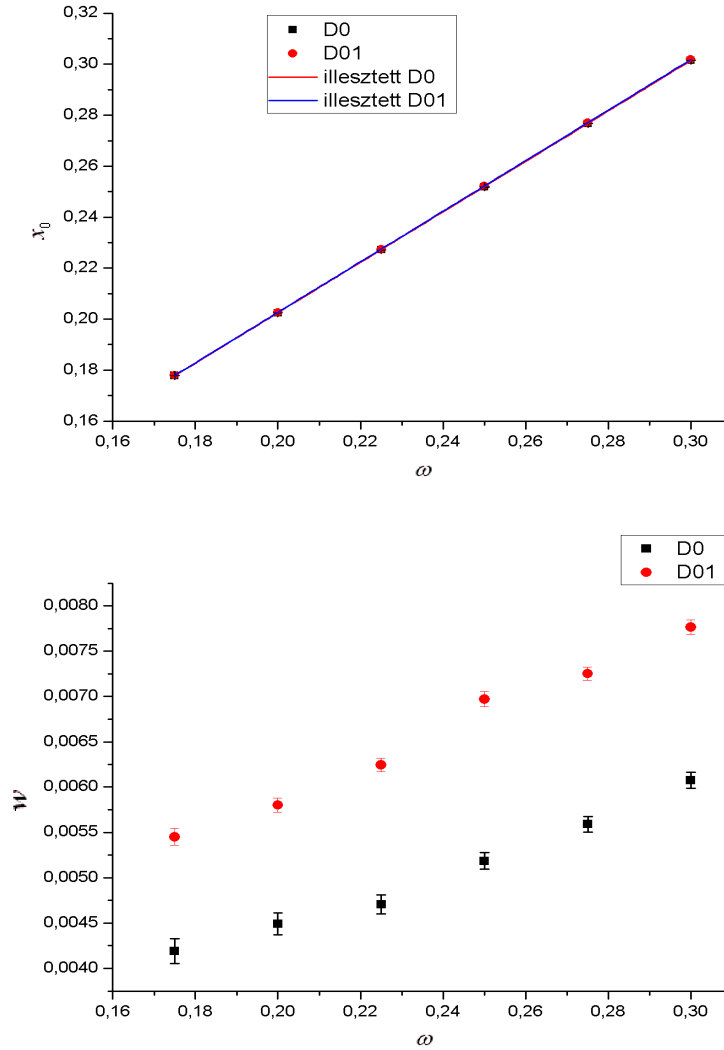
Az eredeti 32×32 spint tartalmazó rácsból így kiválasztottunk véletlenszerűen 10 darab, 5×5 spinből álló cseppet, melyeken kinulláztuk a spineket, és lefuttattuk a szimulációt az eredeti skalár Heisenberg-modellre. Ha az S mennyiséget a nem $\mathbf{0}$ spinek tényleges számát ismerve számítjuk a fenti módon, akkor lényegében teljesen ugyanolyan spektrumot (D0lyuk szimuláció) kapunk, mint szabályos rács esetén (D0 szimuláció), ahogy az az ábrán is látszik.



15. ábra. A kapott gerjesztési spektrumok Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül, azzal együtt ($D = 0.1$), illetve szimmetrikus nemdiagonális csatolással ($J_{xy} = -0.01$), ha a spinek közül 50 véletlenszerűen ki van nullázva ($J = -1$, $\omega = 0.2$, $\alpha = 0.01$, $T = 0.01$, $K_x = -0.05$)

Más lesz viszont a helyzet, ha a csatolásban Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást (D01 szimuláció), illetve e mellett szimmetrikus nemdiagonális csatolást, azaz dipólusok közötti kölcsönhatást (D01xy szimuláció) is figyelembe veszünk. A csúcs helye ugyan nem változik lényegében, viszont a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következtében a csúcs alacsonyabb és szélesebb lesz. Mivel a kiszélesedés alapvetően a magasabb frekvenciák irányában jelenik meg, azt a következtetést is le lehetne vonni, hogy abban az irányban a görbén valamilyen kisebb csúcs vagy váll alakul ki, de ennek jelölése az itteni felbontás mellett nem állapítható meg biztosan. Ebben az esetben nincs elméleti képletünk a kapott pontokra illesztendő függvényre, de mivel az a $D = 0$ esetben lényegében visszaadta a tökéletes rácsra kapott eredményt, ezért alkalmazhatjuk az ottani próbafüggvényt, és annak paramétereit hasonlíthatjuk össze a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélküli, illetve azt tartalmazó esetre. Ez a függvény $S = C + \frac{A}{((B_x - E)^2 - x_0^2) + x_0^2 w^2}$, ahol E értékét ezúttal $2K_x = -0.1$ értéken rögzítettük az illesztés pontosítása érdekében. Ekkor a lineáris közelítés szerint a csúcs helye $x_0 = \omega = 0.2$, a félérték-szélesség pedig $w = 2\alpha\omega = 0.04$. A szimulációt elvégeztük négy különböző bemeneti fájl esetén, melyek abban különböztek, hogy mely spinek voltak kinullázva. Az illesztési paramétereket az alábbi táblázat tartalmazza, melyből leolvasható, hogy a csúcs helye alig változik, a szélessége viszont mindenképpen 10 – 20%-kal nagyobb a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást nem tartalmazó esetről. A csúcs helyének illesztési hibája mindenhol kisebb $5 \cdot 10^{-5}$ -nél, a félérték-szélesség esetében pedig $1.3 \cdot 10^{-4}$ -nél.

bemeneti fájl sorszáma	$D = 0$		$D = 0.1$	
	x_0	w	x_0	w
1	0,20249	0,0045	0,20266	0,0058
2	0,20248	0,0045	0,20308	0,0048
3	0,20250	0,0044	0,20274	0,0050
4	0,20244	0,0045	0,20266	0,0058



16. ábra. A csúcs helye és a félérték-szélesség a gerjesztő frekvencia változtatásának függvényében ($\omega = 0.175 - 0.3$)

Ezután adott bemeneti fájl mellett elvégeztük a szimulációt úgy, hogy a gerjesztő frekvencia értékét változtattuk 0.175 és 0.3 között, 0.025 nagyságú lépésekben. Könnyen leolvasható, hogy a csúcs helye ebben az esetben sem függ attól, hogy van-e Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás, és a lineáris közelítésből kapott eredménnyel ($x_0 \approx \omega$) is jó egyezést mutat, ez az illesztési paramétereket tartalmazó táblázat is tartalmazza. Viszont az ideális rácson végzett szimulációkhoz képest lényeges változás, hogy a félérték-szélességben jelentős eltérés van a két eset között, a csatolási tenzor antiszimmetrikus része érzékelhető vonalkiszélesedést okoz.

x_0	$D = 0$		$D = 0.1$	
	érték	hiba	érték	hiba
metéspont	0,00462	7,27E-05	0,00447	4,81E-05
meredekség	0,9894	2,83E-04	0,9911	1,94E-04

5.4. Dinamikus struktúrafaktor

A fentiekben ismertetett módszer képes arra, hogy egy hullámszámon - jellemzően ez a $\mathbf{0}$ hullámszám -, illetve rögzített gerjesztési frekvencián vizsgálja a rendszer viselkedését, egy szórásnégyzet jellegű S mennyiség kiszámításának segítségével. Szélesebb hullámszám-, illetve frekvenciatartományban is végezhetünk egyszerre szimulációt, ha a fenti mennyiség helyett a teljes időbeli és térbeli korrelációs függvényt, illetve ennek Fourier-transzformáltját számoljuk, utóbbi mennyiség neve dinamikus struktúrafaktor. Ez a korrelációs függvény nagy jelentőséggel bír például fázisátalakulások vizsgálatánál[20], melyek közelében univerzális kritikus viselkedést mutat. Szórási kísérletek esetén pedig a dinamikus struktúrafaktor a szórási amplitúdónak feleltethető meg, melynek abszolút érték négyzete a szórt intenzitás. A korrelációs függvény $\alpha = x, y, z$ indexű komponensét a következő módon definiálják egy rács esetén:

$$C_\alpha(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, t) = \langle \sigma_{i\alpha}(t) \sigma_{j\alpha}(0) \rangle - \langle \sigma_{i\alpha}(t) \rangle \langle \sigma_{j\alpha}(0) \rangle \quad (153)$$

Itt a $\langle \rangle$ jelölés sokaságátlagot jelent, amely gyakran helyettesíthető időátlaggal olyan értelemben, hogy nagyon hosszú idejű szimulációkat felosztanak rövidebb szakaszokra, és azokra számolják a fenti mennyiségeket, majd ezek között átlagolnak. Mivel az általunk használt szimulációs programban a spinek hossza a differenciálegyenlet numerikus megoldása közben változik, ami nem kedvez a hosszú idejű szimulációknak, mi ténylegesen sokaságátlagot számoltunk, azaz ugyanabból a kezdeti feltételből többször lefuttattuk a szimulációt, a véletlenszám-generátor kezdeti értékének változtatása miatt különböző eredményekkel.

A dinamikus struktúrafaktor definíciója:

$$S_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{i,j,t} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} e^{i\omega t} C_\alpha(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, t) \quad (154)$$

Itt eredetileg időben folytonos a Fourier-transzformáció, de a szimuláció csak diszkrét időpontokról ad eredményt, így a fenti kifejezésben ezt is diszkrétizáltuk. Fontos megjegyezni, hogy a fenti kifejezés a rácsvektorokra kétszeres összegzést tartalmaz, amelyről a változó eltolásával belátható, hogy egy Fourier-transzformációnak és egy rácsra vett összegzésnek (átlagolásnak) felel meg. Ha bevezetjük a spinek térbeli ($\hat{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, t) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \sigma_{i\alpha}$), illetve térbeli és időbeli Fourier-transzformáltját ($\tilde{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \sum_i e^{i\omega t} \hat{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, t)$), akkor a fenti kifejezés a következő alakra hozható:

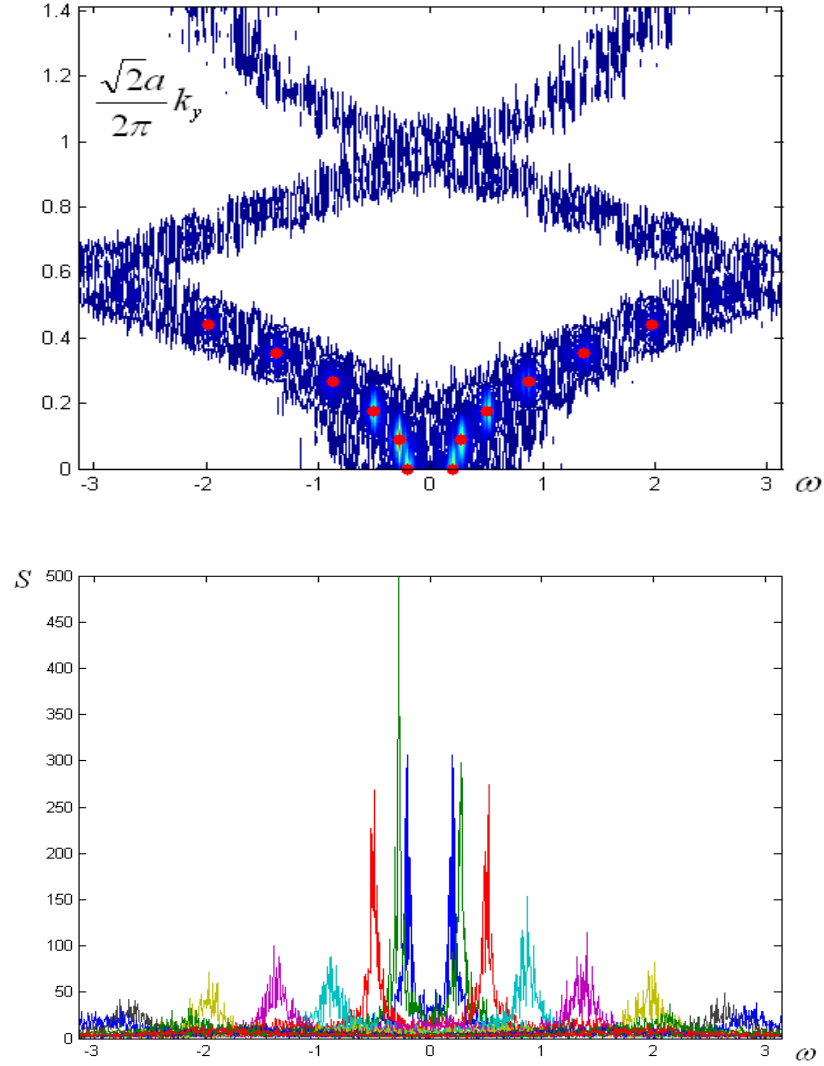
$$S_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \langle \tilde{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) \hat{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, t=0) \rangle - \langle \tilde{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) \rangle \langle \hat{\sigma}_\alpha(\mathbf{k}, t=0) \rangle \quad (155)$$

Ez a mennyiség a dolgozat tárgyát tekintve azért hasznos, mert kapcsolatba hozható a magnonspektrummal. Tegyük fel ugyanis, hogy csak egy rögzített $\mathbf{k}$ hullámszámú és ω frekvenciájú magnon van a rendszerben, amely a spineket az x irányú ferromágneses beállítás körüli kis amplitúdójú körmozgásra kényszeríti: $\sigma(\mathbf{R}_i) = \sigma_0 + \Delta\sigma_y \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_i - \omega t) + \Delta\sigma_z \sin(\mathbf{k}\mathbf{R}_i - \omega t)$, ahol $\Delta\sigma_y^2 = \Delta\sigma_z^2 = \Delta\sigma^2$ a kis kitérés és σ_0 egy helytől független mennyiség, a ferromágneses irányba eső komponense a spineknek. Elsőként a térbeli összegzést elvégezve az alábbi eredményt kapjuk:

$$\sum_i \sigma(\mathbf{R}_i) \sigma(\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{R}) = \sum_i \sigma_0^2 + \Delta\sigma^2 \cos(\mathbf{k}\Delta\mathbf{R} - \omega t) \quad (156)$$

Ezen a kifejezésen jól látszik, hogy a Fourier-transzformáltja csak bizonyos hullámszámon, illetve frekvencián jelenik meg. Persze a valóságban egyszerre több magnon lesz a rendszerben, ez a módszer viszont alkalmas arra, hogy a sokaságátlag elvégzése után kimutassa ezeket, ugyanis a dinamikus struktúrafaktorban a csúcsok pont ezeknél a megfelelő hullámszám-frekvencia-pároknál fognak megjelenni.

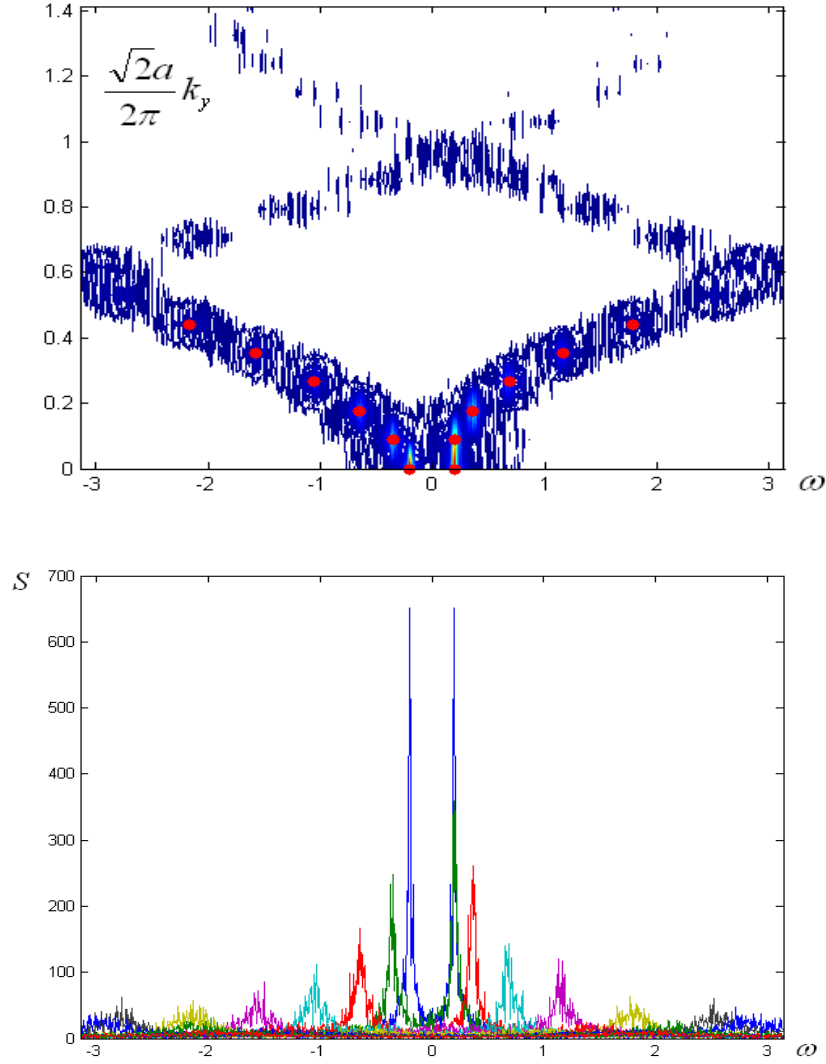
A fentiek ismeretében a spindinamikai programhoz készítettünk egy kiegészítést, amely a fájlba kiírt spinkonfigurációkon elvégzi a Fourier-transzformációt. Ehhez adott hőmérsékleten több futást kell végezni, hogy a sokaságátlag elvégezhető legyen, de ezt a funkciót már az eredeti program is tartalmazta, ugyanis korábban fázisátalakulások vizsgálatára is használtuk, ahol a kritikus pont közelében lévő nagy zajt több futás elvégzésével valamennyire csökkenteni lehetett. A Fourier-transzformált elsősorban a kis frekvenciatartományban érdekes, egyrészt mivel a lineáris közelítésből számolt spektrum valószínűleg ott közelíti a ténylegeset, másrészt mert alacsony hőmérsékleten a nagyobb energiájú magnonok sokkal kisebb számban ($S_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$ vizsgálatok kisebb amplitúdóval) jelennek meg. Ezért elegendő ritkábban kiírni a spinkonfigurációkat, hiszen az időkülönbség és a maximális frekvencia közötti összefüggés $2\pi\omega_{max}\Delta t = 1$. Ugyanakkor elég hosszú ideig kell végezni a szimulációt, hogy a frekvenciatérben megfelelő legyen a felbontás, az erre vonatkozó összefüggés $2\pi\Delta\omega t_{max} = 1$.



17. ábra. A kapott struktúrafaktor Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélkül az y irányú hullámszám, illetve a frekvencia függvényében ($J = -1$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$, $k_x = 0$), a piros pontok a lineáris közelítésből kapott spektrumot jelzik

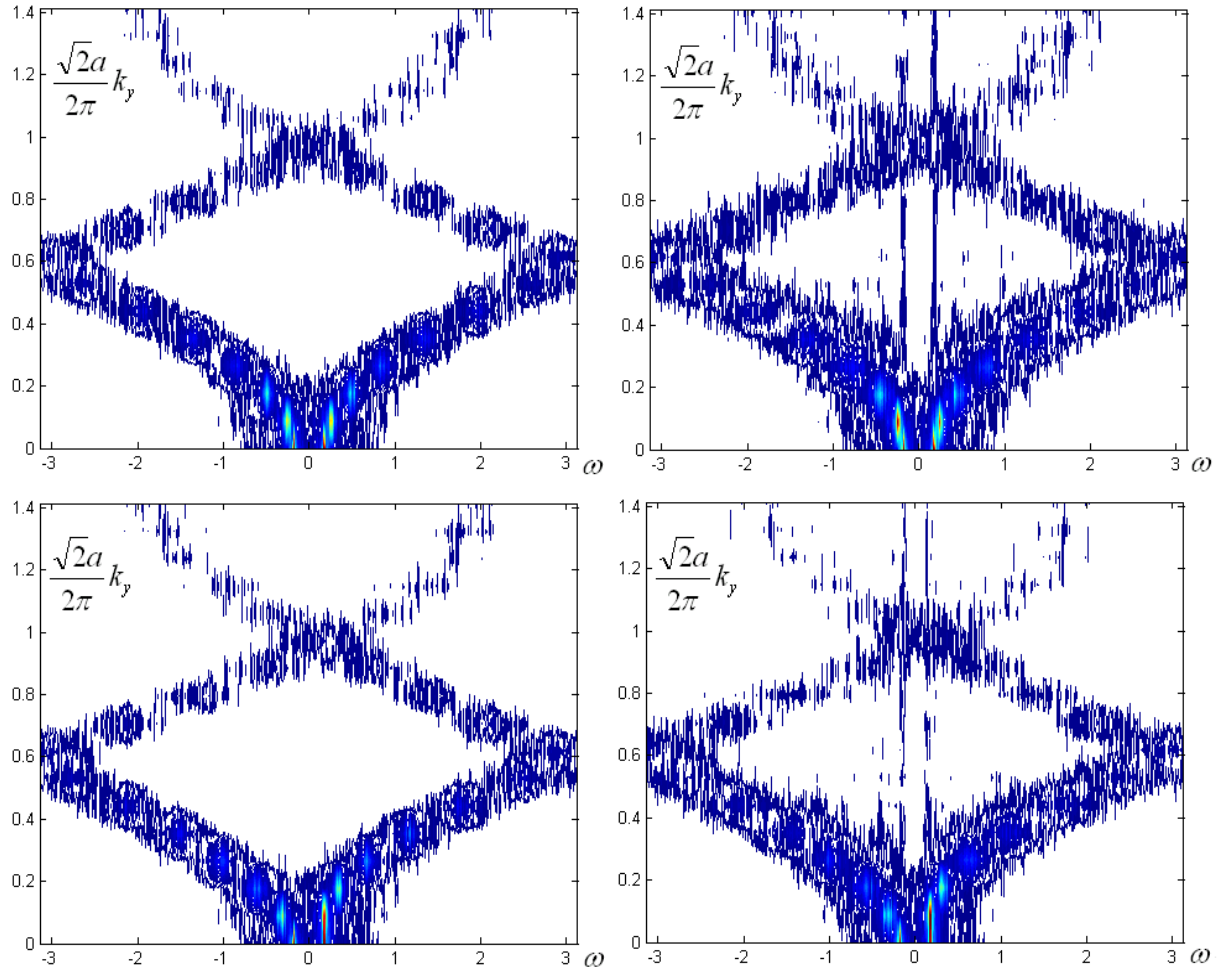
A szimuláció, majd a Fourier-transzformáció elvégzése után ezúttal is azt a mennyiséget ábrázoltuk, amely a ferromágneses x iránytól való eltérést jellemzi, azaz az y és z irányú szórásnégyzetek összegét: $S = |S_y(\mathbf{k}, \omega)|^2 + |S_z(\mathbf{k}, \omega)|^2$. A szimulációkat $t_{max} = 1000$ időegységig végeztük, így a frekvenciatérben vett felbontás $\Delta\omega = \frac{2\pi}{1000}$, és az eredményeket $\Delta t = 1$ időegység eltéréssel írtuk ki fájlba, ennek következtében a megengedett frekvenciaértékek 0 és 2π , vagy eltolva $-\pi$ és π között helyezkednek el, az ennél nagyobb frekvenciák visszatükröződve jelennek meg az ábrán.

A fenti ábrákon a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélküli esetben elvégzett szimuláció eredményei látszanak. Csak a k_y tengely mentén haladva felvett komponenseket ábrázoltuk ($k_x = 0$), mert a számolt magnonspektrumban ilyen irányban jelenik meg eltérés, ha a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást is figyelembe vesszük. A szintvonalas ábrán jól követhető, hogy a frekvencia függvényében milyen hullámszámú gerjesztések jelennek meg, ráadásul ezek nagyon jó egyezést mutatnak a piros pontokkal jelölt, lineáris közelítésből számolt magnonspektrummal, melynek képlete $\omega = \pm \left(-4J(1 - \cos \frac{1}{2}ak_y) - 2K_x \right)$. A második ábrán a különböző hullámszámú komponensek különböző színnel vannak egymás mellett ábrázolva, ezen a csúcsok magasságainak különbsége jobban megfigyelhető, a magasabb energiájú gerjesztések jelentősen kisebb amplitúdóval jelennek meg.



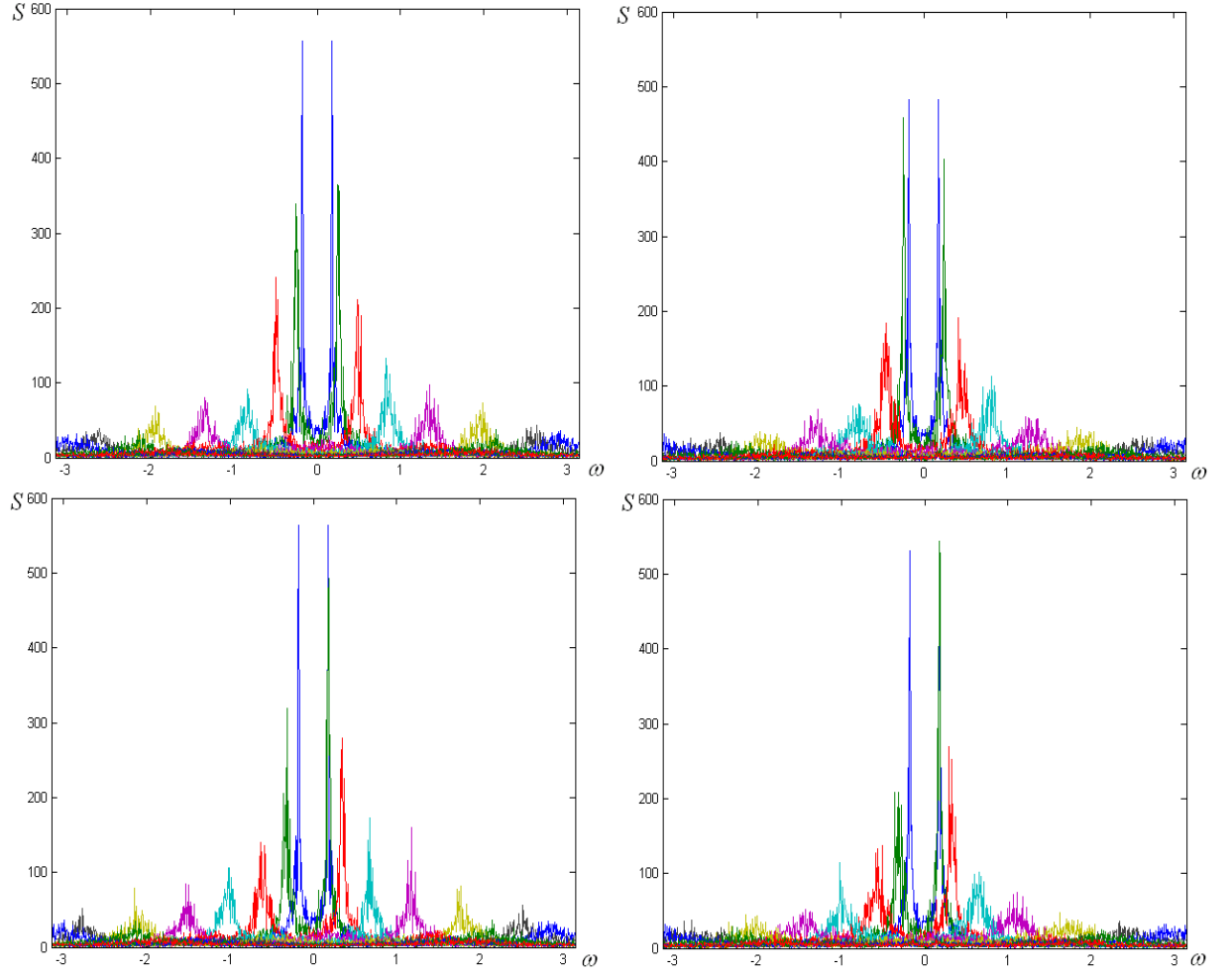
18. ábra. A kapott struktúrafaktor Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatással ($D = 0.1$) az y irányú hullám-szám, illetve a frekvencia függvényében ($J = -1$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$, $k_x = 0$), a piros pontok a lineáris közelítésből kapott spektrumot jelzik

Ezután elvégeztük a szimulációt úgy is, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás értékét $D = 0.1$ -re állítottuk. A spektrum itt a korábbi számolásnak megfelelően változott meg, a piros pontokkal ábrázolt függvény képlete $\omega = -4J(1 - \cos \frac{1}{2}ak_y) - 2D \sin ak_y - 2K_x$ az $\omega > 0$ ágra és $\omega = -(-4J(1 - \cos \frac{1}{2}ak_y) + 2D \sin ak_y - 2K_x)$ az $\omega < 0$ ágon. Mivel valós mennyiséget Fourier-transzformáltunk, a dinamikus struktúrafaktorra teljesül, hogy $S_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = S_\alpha^*(-\mathbf{k}, -\omega)$, azaz az abszolút érték négyzeteket tartalmazó S mennyiség esetén ezek egyenlők. A számoláshoz használt gyors Fourier-transzformációs eljárás eleve úgy van leprogramozva, hogy valós mennyiség átalakításakor nem számolja ki a transzformáltat a lehetséges értékek felénél, esetünkben a $k_y < 0$ esetekre, hiszen azok a többi értékből konjugálással megkaphatók. Azaz a fenti esetben az $\omega < 0$ értékek megfelelnek egy negatív k_y -nal számolt értéknek, ezért az elméleti képletben meg kellett fordítani a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatást tartalmazó tag előjelét, mert a sin-függvény előjelet vált erre a változtatásra. A második ábrán itt is a csúcsok relatív magassága figyelhető meg: a minimális pozitív hullámszámhoz tartozó magnon frekvenciája közel egyenlő a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnon frekvenciájával, így a csúcsok is nagyjából azonos magasságúak, míg a minimális negatív hullámszámú magnonhoz tartozó csúcs jóval alacsonyabb.



19. ábra. A kapott struktúrafaktor szintvonalas ábrái az y irányú hullámszám, illetve a frekvencia függvényében, ha transzverzális külső térrel gerjesztjük, melynek frekvenciája a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnonénak felel meg ($J = -1$, $\omega = 0.2$, $B_z = 0.01$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$, $k_x = 0$). A felső sorban lévő ábrák Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélküliek, az alsó sorban $D = 0.1$. A bal oldali oszlopban a rács szabályos, a jobb oldaliban 50 véletlenszerűen választott spin ki van nullázva.

A dinamikus struktúrafaktor akkor is számítható, ha nincs külső gerjesztés, hiszen a hőmérsékleti zaj maga is létrehoz magnonokat. De az előző szimulációkkal való összevetés érdekében elvégeztük a szimulációt úgy is, hogy a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnon frekvenciájának megfelelő, kis amplitúdójú külső mágneses térrel gerjesztettük a rendszert. A kis amplitúdóra azért volt szükség, mert a tér a ferromágneses beállást jellemző x irányra merőleges, z irányú volt, és így lehetett elérni, hogy a rendszer az alapállapot közelében maradjon. Ugyanakkor a ferromágneses iránnyal párhuzamos külső teret nem kapcsolunk be, így itt nem a rezonanciát vizsgáltuk, hanem azt, hogy egy periodikusan változó, ám $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztés milyen változást hoz létre a rendszerben. Az ábrákon jól látszik, hogy szabályos rácsban ez csak a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnonokat tudja gerjeszteni, viszont ha a rácsból néhány atomot eltávolítottunk, a diszkrét translációs invariancia megszűnik, ezért a rendszerben nem marad meg a kváziimpulzus, minden hullámszámon gerjesztődni fognak az $\omega = 0.2$ frekvenciájú magnonok, ezt jelzik a jobb oldali ábrákon látható függőleges vonalak. Ugyanakkor az is látszik, hogy nem szabályos rács esetén is még beszélhetünk magnonspektrumról, mert bár a görbék kiszélesedtek, azok alakja továbbra is rendkívül hasonló az ideális rács esetén tapasztaltnak.



20. ábra. A kapott struktúrafaktor a frekvencia függvényében (a különböző k_y hullámszámok más színnel jelölve), ha transzverzális külső térrel gerjesztjük, melynek frekvenciája a $\mathbf{0}$ hullámszámú magnonénak felel meg ($J = -1$, $\omega = 0.2$, $B_z = 0.01$, $\alpha = 0.05$, $T = 0.01$, $K_x = -0.1$, $k_x = 0$). A felső sorban lévő ábrák Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás nélküliek, az alsó sorban $D = 0.1$. A bal oldali oszlopban a rács szabályos, a jobb oldaliban 50 spin véletlenszerűen ki van nullázva.

Ezek az ábrák is az előző oldalon tárgyalt szimulációkhoz tartoznak, csak ezek esetében jobban látható, hogy nem szabályos rács esetén is megjelennek csúcsok a struktúrafaktorban, a helyük is lényegében megegyezik a szabályos rács esetén mérhetővel, azonban ki is szélesednek.

6. Összefoglalás

A dolgozat 2. fejezetében ismertettük a véges hőmérsékletű atomi spindinamika elméleti alapjait. Ezután rátértünk a vizsgálat alapmodelljére, amely egy nem mágneses wolfrám szubsztrát (110) Miller-indexű felületén található egy atom vastagságú vas vékonyréteg. Ez egy olyan szerkezet, melyben relativisztikus hatások következtében kialakul Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás az alapvető, skalár Heisenberg-moddal leírható ferromágneses csatolás és a spinek mint mágneses dipólusok között fellépő, klasszikus eredetű kölcsönhatás mellett. A dolgozat fő célja az volt, hogy megvizsgáljuk elsősorban a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás, másodsorban a dipól-dipól-kölcsönhatás miatt fellépő változásokat, amelyek az elméleti úton számítható magnonspektrumban, illetve a szimulációs eredményekben jelennek meg. Ezután a 3. fejezetben a spindinamikai szimulációs programot mutattuk be.

A 4. fejezetben a Landau-Lifshic-Gilbert-egyenletet vizsgáltuk a ferromágneses alapállapot közelében. Ekkor csillapítás, illetve hőmérsékleti zaj nélkül ez új változók bevezetésével a Hamilton-féle kanonikus egyenletekhez hasonló alakra hozható, amely ráadásul lineáris is lesz a változóiban. Az ehhez tartozó, változóiban kvadratikusan Hamilton-függvényt kvantálva eljutottunk a magnonspektrum kiszámításához. Megállapítottuk, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következtében a $\mathbf{k}$ és $-\mathbf{k}$ hullámszámú magnonok energiája eltérő lesz. Ezután visszatérve a klasszikus, de csillapítást és zajt is tartalmazó egyenletre megmutattuk, hogy ha a rendszert a ferromágneses irányra merőleges, kis amplitúdójú, időben periodikus mágneses térrel gerjesztjük, miközben a ferromágneses iránnyal párhuzamos, statikus mágneses tér amplitúdóját változtatjuk, akkor rezonanciaszerű viselkedést kapunk, de térben homogén gerjesztés esetén ez a görbealak nem függ sem a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatástól, sem a - perturbációként kezelt - szimmetrikus, nemdiagonális résztől a csatolási mátrixban, azaz a dipól-dipól-kölcsönhatástól. Kiszámoltuk, hogy véges hullámszámú gerjesztés esetén viszont az antiszimmetrikus csatolás jelentősen megváltoztatja a görbe alakját, illetve utaltunk rá, hogy az is változást hozhat létre, ha a rács szimmetriáját elrontjuk, például néhány atom eltávolításával.

Az 5. fejezetben a szimulációs eredményeket ismertettük. Ezek visszaadták az elméleti számolás eredményét, azaz szabályos rács esetén, $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztésnél csak a csatolási mátrix diagonális elemei határozzák meg a görbe alakját, míg véges hullámszámnál jól megfigyelhető a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás következménye. Ezután azt vizsgáltuk, milyen hatása van annak, ha lyukakat helyezünk el a rácsban, és megállapítottuk, hogy ekkor $\mathbf{0}$ hullámszámon is változás következik be, a Dzyaloshinsky-Moriya-kölcsönhatás miatt a rezonanciagörbe kiszélesedik. Végül néhány szimuláció során kiszámoltuk a dinamikus struktúrafaktort, melyből a teljes magnonspektrum is leolvasható. Azt is megvizsgáltuk, ebben az esetben milyen változásokat hoz létre, ha nem szabályos rácsot vizsgálunk: a diszkrét eltolási invariancia megszűnése miatt ekkor a $\mathbf{0}$ hullámszámú gerjesztés hatása a többi hullámszámon is megjelent.

Összességében ismertettünk egy elméleti módszert, mely mágnesesen rendezett rendszerek alapállapothoz közeli viselkedésének a szimulációk szerint megbízható leírását adja, valamint továbbfejlesztettük a szimulációhoz használt programot is. Az elméleti módszer általánosítható az általunk vizsgált vas vékonyrétegen kívül más rendszerekre is. Ezenkívül érdemes lehet a szimulációkat különböző hőmérsékleteken is elvégezni, ennek hatását is vizsgálva a rezonanciagörbék, illetve a dinamikus struktúrafaktor esetén fellépő csúcsok szélességére, alakjára.

Hivatkozások

- [1] L. Landau, E. Lifshitz, 1935, *Physikalische Zeitung der Sowjetunion*, **8**, 153
- [2] T. L. Gilbert, PhD disszertáció, Illinois Institute of Technology, 1956
- [3] W. Scholz, J. Fidler, D. Süss, T. Schrefl: Langevin Dynamics of Small Ferromagnetic Particles and Wires, 2000 (előadás a 16. IMACS világtalálkozón, Lausanne)
- [4] B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordström, O. Eriksson: A method for atomistic spin dynamics simulations: implementation and examples, 2008, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **20**, 315203
- [5] R. W. Damon, J. R. Eschbach, 1961, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **19**, 308
- [6] R. Arias, D. L. Mills: Extrinsic contributions to the ferromagnetic resonance response of ultrathin films, 1999, *Physical Review B*, **60**, 7395
- [7] R. N. Costa Filho, M. G. Cottam, G. A. Farias: Microscopic theory of dipole-exchange spin waves in ferromagnetic films: Linear and nonlinear processes, 2000, *Physical Review B*, **62**, 6545
- [8] I. Dzyaloshinsky, 1958, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **4**, 241
- [9] T. Moriya: New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction, 1960, *Physical Review Letters*, **4**, 228
- [10] A. Crépieux, C. Lacroix: Dzyaloshinsky-Moriya interactions induced by symmetry breaking at a surface, 1998, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **182**, 341
- [11] E. Y. Vedmedenko, L. Udvardi, P. Weinberger, R. Wiesendanger: Chiral magnetic ordering in two-dimensional ferromagnets with competing Dzyaloshinsky-Moriya interactions, 2007, *Physical Review B*, **75**, 104431
- [12] L. Udvardi, L. Szunyogh, K. Palotás, P. Weinberger: First-principles relativistic study of spin waves in thin magnetic films, 2003, *Physical Review B*, **68**, 104436
- [13] Kh. Zakeri, Y. Zhang, J. Prokop, T.-H. Chuang, N. Sakr, W. X. Tang, J. Kirschner: Asymmetric Spin-Wave Dispersion on Fe(110): Direct Evidence of the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction, 2010, *Physical Review Letters*, **104**, 137203
- [14] V. P. Antropov, M. I. Katsnelson, B. N. Harmon, M. van Schilfgaarde, D. Kusnezov: Spin dynamics in magnets: Equation of motion and finite temperature effects, 1996, *Physical Review B*, **54**, 1019
- [15] S. V. Halilov, H. Eschrig, A. Y. Perlov, P. M. Oppeneer: Adiabatic spin dynamics from spin-density-functional theory: Application to Fe, Co, and Ni, 1998, *Physical Review B*, **58**, 293
- [16] W. Scholz: Micromagnetic Simulation of Thermally Activated Switching in Fine Particles, 1999, Bács (diplomamunka)
- [17] J. L. García-Palacios, E. Platen: Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles, 1998, *Physical Review B*, **58**, 14937
- [18] L. C. Evans: An Introduction to Stochastic Differential Equations <http://math.berkeley.edu/~evans/SDE.course.dvi> (egyetemi jegyzet)
- [19] J. H. Mentink, M. V. Tretyakov, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, Th. Rasing: Stable and fast semi-implicit integration of the stochastic Landau-Lifshitz equation, 2010, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **22**, 176001
- [20] Kun Chen, D. P. Landau: Spin-dynamics study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet, 1994, *Physical Review B*, **49**, 3266
- [21] A. J. Kinderman, J. F. Monahan: Computer Generation of Random Variables Using the Ratio of Uniform Deviates, 1977, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **3**, 257