

TDK DOLGOZAT

Skyrmionok elméleti vizsgálata
mágneses vékonyrétegben

Török Mátyás

BME TTK Fizika BSc II. évfolyam

Konzulens: Dr. Udvardi László
Tudományos főmunkatárs
BME Elméleti Fizika Tanszék

2023

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
1.1. Motiváció	2
1.2. Mágneses skyrmionok	2
2. Modell	4
3. Nemlineáris konjugált gradiens módszer	4
3.1. Működés $\mathbb{R}^n$ -ben	5
3.2. Működés $\mathbb{R}^2$ direkt szorzataira	6
3.3. A program	6
3.3.1. A forgatónyomaték kiszámolása	7
3.3.2. Az energia paraméter szerinti deriváltjának meghatá- rozása	9
3.3.3. Áttekintés	9
4. Eredmények	10
4.1. Skyrmion sugara	10
4.2. Skyrmion-skyrmion kölcsönhatás	14
5. Kitekintés	18

1. Bevezetés

1.1. Motiváció

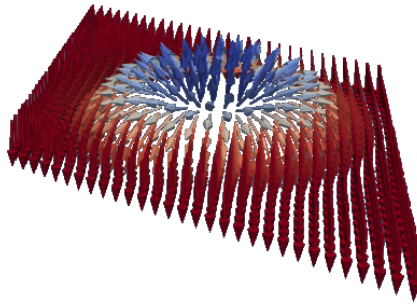
A mágneses anyagok, azon belül is a skyrmionok tanulmányozása korunk egyik intenzíven kutatott, dinamikusan fejlődő területe. A skyrmionok síkbeli spinrácsra megfigyelhető topológiailag védett, örvényszerű mágneses struktúrák. Mágneses skyrmionokat először B20 szerkezetű MnSi tömbi anyagban mutattak ki [6], majd számos más rendszerben is találtak hasonló mágneses szerkezeteket [15]. A nagy érdeklődés a mágneses skyrmionok iránt azzal magyarázható, hogy megfelelő információhordozónak ígérkeznek a jövőbeli nagy sebességű, energiahatékony spintronikai eszközökben [16]. Kutatásom célja az ilyen eszközök szimulálásának megkönnyítése és felgyorsítása.

1.2. Mágneses skyrmionok

A Skyrmion fogalmat először Tony Skyrme vezette be magfizikában az 1960-as években[13]: A Skyrmionok esetében definiálhatunk egy topológiai töltést, amely változatlan marad a tér folytonos deformációjával szemben, vagyis ezek az állapotok topológiailag védettek. Bár a Skyrmionokat magfizikában használták először, a fogalom hasznosnak bizonyult a szilárdtestfizika olyan területein is mint a kvantum Hall effektus[14], folyadékkristályok[?] és a Bose kondenzáció[4]. Elméleti megfontolások megmutatták, hogy a Dzyaloshinsky-Moriya (DM) kölcsönhatás[1, 5] és a csatolások frusztráltsága stabilizálhat topológiailag védett állapotokat mágneses rendszerekben is[10]. A mágneses Skyrmionok mangánszilicidben való első kísérleti kimutatása óta[6] számos más anyagban is sikerült hasonló struktúrákat találni[15]. Régóta ismert tény, hogy a nem mágneses hordozóra felvitt mágneses vékonyrétegek esetén kiemelt fontosságú a DM kölcsönhatás. Ennek köszönhetően stabilizálódhat a spin-spirál alapállapot, amely külső tér jelenlétében átalakulhat Skyrmion ráccsá. A legismertebb vékonyréteg, amelyben Skyrmion rácsot sikerült detektálni spin-polarizált pásztázó alagút mikroszkópiával az irídium (111) felületére felvitt vas-palládium kettősréteg[8]. Elméleti módszerekkel felderítették azt a hőmérséklet és külső mágneses tér tartományt[11], ahol skyrmion rács létezhet ebben a vékonyrétegben. Spindinamika szimulációkkal vizsgálták a skyrmionok kialakulásának különböző feltételeit[12]. A skyrmionok topológiai védettsége lehetővé teszi, hogy kvázirészecskéként tekintsünk rájuk. Szimulációkkal feltérképezték a kvázirészecskék szabadenergiájának és entrópiájának hőmérséklet függését ebben a kettősrétegben.

Dolgozatomban PdFe/Ir(111) rendszerben kialakuló Skyrmionok energia viszonyait vizsgálom elméleti módszerekkel. A PdFe/Ir(111) rétegben ki-

alakuló skyrmionok körszimmetrikusak, a középső - az alakzatot körülvevő ferromágneses tartományhoz képest ellentétes irányú - spintől távolodva a spinek egy, a skyrmionra jellemző irány mentén egyre jobban elfordulnak. Az átfordulás irányától és azok számától függően beszélünk különböző típusú és topológiai töltésű skyrmionokról. Dolgozatomban $Q = -1$ topológiai töltésű, Neel típusú skyrmionokat tárgyalok, mely esetben a spinvektoroknak csak függőleges és sugárirányú komponense van. A spinvektor pontosan egy fordulatot tesz, a sugárirányú komponens pedig kifelé mutat 1 ábra.



1. ábra. $Q=-1$ topológiai töltésű, Neel típusú skyrmion formája

A skyrmionok topológiai stabilitása függ a külső mágneses tér és a hőmérséklet nagyságától. Abszolút nulla hőmérsékleten három, egymástól jól elkülöníthető régió jelenik meg. Kis mágneses tér esetén spinspirál állapot alakul ki, ilyenkor adott irányú, párhuzamos egyenesek mentén azonos irányúak a spinek, az egyenesre merőlegesen pedig egyenletesen forognak. Nagy mágneses tér esetén ferromágneses állapotot figyelhetünk meg, azaz minden spin azonos irányba mutat. A kettő között (kb 1.3-3.1 T esetén) skyrmion rács állapotot látunk [11], így ebben a tartományban tudtam vizsgálni őket.

A dolgozat **Modell** fejezetében bemutatom a kutatásom során a szimulációkhoz és kiértékelésekhez használt modellt. A **Nemlineáris konjugált gradiens módszer** fejezetben ismertetem a módszert, amelyet egy konfiguráció lokális energiaminimumának meghatározására használtam, leírom a szükséges változtatásokat ahhoz, hogy az algoritmus spinrácsokra is működhessen. Illetve vázoló a módszer alapján dolgozó program működését, főbb elemeit és levezetem a fonos egyenleteket, melyeket használ. A **Eredmények** fejezetben prezentálom az eredményeket. Megvizsgáltam a skyrmionok formáját, a sugarukat a külső mágneses tér függvényében és a kölcsönhatási energiát két skyrmion távolságának függvényében. A **Kitekintés** fejezetben ismertetem a következő célt a kutatásomban, egy Monte carlo típusú szimuláció készítését a kölcsönhatási energia felhasználásával.

Rácsvektor hossza	0.27 nm
Vas mágnesezettség	$3 \mu_B$
palládium szaturációs mágnesezettség	$0.3\mu_B$

2. ábra. A szimuláció paraméterei

2. Modell

Dolgozatomban Ir (111) rétegre párologtatott PdFe kettősrétegben kialakuló skyrmionokat vizsgálok elméleti úton. A rendszert síkbeli rácssal modellezem, melynek minden pontjában egy klasszikus spint helyezek el. A rendszer energiáját egy kiterjesztett Heisenberg modell írja le.

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \mathbf{s}_i \mathbf{J}_{ij} \mathbf{s}_j - \sum_i \lambda (\mathbf{s}_i \mathbf{k})^2 - \sum_i \mathbf{B} \mathbf{s}_i \quad (1)$$

Ahol $\mathbf{s}_i$ az i -edik rácsponton lévő spinvektor, $\mathbf{J}$ a csatolási mátrix, λ az anizotrópia konstans, $\mathbf{B}$ a külső mágneses tér és $\mathbf{k}$ pedig a z irányú egységvektor.

A szimulációkat abszolút nulla hőmérsékleten végzem, a rendszer paramétereit első elvekből határozták meg [11], (2. táblázat). A csatolásokat 8 rácspontnyi távolságra veszem figyelembe. A csatolások figyelembevételkor periodikus határfeltétellel számoltam, mindkét rácsvektor irányában. A modell túlbonyolításának elkerülése végett a Palládium réteg mágnesezettségét nem veszem figyelembe, abszolút nulla hőmérsékleten számolok. A dolgozat során végig háromszögrácssal dolgoztam. A rácsvektorok az $a_1 = (1, 0) \cdot \lambda$ és $a_2 = (0.5, 0.866) \cdot \lambda$ vektorok, ahol $\lambda = 0.271458 \text{ nm}$. A szimulációknál az egyszerűség kedvéért egységvektorokkal számoltam, csak az eredményeket számoltam át nm -be.

3. Nemlineáris konjugált gradiens módszer

A skyrmion pontos spin konfigurációjának meghatározásához szükségem volt egy algoritmusra, mely megtalálja egy kiindulási konfigurációhoz tartozó lokális energiaminimumot. Tudjuk, hogy a skyrmion mintázat lokális energiaminimum, így a legegyszerűbb egy, a skyrmiont jó közelítő mintázat energiaminimumát megkeresni. A minimumkereséshez rendelkezésemre állt egy, a Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet alapján számoló kód, mely a spinek mozgását szimulálja az idő múlásával. Ez azonban túl lassúnak bizonyult, így írtam egy, a nemlineáris konjugált gradiens módszeren alapuló programot. A következő alfejezetekben ennek elméleti működését mutatom be.

3.1. Működés $\mathbb{R}^n$ -ben

A nemlineáris konjugált gradiens módszer egy n változós kvadratikus függvény lokális minimumának megkeresésére szolgál. Az algoritmus a következő lépéseket ismétli:

1. A gradiens kiszámolása a kezdőpozícióban
2. Az új keresési irány meghatározása
3. Minimumkeresés az irány mentén
4. Kezdőpozíció frissítése

Legyen a függvényünk $f(x)$, ahol x egy n komponensű vektor. A gradiens meghatározása az i . iterációban az összes változó szerinti deriváltak kiszámolásával történik az adott pontban $g(i) = -\nabla f(x_i)$. A minimumkeresés az első iterációban a negatív gradiens által meghatározott irányban történik. Ezt követően az új keresési irány meghatározásához figyelembe vesszük az előző ($i-1$. iterációban) használt irányt is $p_i = g_i + \beta_i^{PR} p_{i-1}$. Ahol β_i egy, az i . iterációra jellemző együttható, ez határozza meg az előző irány járulékát. β_i -t a legegyszerűbben a következő képlet alapján számolhatjuk (g_i az i -edik iterációban a gradiens):

$$\beta_i = \frac{g_i^2}{g_{i-1}^2} \quad (2)$$

A lineáris módszerben ekvivalensek a következő keresési irányt meghatározó kifejezések, nemlineáris esetben azonban ezek különböző eredményt adnak. A különböző képletek közül a legeffektívebbet elméleti úton még nem határozták meg. Én a Polak és Ribière által javasolt kifejezést választottam[7]:

$$\beta_i^{PR} = \frac{g_i(g_i - g_{i-1})}{g_{i-1}^2} \quad (3)$$

A minimum helyét az ily módon irányban történő lineáris kereséssel határozzuk meg $\alpha_i = \arg \min_{\alpha} f(x_i + \alpha \cdot s_i)$. Az új kezdőpozíció pedig természetesen a minimum helyének következő becslése lesz $x_{i+1} = x_i + \alpha_i \cdot s_i$. Az algoritmust addig ismétljük, amíg az megfelelő pontossággal meg nem adja a lokális energiaminimum helyét [3].

3.2. Működés $\mathbb{R}^2$ direkt szorzataira

A nemlineáris konjugált gradiens módszert már használták mikromágneses szimulációkban[2]. Én azonban egy új megközelítést használtam, mely a problémát az előző fejezetben leírtakhoz hasonlóan egy lineáris keresésre redukálja minden iterációban. A módszert úgy kellett átalakítanom, hogy egy síkbeli spinrácsra tudja megtalálni egy konfigurációhoz tartozó lokális minimumot. Ha a függvény paramétereinek a spinek komponenseit választjuk, a spinvektorok hosszára nincs korlátozás, így nem maradnak egységvektorok.

Ennek kiküszöbölésére egy általános negatív gradiens helyett minden rácsponthoz hozzárendelek egy forgatónyomatékvektort. Legyen most az iteráció száma k . Az i . rácsponton lévő $\boldsymbol{\tau}_{ki}$ forgatónyomatékvektor meghatározza az irányt, amerre a lokális tér forgatná a spinvektort, hossza pedig a forgatás erősségét reprezentálja. Az első irány meghatározása az i . rácsponton az $\mathbb{R}^n$ -beli módszerrel analóg módon történik, $\mathbf{p}_{ki} = \boldsymbol{\tau}_{ki}$ a k . iterációban. A következő iterációkban azonban nincs minden spinhez külön β paraméter. A k . iterációban egy általános β_k -t definiálunk, a Polak-Ribière együttható $\mathbb{R}^2$ direkt szorzataira általánosítva:

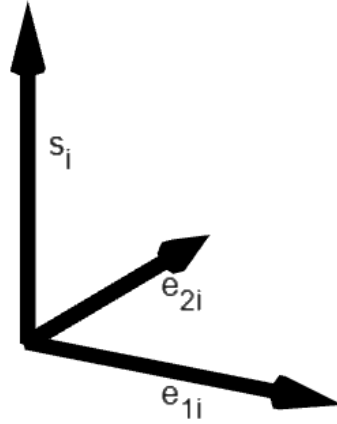
$$\beta_k^{PR} = \sum_i \frac{g_{k,i}(g_{k,i} - g_{k-1,i})}{g_{k-1,i}^2} \quad (4)$$

Az új irány az i . rácsponton: $\mathbf{p}_{ki} = \boldsymbol{\tau}_{ki} + \beta_j^{PR} p_{k-1,i}$. A minimumkereséshez ismét definiálunk egy α_k paramétert, ami ebben az esetben is általános lesz. Az i . rácsponton a spint $\theta_{ki} = |\boldsymbol{\tau}_{ki}| \alpha_k$ szöggel forgatjuk, ez adja az energia α függését. Ezt az immár lineáris függvényt minimalizálva megkapjuk a következő becslést a lokális energiaminimumra. A minimumot az $f(\alpha)_k = dE/d\alpha_k$ függvény zérushelyének megkeresésével kapom. Az iterációt addig folytatjuk, amíg a forgatónyomaték minden rácsponton kisebb nem lesz, mint egy előre definiált érték.

3.3. A program

A programot C programozási nyelvben írtam. A paraméterek és konfiguráció beolvasását egy meglévő kódból vettem át. Az így kapott elrendeződést a program egy struktúrában tárolja, melyek többek között tartalmaznak egy spint és négy pointert, mely ugyanilyen, a szomszédos spinvektorokat tartalmazó struktúrákra mutatnak.

Ezt a struktúrát veszik át és használják az általam írt függvények. A legkülső függvény a solver, ez tartalmazza a fő ciklust, mely minden iterációban kiszámolja a következő becslést az energiaminimumra. Ez meghívja a torque függvényt, ami a rácspontokban a forgatónyomaték vektor meghatározásáért



3. ábra. Az $(\mathbf{s}_i, \mathbf{e}_{1i}, \mathbf{e}_{2i})$ jobb sodrású koordinátarendszer. A vektorok mind merőlegesek egymásra, $\mathbf{e}_{1i}$ és $\mathbf{e}_{2i}$ egység hosszú.

felel. Az így kapott forgatási irányokkal a solver meghívja a minimizer rutint. Ez a spineket kis léptékben forgatja, minden lépésben kiszámolva az energia deriváltját a forgatás mértékét meghatározó paraméter szerint. A következő becslés a lokális energiaminimumra ott lesz, ahol ez az érték előjelet vált. Ezt követően a solver befordítja a spineket az új helyzetükbe. A ciklus addig ismétlődik, amíg az energia vagy az iterációk száma el nem ér egy, a felhasználó által meghatározott küszöbértéket. Ezt követően a konfigurációt a main függvény kiírja egy fájlba.

3.3.1. A forgatónyomaték kiszámolása

A következő két alfejezetben végig a k . iteráció számolásait írom le, az indexet elhagyom. A forgatónyomaték vektort szeretnénk meghatározni az összes rácspontban, mely az irányt határozza meg, amely mentén a spint elforgatva alacsonyabb energiájú állapotba jut a konfiguráció. Ennek meghatározásához minden spinhez hozzárendelünk két segédvektort, melyek egymásra és az adott spinre is merőlegesek, valamint a $(\mathbf{s}_i, \mathbf{e}_{1i}, \mathbf{e}_{2i})$ jobb sodrású rendszert alkot, ahol a $\mathbf{s}_i$ spinvektor, $\mathbf{e}_{1i}$ és $\mathbf{e}_{2i}$ a két egység hosszú segédvektor az i -edik rácsponton (3 ábra).

Vizsgáljunk egy infinitezimálisan kicsi elfordulást, ekkor a forgatónyomaték vektor $(\boldsymbol{\tau}_i)$ a spinre merőleges síkban lesz, azaz kifejezhető $\mathbf{e}_{1i}$ és $\mathbf{e}_{2i}$ egy lineárkombinációjaként. Legyen φ_{1i} és φ_{2i} a megfelelő egységvektor irányá-

ban történő elfordulás. Ekkor az egységvektorok együttthatói az energia (E) megfelelő elfordulás szerinti deriváltjainak összege, hiszen az energia potenciális.

$$\boldsymbol{\tau}_i = \frac{\partial E}{\partial \varphi_{1i}} \mathbf{e}_{1i} + \frac{\partial E}{\partial \varphi_{2i}} \mathbf{e}_{2i} \quad (5)$$

Tekintsünk a spinvektorokra, mint a két elforgatás függvényére ($\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_i(\varphi_{1i}, \varphi_{2i})$). Ekkora láncszabály értelmében:

$$\boldsymbol{\tau}_i = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{s}_i} \frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial \varphi_{1i}} \mathbf{e}_{1i} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{s}_i} \frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial \varphi_{2i}} \mathbf{e}_{2i} \quad (6)$$

Legyen $\mathbf{H}_i$ az energia i -edik spinvektor szerinti parciális deriváltja, ez könnyen meghatározható a 1. egyenletből.

$$\mathbf{H}_i = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{s}_i} = - \sum_j \mathbf{J}_{ij} \mathbf{s}_j - 2\lambda(\mathbf{s}_i \mathbf{k}) \mathbf{k} - \mathbf{B} \quad (7)$$

A spinvektor szögelfordulás szerinti parciális deriváltját szintén egyszerűen kifejezhetjük.

$$\frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial \varphi_{1i}} = \mathbf{e}_{1i} \times \mathbf{s}_i \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial \varphi_{2i}} = \mathbf{e}_{2i} \times \mathbf{s}_i \quad (9)$$

Így a forgatónyomaték vektor:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_i &= \mathbf{e}_{1i}((\mathbf{e}_{2i} \times \mathbf{s}_i) \mathbf{H}_i) + \mathbf{e}_{2i}((\mathbf{e}_{1i} \times \mathbf{s}_i) \mathbf{H}_i) = \\ &= \mathbf{e}_{1i}(\mathbf{e}_{1i}(\mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i)) + \mathbf{e}_{2i}(\mathbf{e}_{2i}(\mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i)) = \\ &= (\mathbf{e}_{1i} \otimes \mathbf{e}_{1i} + \mathbf{e}_{2i} \otimes \mathbf{e}_{2i}) \mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i = \\ &= (\mathbf{e}_{1i} \otimes \mathbf{e}_{1i} + \mathbf{e}_{2i} \otimes \mathbf{e}_{2i} + \mathbf{s}_i \otimes \mathbf{s}_i) \mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i = \\ &= \mathbf{s}_i \times \mathbf{H}_i \end{aligned}$$

Behelyettesítve a 7 egyenletet tehát a forgatónyomaték vektor a 10 képlet alapján számolható, mely numerikusan is kiértékelhető.

$$\boldsymbol{\tau}_i = \mathbf{s}_i \times \left(- \sum_j \mathbf{J}_{ij} \mathbf{s}_j - 2\lambda(\mathbf{s}_i \mathbf{k}) \mathbf{k} - \mathbf{B} \right) \quad (10)$$

3.3.2. Az energia paraméter szerinti deriváltjának meghatározása

Tegyük fel, hogy a 10 egyenlet alapján a program kiszámolta a forgatónyomaték vektort, valamint a spinvektor $\theta_i = \alpha \cdot |\boldsymbol{\tau}_i|$ szöggel való elforgatottját $\boldsymbol{\tau}_i$ körül. Ekkor az energia α szerinti deriváltját kell meghatároznunk, ahol annak zérushelye van, ott lesz a következő becslés a minimumra (a **Model** fejezetben leírtak alapján). Legyen $\mathbf{s}'_i$ a θ szöggel elfordított spinvektor. Legyen a forgatónyomatékvektor iránya $\mathbf{n}$, azaz $\boldsymbol{\tau}_i = \mathbf{n}_i |\boldsymbol{\tau}_i|$.

$$\mathbf{s}'_i = [\mathbf{n}_i(\mathbf{n}_i \mathbf{s}_i) + (\mathbf{s}_i - \mathbf{n}_i \mathbf{s}_i) \cos(\theta) + \mathbf{n}_i \times \mathbf{s}_i \sin(\theta)] |\boldsymbol{\tau}_i| \quad (11)$$

Tekintsük most az elforotott spinvektort a paraméter függvényeként $\mathbf{s}'_i = \mathbf{s}'_i(\alpha)$. Ekkor

$$\frac{dE}{d\alpha} = \sum_i \frac{\partial E}{\partial \mathbf{s}'_i} \frac{\partial \mathbf{s}'_i}{\partial \alpha} \quad (12)$$

Az első tagot már meghatároztuk a 7 egyenlettel, a szorzat második tagját pedig a 12 egyenlet deriválásával kaphatjuk meg:

$$\frac{\partial \mathbf{s}'_i}{\partial \alpha} = [-(\mathbf{s}_i - \mathbf{n}_i \mathbf{s}_i) \sin(\theta) + \mathbf{n}_i \times \mathbf{s}_i \cos(\theta)] |\boldsymbol{\tau}_i| \quad (13)$$

Az energia α szerinti deriváltjának végleges, numerikusan számolható alakját a 14 egyenlet adja meg.

$$\frac{dE}{d\alpha} = \sum_i \left(- \sum_j \mathbf{J}_{ij} \mathbf{s}'_j - 2\lambda(\mathbf{s}'_i \mathbf{k}) \mathbf{k} - \mathbf{B} \right) [-(\mathbf{s}_i - \mathbf{n}_i \mathbf{s}_i) \sin(\theta) + \mathbf{n}_i \times \mathbf{s}_i \cos(\theta)] |\boldsymbol{\tau}_i| \quad (14)$$

3.3.3. Áttekintés

A program tehát a 10 egyenlet alapján számolja a forgatónyomaték vektort. Ezt követően olyan $\alpha = \alpha_0$ paramétert választ, amire a legnagyobb forgatónyomatékkal rendelkező spin is csak kb. 0.01 radiánt fordul. A 14 egyenlet alapján kiszámolja az energiának paraméter szerinti deriváltját α_0 lépésköznként. Az előjelváltás után a zérushelyet húrmódszerrel határozom meg. A program a várt hatékonysággal működik, gyorsabban konvergál a lokális energiaminimumba, mint egy szimulációs algoritmus.

A kódot később továbbfejlesztettem, hogy képes legyen kezelni a kezdőállapotban rögzített spineket. Azzal, hogy egy skyrmion középső spinjét rögzítjük, a pozícióját is fixáljuk, így tudunk például energiaviszonyokat vizsgálni két vagy több skyrmion között, hiszen különben az optimálás folyamán

eltávolodnának egymástól. A program így képes pozícióval vagy indexszel megadott spineket rögzíteni. Ezt azzal éri el, hogy a forgatónyomaték vektor kiszámolásánál figyelmen kívül hagyja ezeket a spineket, így nem forognak el.

4. Eredmények

Első lépésként meggyőződtem róla, hogy a program megfelelően működik, jól kezeli a határeseteket és azt a konfigurációt kapjuk lokális minimumnak, amit a Landau-Lifszitz-Gilbert egyenletet használó szimulációs algoritmus. Az eredményben nem tapasztaltam eltérést, azonban az új módszer érezhetően gyorsabban konvergált.

4.1. Skymion sugara

A működő programot először skymion optimálására használtam. Ez egy esszenciális lépés, hiszen máshogy nem kaphatunk elég pontos skymiont. Ezen kívül persze az is igazolja a helyes működést, ha a lokális minimumnak skymiont ad. A skymion spinvektorainak z koordinátáit egy Gauss-görbével közelítettem a középponttól vett távolság függvényében. Mivel Neel típusú skymionokat vizsgálok, az xy síkban lévő komponens kifelé kell, hogy mutasson. Ez természetesen nem pontos leírása egy skymionnak, azonban elég közel van hozzá, hogy a lokális energiaminimum a skymion legyen.

Ezt ellenőrizni viszonylag nehézkesnek bizonyult, hiszen a kód által generált fájlt kézzel kellett megnyitni egy kirajzoló programmal. Ennek leegyszerűsítésére a topológiai töltést vizsgálom. A topológiai töltés a spinvektorhármasok között kifeszített térszög összege minden hármasra, melyek által meghatározott háromszög nem tartalmaz másik spint és együtt lefedik a rácsot. A topológiai töltés számolásakor figyelembe kellett venni a periodikus határfeltételt, mely szerint a rács két szemközti oldala közötti háromszögek is adnak járulékot.

A topológiai töltést felhasználva egy rövid kód futtatásával ellenőrizni tudtam azt, hogy hány skymion található a rácson. A skymionok száma egyszerűen a topológiai töltés ellentettje, hiszen mindegyik $Q = -1$ topológiai töltésű.

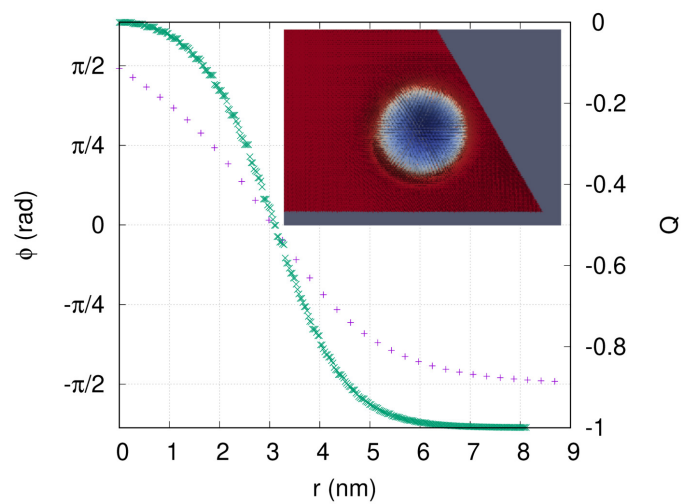
Több különböző külső mágneses tér mellett optimáltam skymionokat. A legszembetűnőbb különbség a mintázat mérete, minél nagyobb külső mágneses tér van jelen, annál inkább próbálja átfordítani a skymiont, annál kisebb sugárban láthatóak a ferromágneses iránytól különböző spinek. A skymion formájának részletesebb vizsgálatára újabb rövid kódot írtam, mely a prog-

ram által optimalt, már kellően pontos skyrmionon dolgozik. A kód a skyrmion közepétől vett adott sugáron belül írja ki a topológiai töltést (azokat a háromszögeket veszi csak figyelembe, melyek középpontja a körön belül van). Ezt az értéket a sugár függvényében ábrázolva egy képet kapunk a skyrmion formájáról. Később szükségem volt a spinvektorok alapsíkkal bezárt szögére a középponttól vett távolság függvényében ahhoz, hogy mérési eredményekkel végezzek összehasonlításokat. Ennek érdekében átalakítottam a kódot és különböző külső tér mellett optimalt skyrmionokon futtattam.

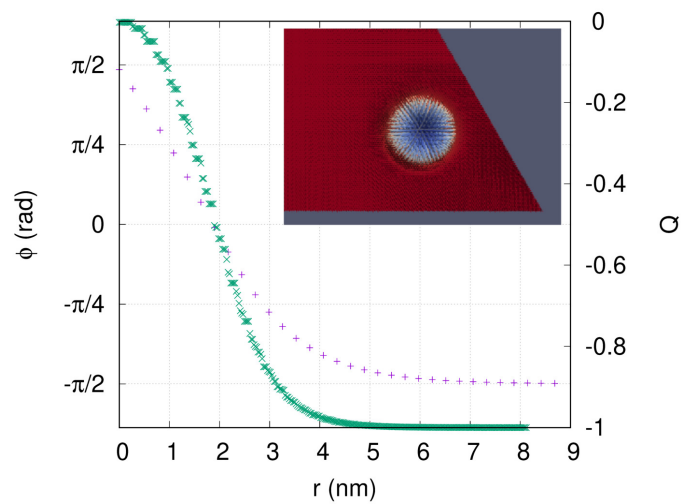
A 4. ábrán három különböző külső mágneses tér mellett láthatóak a skyrmion formai sajátosságai. A három értéket úgy választottam ki, hogy lényegesen különböző eredményt kapjak. A zöld görbe ábrázolja a topológiai töltést egy r sugarú körben. Természetesen nulla sugárral a topológiai töltés is nulla, a végtelenben pedig a skyrmion topológiai töltését kapjuk vissza, tehát a grafikon tart a -1 értékhez, ahogy a sugár tart a végtelenbe. A lila görbe a spinvektorok alapsíkkal bezárt szögét ábrázolja szintén a középponttól mért távolság függvényében. A spinvektorok a skyrmion közepén a síkra merőlegesen felfelé, körülötte nagyjából lefelé állnak, ezt mutatja a grafikon is. A két módon ábrázolt forma nagyon hasonló görbét eredményez bármely tér mellett. A kiszámolt értékek segítségével definiálni tudjuk egy skyrmion sugarát: legyen a sugár annak a távolságnak a kétszerese, amilyen messze a középponttól a spinvektorok vízszintesek. Ehhez csak le kell olvasnunk az értéket, ahol a zöld görbe 0 -t vesz fel. Mivel természetesen pontosan nullát egyik pontban sem vesz fel, két adatpont között a grafikont egyenessel közelítettem.

A legkisebb mágneses térnek $B_{ext} = 0.015 \text{ mRy} \approx 1.18 \text{ T}$ -t választottam, ez a spinspirál és a skyrmion állapotok közti átmenetben van, vagyis ez az egyik legkisebb érték, ahol már természetes módon is létrejöhetnek skyrmionok (4a. ábra). A skyrmion sugara $R_{15} = 6.14 \text{ nm}$. A legnagyobb külső tér értéke $B_{ext} = 0.045 \text{ mRy} \approx 3.53 \text{ T}$, ez az érték már a ferromágneses állapotban van, azonban a skyrmion még ilyenkor is metastabil állapot, az itt vizsgált skyrmionok jól reprezentálják a nagy mágneses tér mellett létrejövő skyrmionokat (4b. ábra). Ilyen tér mellett a sugár $R_{45} = 2.04 \text{ nm}$. A harmadik térnek egy közbülső értéket választottam, ahol a sugár nagyjából a kettő szélsőérték között félúton van. A tér nagysága $B_{ext} = 0.025 \text{ mRy} \approx 1.96 \text{ T}$. Ebben az esetben pedig $R_{25} = 3.75 \text{ nm}$ a sugár.

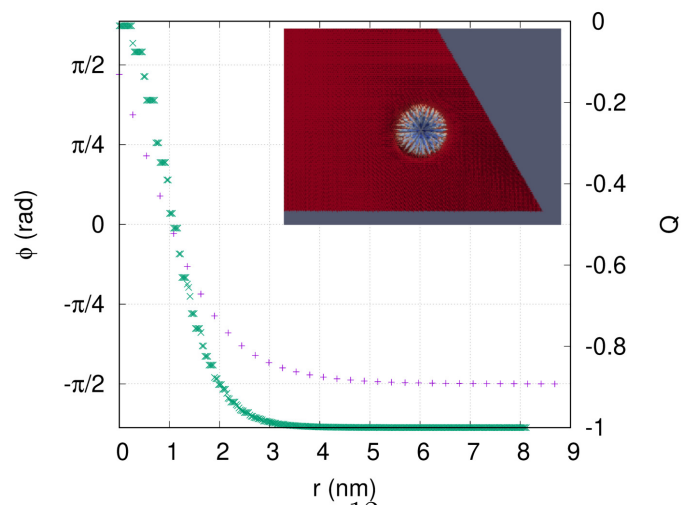
Az eredmények igazolják a sejtést, miszerint nagyobb tér mellett kisebbek a skyrmionok. A sugár térfüggését tüzetesebben is meg szerettem volna vizsgálni, ez jó lehetőséget kínált ellenőrzésre is. A [9] cikkben meghatározták a skyrmionok sugarát a külső tér függvényében kísérleti úton egy pásztázó alagútmikroszkóp (STM) segítségével. A spinvektorok szögét határozták meg a távolság függvényében, a sugárnak a vízszintes spinvektor távolságának



(a) $B_{ext} = 1.18 \text{ T}$

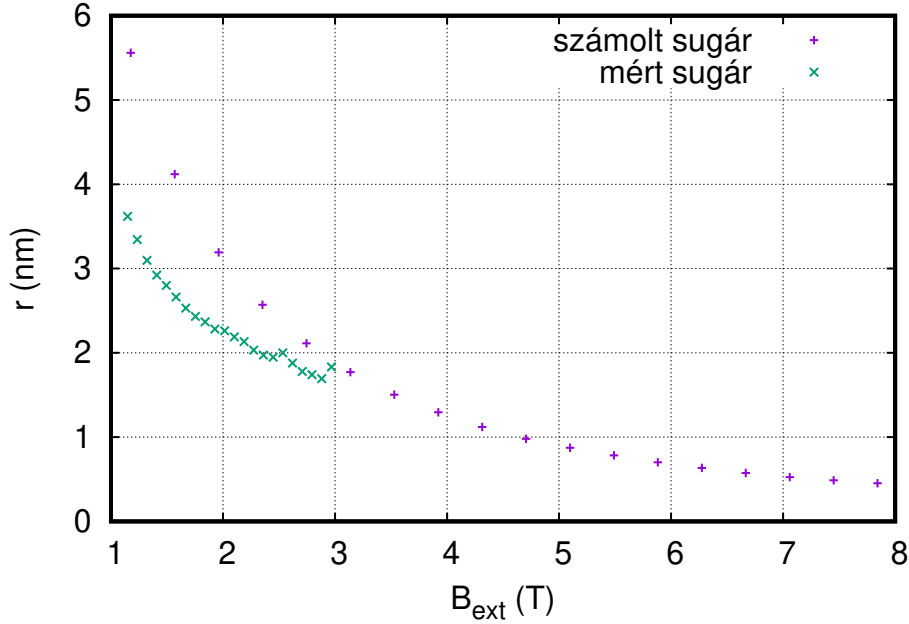


(b) $B_{ext} = 1.96 \text{ T}$



(c) $B_{ext} = 3.53 \text{ T}$

4. ábra. Egy skyrmion képe, illetve a topológiai töltés (lila) és a spinvektorok síkkal bezárt szöge (zöld) a középponttól mért távolság függvényében.



5. ábra. A skyrmion sugara a külső mágneses tér függvényében a programmal számolva elméleti úton (lila), illetve pásztázó alagútmikroszkóppal mérve [9] (zöld)

kétszeresét vették.

A program helyes működését igazolandó összevettem a kísérleti és elméleti úton kapott eredményeket. Ennek elérésére egy skriptet írtam, mely $B_0 = 0.01 \text{ mRy} \approx 0.78 \text{ T}$ -tól $B_{\text{max}} = 0.1 \text{ mRy} \approx 7.8 \text{ T}$ -ig $B_{\text{step}} = 0.05 \text{ mRy} \approx 0.39 \text{ T}$ lépésközzel minden külső tér értékre optimált egy skyrmiont, majd kiszámolta a sugarát. A 5. ábra mutatja sugarat a külső tér függvényében elméleti úton a programmal számolva (lila), valamint az STM-mel mérve (zöld). A két grafikon között nincs nagy eltérés, a modell viszonylag jól visszaadja a kísérleti úton kapott eredményeket. Az eltérés származhat az STM pontatlanságából, illetve hibát okozhat, hogy nem veszem figyelembe a palládium szaturációs mágnesezettségét.

Érdeemes megfigyelni, hogy amíg természetes módon csak nagyjából $1 \text{ T} - 3 \text{ T}$ -ig jöhetnek létre skyrmionok (így az STM csak itt tud mérni), a skyrmion mintázat nagy külső terek mellett is lokális energiaminimumot jelent, azaz stabil marad. Természetesen kis tereknél a sugár olyan nagy lenne, hogy a skyrmion az optimálásra használt teljes rácsot betérítené, illetve valószínűleg nagyobb sugárban kellene figyelembe venni a csatolásokat is.

$B_{ext}(T)$	$E_{ferro}(mRy)$	$E_{skyr}(mRy)$	$E_{ferro} - E_{skyr}(mRy)$
1.18	-510628.88	-510630.94	-2.06
1.96	-511528.92	-511523.76	5.14
3.53	-513328.92	-513318.07	10.85

6. ábra. A ferromágneses és egy skyrmiont tartalmazó konfiguráció energiája különböző külső mágneses terek mellett. Az utolsó oszlop ezek különbségét mutatja, ez a skyrmion energiája a ferromágneseshez képest.

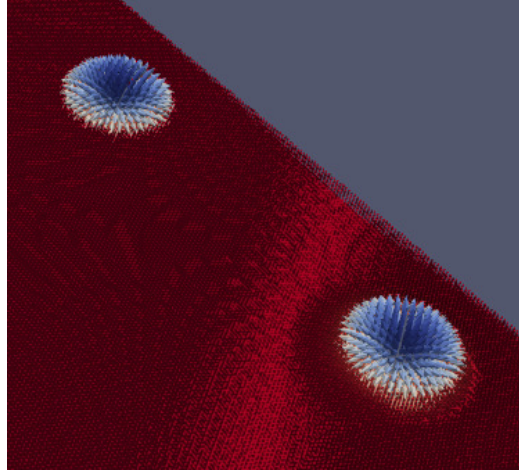
4.2. Skyrmion-skyrmion kölcsönhatás

Következő lépésként a skyrmionok energetikáját vizsgáltam. A 1 egyenletből könnyen kiszámolható az energia. Azzal kezdtem, hogy egyszerűbb konfigurációk energiáját számoltam. A 6 táblázat tartalmazza a ferromágneses és egy skyrmiont tartalmazó spinrácsok energiáját az eddig használt három külső mágneses tér mellett. Az utolsó oszlopban pedig a két érték különbsége szerepel, melyet a skyrmion energiájaként definiálhatunk. Az energiák negatívak, hiszen a 1 egyenletben minden tag negatív előjellel szerepel, a nullérték megválasztása eredményezi.

A célom az volt, hogy meghatározzam két skyrmion közti kölcsönhatási energiát. Egy rövid kód segítségével lemásoltam egy rácson a skyrmiont egy adott távolsággal az egyik rácsvektor mentén elcsúsztatva (7 ábra), az így kapott konfigurációt optimáltam, miközben a két skyrmion központi spinjét lefixáltam, hogy ne tudjanak egymáshoz képest elmozdulni. Az így kapott energiaértékből kivontam kétszer az előbb meghatározott skyrmion energiáját, valamint a ferromágneses állapot energiáját is, így megkaptam a kölcsönhatási energiát. A folyamatot egy skript segítségével automatizáltam, és több külső mágneses tér mellett lefuttattam. A kölcsönhatási energiát ábrázoltam is a három jól ismert tér mellett, ezt mutatja a 8 ábra.

Minden külső tér esetén az első futtatásban $d_0 = 2.71 \text{ nm}$ volt a távolság a két skyrmion közepe között. A lépésköz ennek a fele, $d_{step} = 1.96 \text{ nm}$, a maximális távolság pedig $d_{max} = 29.86 \text{ nm}$ volt. A három tér közül azonban csak a legnagyobb mellett tudtam meghatározni a d_0 távolsághoz tartozó energiát, mivel a többi esetben olyan nagy a skyrmionok sugara, hogy összeolvadnak, a két fixált spin miatt egy ovális skyrmiont kapunk (9. ábra). Az összeolvadt skyrmiont a topológiai töltés segítségével lehet tetten érni, hiszen a két skyrmion $Q = -2$ -es töltés helyett csak $Q' = -1$ -et kapunk. Természetesen csak a két skyrmionból álló konfigurációk adnak érdemi eredményt, így az összeolvadtak energiáját nem ábrázolom.

A grafikonokon azt látjuk, hogy a skyrmionok között egy taszító kölcsönhatás áll fenn, megközelítőleg $1/r^2$ -es függést mutat. A kölcsönhatási



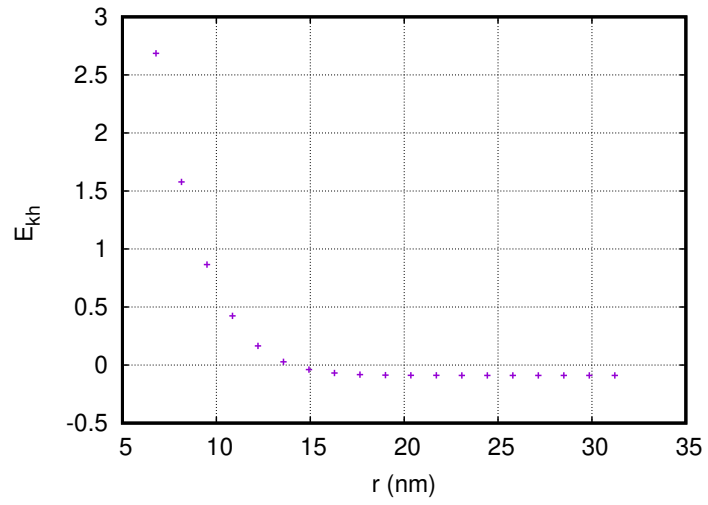
7. ábra. Két skyrmion elhelyezve a rácson ($B_{ext} = 1.18 \text{ T}$, $d = 27.1458 \text{ nm}$). Ez jelenti a kiinduló állapotot a kölcsönhatási energia kiszámolásához.

energiának természetesen nullába kell tartania, ahogy a távolság tart a végtelenbe, hiszen ekkor nincs hatással egymásra a két skyrmion. Az is látszik, hogy a kis távolságra lévő skyrmionoknak jelentősen el kell térniük az optimális alaktól, így ilyenkor nagyobb az energiájuk (10. ábra). Határesetben, ($d = 0$ -ban) pedig végtelen a kölcsönhatási energia, hiszen nem létezhet két azonos középpontú skyrmion.

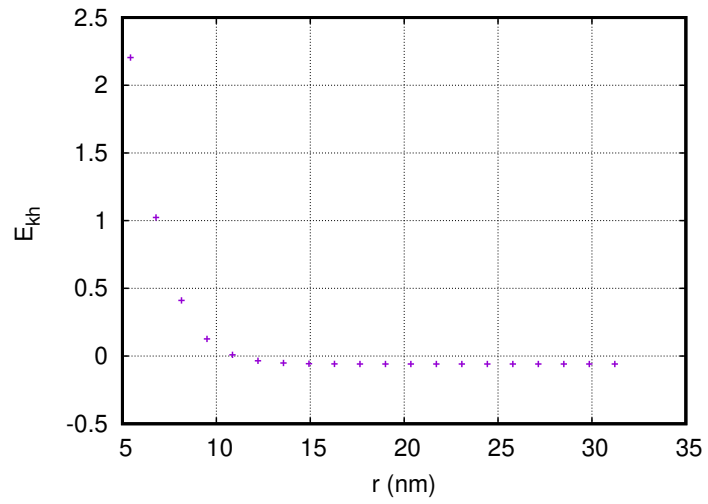
Tudjuk, hogy két végtelen távo lévő skyrmion nincs hatással egymásra, tehát azt várjuk, hogy a kölcsönhatási energia eltűnjön a végtelenben. Ezzel szemben látható, hogy a grafikon egy kis negatív értékhez tart. Ez annak köszönhető, hogy én a ferromágneses rács energiájához viszonyítottam minden más konfiguráció energiáját. Olyan viszonyítási értéket kell tehát választanunk, amivel a kölcsönhatási energia nullába konvergál, ahogy a skyrmionok távolsága a végtelenhez tart.

Miután sikerült a távolság függvényében feltérképezni a kölcsönhatási energiát, felmerült a kérdés, hogy az egyik rácsvektorral bezárt szögtől függ-e. Első ránézésre azt mondanánk, hogy nem függ, hiszen a skyrmionok körszimmetrikusak, azonban figyelembe kell vennünk, hogy a spinrács kis távolságok esetén nem tekinthető folytonosnak, a rács geometriája miatt a skyrmionok valójában $\theta = \pi/3$ szöggel forgásszimmetrikusak, így ezen θ szögön belül tapasztalhatunk különbségeket. Ettől függetlenül kicsiny eltérésekre számíthatunk, de meg kell vizsgálni, hogy elhanyagolhatjuk-e a szögfüggést.

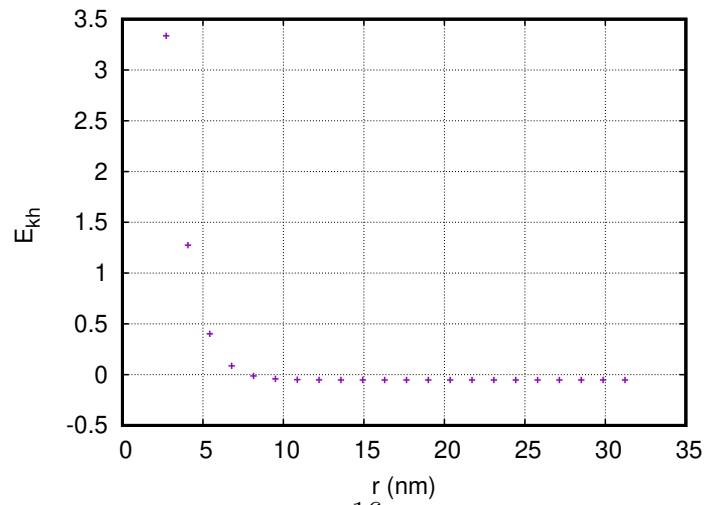
A szögfüggés meghatározásához átírtam a kölcsönhatási energia meghatározására használt skriptet, hogy egy fix távolság ($d = 5.42916 \text{ nm}$) esetén $\theta_0 = 0 \text{ rad}$ tól $\theta_{max} = \pi/3 \text{ rad}$ ig 10 ponton számolja a kölcsönhatási energiát.



(a) $B_{ext} = 1.18 \text{ T}$

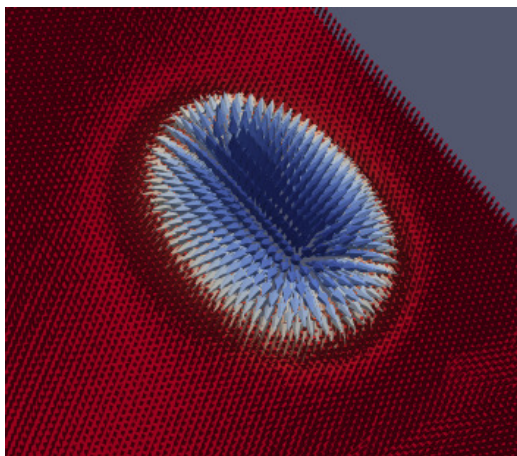


(b) $B_{ext} = 1.96 \text{ T}$

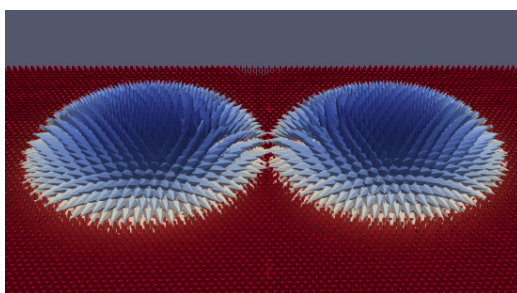


(c) $B_{ext} = 3.53 \text{ T}$

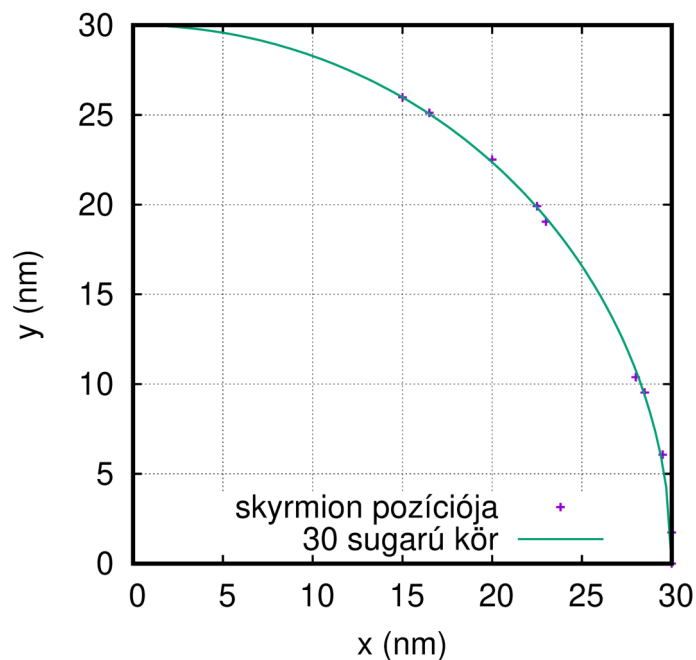
8. ábra. A kölcsönhatási energia két skyrmion között a középpontjuk távolságának függvényében. A számolásokat 300x300-as rácson végeztem, az energiát mRy-ben értendő.



9. ábra. Két skyrmion összeolvadása után keletkező hosszúkas alakzat. Nem ugrik össze skyrmionná, mivel két felfelé álló spint rögzítettünk



10. ábra. Két közel elhelyezett skyrmion optimalva, látszik, hogy kissé deformálódtak ($B_{ext} = 1.18 \text{ T}$, $d = 2.71458 \text{ nm}$).



11. ábra. A két skyrmion egymáshoz képesti elhelyezkedései a sugár szerinti kölcsönhatási energia számolásakor

A d sugarú θ szögű körvonal persze csak két rácspontot tartalmaz, azonban a többi 8 rácspontot úgy választottam ki, hogy minnél közelebb legyen a körvonalkhoz. A kiválasztott pontok elhelyezkedését a 11 ábra mutatja.

A 12 táblázat mutatja a konfigurációk energiáját a szög függvényében, illetve azoknak az átlagtól való eltérését. Az energiakülönbségek származhatnak a skyrmionok asszimetriája mellett a program pontatlanságából, a kis távolságkülönbségekből az egyes pontok esetén és a modell közelíréseiből is (pl.: periodikus határfeltétel). Összességében azonban az elérés elhanyagolható, a szögfüggéssel nem kell számolnunk.

5. Kitekintés

Az előző fejezetben meghatároztuk a kölcsönhatási energiát két skyrmion között bármilyen elrendezésre. Ha több skyrmionból álló rendszerek esetén szeretnénk az energiát meghatározni, egyszerűen csak össze kell adnunk minden párra. A skyrmionok topológiai stabilitásuk révén kvázirészecskének tekinthetők. A célom, hogy a feltérképezett kölcsönhatási energia és felhasználásával a skyrmionokat kvázirészecskének tekintve felépítsek egy Ising

θ (rad)	E_{skyr} (mRy)	$ \langle E_{skyr} \rangle - E_{skyr} $ (mRy)
0	-510633.080646	$4.812 \cdot 10^{-4}$
0.06	-510633.080136	$2.88 \cdot 10^{-5}$
0.2	-510633.079704	$4.608 \cdot 10^{-4}$
0.32	-510633.080248	$8.32 \cdot 10^{-5}$
0.36	-510633.080015	$1.498 \cdot 10^{-4}$
0.69	-510633.079398	$7.668 \cdot 10^{-4}$
0.72	-510633.079695	$4.698 \cdot 10^{-4}$
0.84	-510633.080958	$7.932 \cdot 10^{-4}$
0.99	-510633.080728	$5.632 \cdot 10^{-4}$
1.05	-510633.080120	$4.48 \cdot 10^{-5}$

12. ábra. Két $d = 8.14$ nm távolságra lévő skyrmiont tartalmazó rács energiája a középpontjukat összekötő egyenesnek az x tengellyel bezárt szögének függvényében egy 300x300-as rácson. A jobb oldali oszlop az átlagtól való eltérést mutatja.

modellt, amelyet véges hőmérsékletű skyrmionrendszerek szimulálására használhatunk.

Az Ising modellben $+1/-1$ állapotú spinek helyett minden rácsponton lehet vagy nem lehet skyrmion, a két állapot a 0 és az 1 attól függően, hogy van-e ott skyrmion. A modellt egy Monte Carlo algoritmussal vizsgálunk. Első lépésként adott számú skyrmiont osztunk el véletlenszerűen a rácson. Ezt követően úgy változtatjuk a rácsot, hogy annak az energiája csak kis, a hőmérséklettől függő módon nőhessen meg. Természetesen egy rácspont állapotát önmagában nem cserélhetjük ki, hiszen ezzel megszüntetnénk vagy létrehoznánk egy skyrmiont, azaz nem maradna meg a számuk. A megoldás, hogy mindig egy 0 és egy 1 állapotú rácspont cseréjét vizsgáljuk, azaz egy skyrmiont helyezünk át. Ha az áthelyezés után a rendszernek kisebb az energiája mint előtte, végrehajtjuk a cserét egyébként $P(\Delta E) = \exp \frac{\Delta E}{k_B T}$ valószínűséggel hajtjuk csak végre.

Hivatkozások

- [1] I. Dzyaloshinsky.
A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics.
Journal of Physics and Chemistry of Solids, 4(4):241–255, 1958.
- [2] J Fischbacher, Alexander Kovacs, Harald Oezelt, T Schrefl, L Exl, J Fidler, D Suess, N Sakuma, M Yano, A Kato, et al.
Nonlinear conjugate gradient methods in micromagnetics.
AIP Advances, 7(4):045310, 2017.
- [3] Reeves Fletcher and Colin M Reeves.
Function minimization by conjugate gradients.
The computer journal, 7(2):149–154, 1964.
- [4] Tin-Lun Ho.
Spinor bose condensates in optical traps.
Phys. Rev. Lett., 81:742–745, Jul 1998.
- [5] Tôru Moriya.
Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism.
Phys. Rev., 120:91–98, Oct 1960.
- [6] Sebastian Mühlbauer, Benedikt Binz, F Jonietz, Christian Pfleiderer, Achim Rosch, Anja Neubauer, Robert Georgii, and Peter Böni.
Skyrmion lattice in a chiral magnet.
Science, 323(5916):915–919, 2009.
- [7] Elijah Polak and Gerard Ribiere.
Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées.
Revue française d’informatique et de recherche opérationnelle. Série rouge, 3(16):35–43, 1969.
- [8] Niklas Romming, Christian Hanneken, Matthias Menzel, Jessica E. Bickel, Boris Wolter, Kirsten von Bergmann, André Kubetzka, and Roland Wiesendanger.
Writing and deleting single magnetic skyrmions.
Science, 341(6146):636–639, August 2013.
- [9] Niklas Romming, André Kubetzka, Christian Hanneken, Kirsten von Bergmann, and Roland Wiesendanger.
Field-dependent size and shape of single magnetic skyrmions.
Physical review letters, 114(17):177203, 2015.
- [10] U. K. Rößler, A. N. Bogdanov, and C. Pfleiderer.
Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals.

- Nature*, 442(7104):797–801, August 2006.
- [11] Levente Rózsa, Eszter Simon, Krisztián Palotás, László Udvardi, and László Szunyogh.
Complex magnetic phase diagram and skyrmion lifetime in an ultrathin film from atomistic simulations.
Physical Review B, 93(2):024417, 2016.
 - [12] E. Simon, K. Palotás, L. Rózsa, L. Udvardi, and L. Szunyogh.
Formation of magnetic skyrmions with tunable properties in PdFe bilayer deposited on ir(111).
Physical Review B, 90(9), September 2014.
 - [13] T.H.R. Skyrme.
A unified field theory of mesons and baryons.
Nuclear Physics, 31:556–569, 1962.
 - [14] S. L. Sondhi, A. Karlhede, S. A. Kivelson, and E. H. Rezayi.
Skyrmions and the crossover from the integer to fractional quantum hall effect at small zeeman energies.
Phys. Rev. B, 47:16419–16426, Jun 1993.
 - [15] Yoshinori Tokura and Naoya Kanazawa.
Magnetic skyrmion materials.
Chemical Reviews, 121(5):2857–2897, 2020.
 - [16] Xichao Zhang, Yan Zhou, Kyung Mee Song, Tae-Eon Park, Jing Xia, Motohiko Ezawa, Xiaoxi Liu, Weisheng Zhao, Guoping Zhao, and Seonghoon Woo.
Skyrmion-electronics: writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications.
Journal of Physics: Condensed Matter, 32(14):143001, 2020.