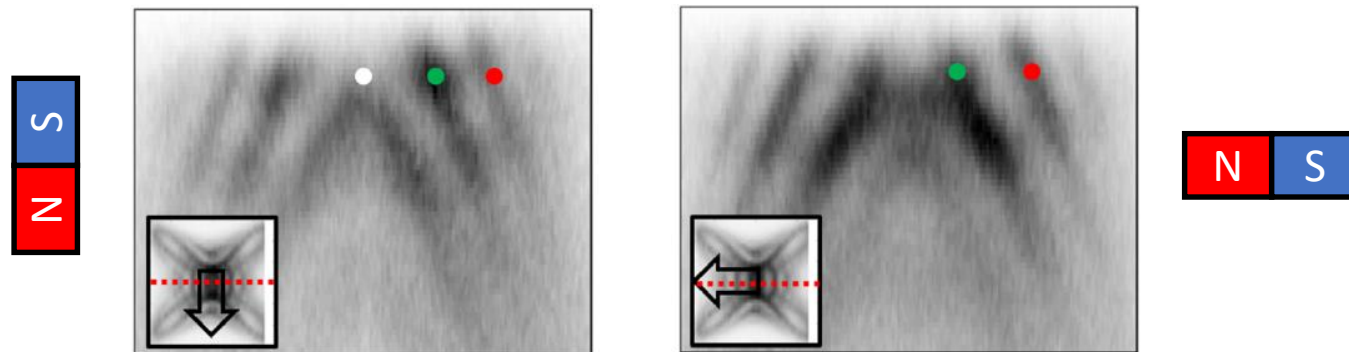


Struktura pasmowa Fe(001): studnie kwantowe, efekty spin-orbita oraz oddziaływanie elektron-magnon

Dr inż. Ewa Młyńczak

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. J. Habera PAN, Kraków





Współpracownicy



Peter Grünberg Institute (PGI)
Electronic Properties (PGI-6)



L. Plucinski, M. Eschbach, T. Heider, V. Feyer, G. Zamborlini, M. Jugovac,
M. Gehlmann, P. Gospodaric, S. Suga, C. Tusche, and C. M. Schneider

Eksperyment



Peter Grünberg Institute (PGI)
Quantum Theory of Materials (PGI-1)

Obliczenia Ab initio

I. Aguilera, G. Bihlmayer, S. Blügel

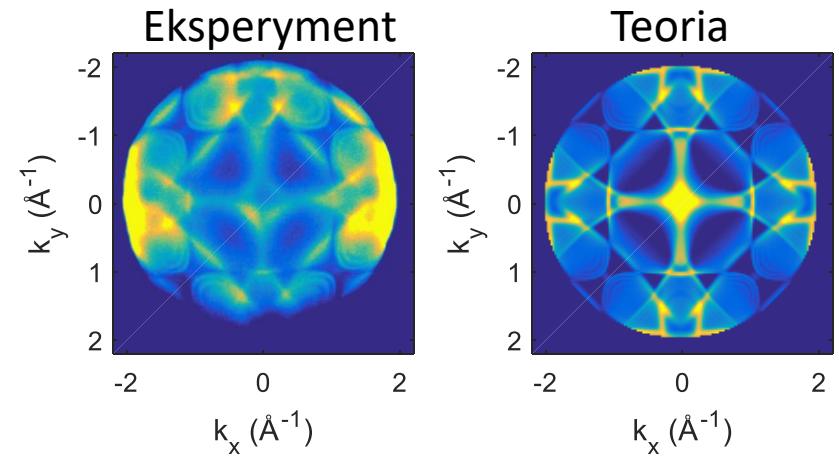


Obliczenia one-step model

S. Borek, J. Minar, J. Braun, H. Ebert

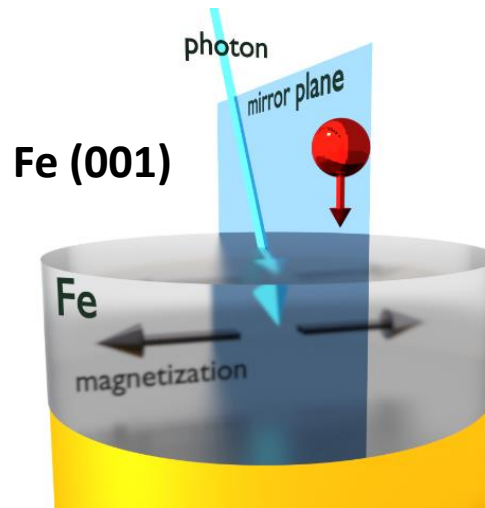
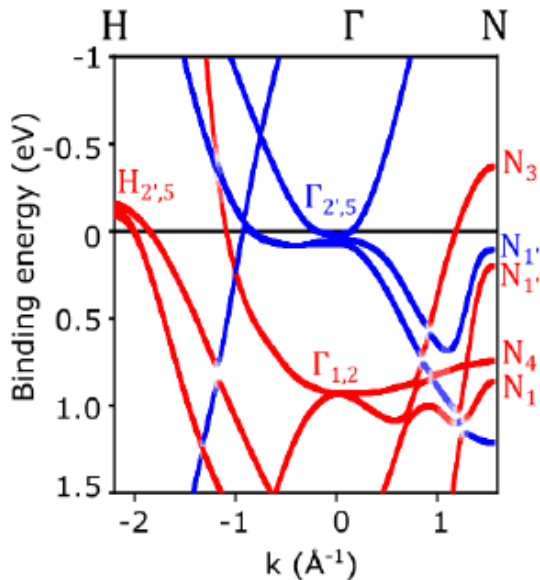
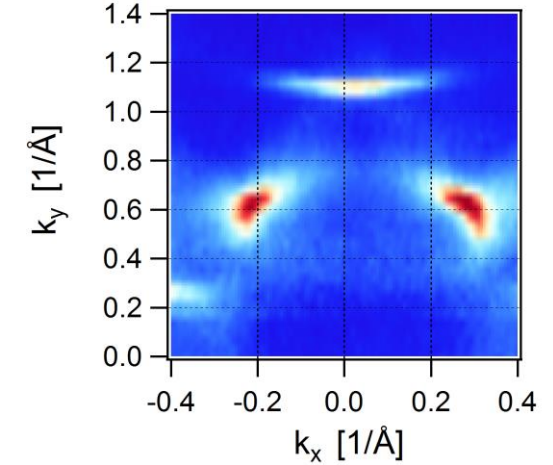
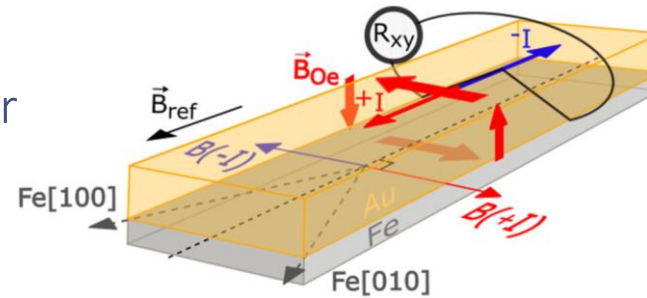
Plan prezentacji

- Motywacja/Krótki przegląd literatury tematu
- Praparatyka warstw Fe na Au(001)
- Wprowadzenie do przestrzeni odwrotnej, powierzchnie Fermiego
- Eksperyment: spinowo- i kąto- rozdzielcza fotoemisja
 1. Studnie kwantowe, zależne od M^*
 2. Zamykanie/otwieranie przerw spin-orbita, zależne od M^*
 3. Anomalie dyspersji związane z oddziaływaniem elektron-magnon
- Podsumowanie



Potrzebujemy opisu na poziomie struktury pasmowej, żeby zrozumieć wiele efektów transportu/magnetotransportu:

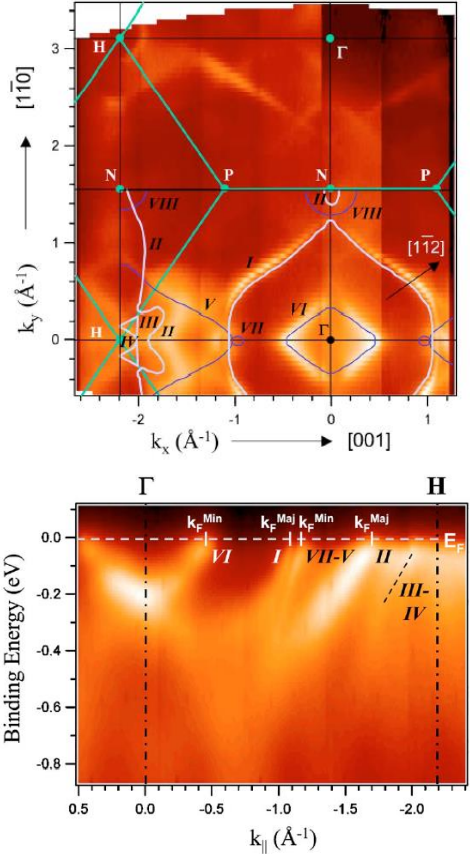
- Anomalny efekt Halla (intrinsic)
- Planarny efekt Halla / Anizotropowy magnetoopór
- Oscylacje anizotropii magnetycznej
- Selekttywne tunelowanie przez barierę



Co jesteśmy w stanie wyczytać z widma pasma walencyjnego w kąto-rozdzielczej fotoemisji (ARPES)?
Potrzeba „idealnej” próbki, czystej, dobrze uporządkowanej powierzchni

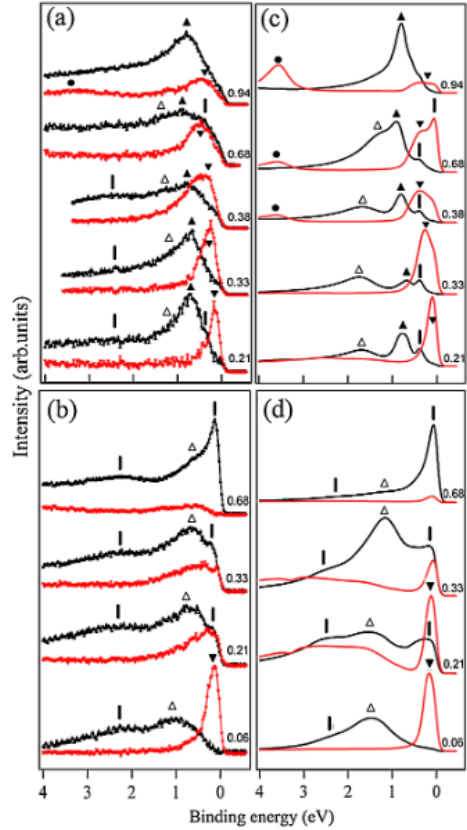
Teoretyczna struktura pasmowa vs. „prawdziwa” próbka

Powierzchnia Fermiego



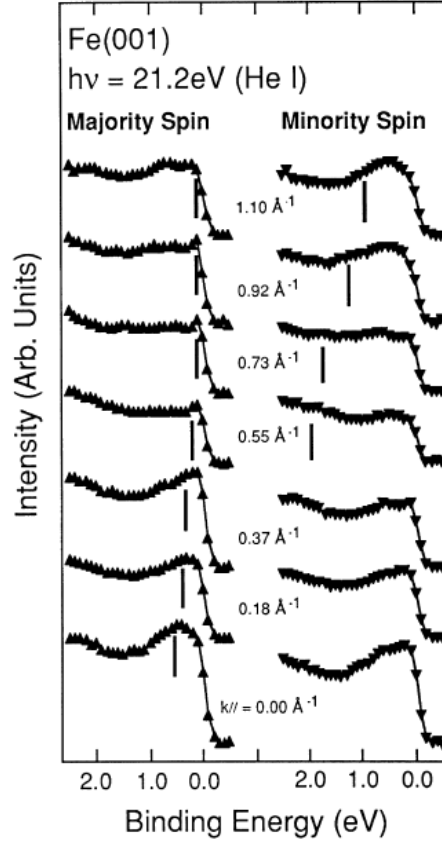
Fe(110)/W(110) [1]
 Δ sieci $\approx 9.4\%$

Polaryzacja spinowa

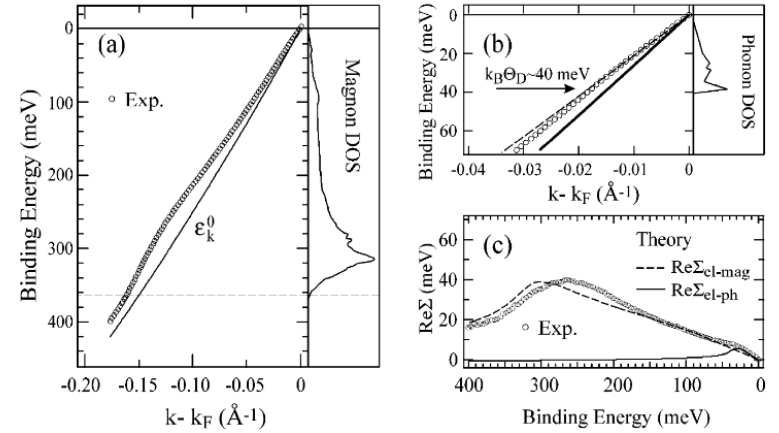


Fe(110)/W(110) [2] Fe(100)/Pd(100) Δ sieci $\approx 4.2\%$ [3]

Stan powierzchniowy

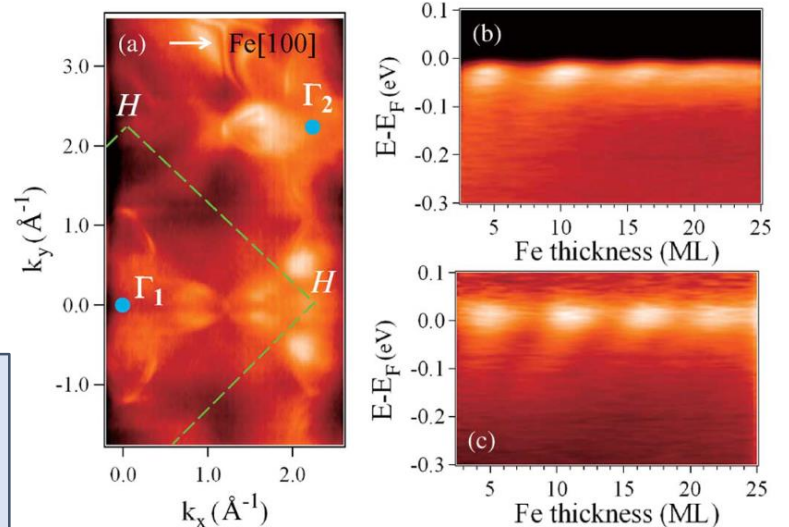


Kink (electron – magnon)



Fe(110) single crystal [4]

Studnie kwantowe

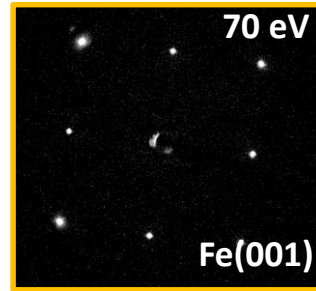
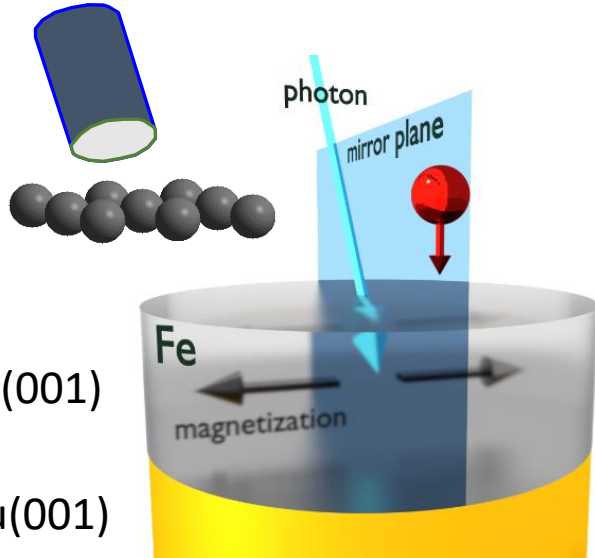


Fe(001)/Ag(001) Δ sieci $\approx 1\%$ [5]

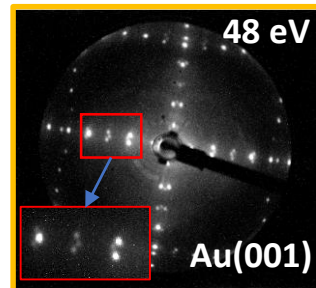
- [1] J. Schäfer et al. Phys. Rev. B 72, 155115 (2005)
- [2] Sánchez-Barriga et al. Phys. Rev. Lett. 103, 267203 (2009)
- [3] Sawada et al. Solid State Comm. 109, 129 (1999)
- [4] Cui et al. Surf. Sci. 601, 4010 (2007)
- [5] Li et al. IEEE Trans. on Mag. 47, 1603 (2011)

Preparatyka warstw Fe na Au(001)

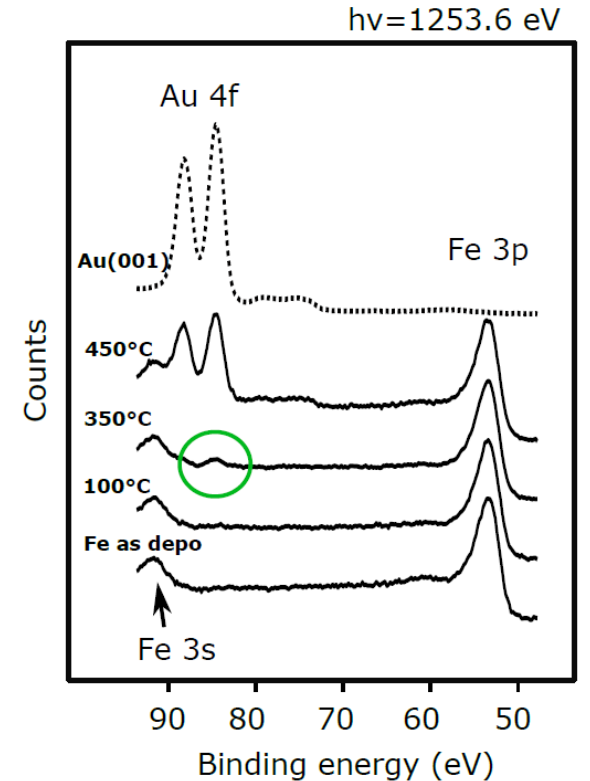
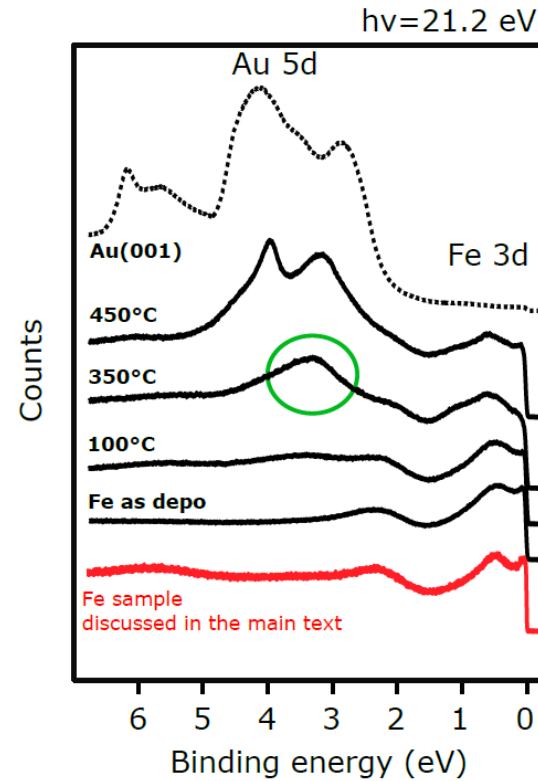
E-beam evaporator



$a_{\text{Fe}} = 2.86 \text{ \AA}$
 $a_{\text{Fe}} * \sqrt{2} = 4.04 \text{ \AA}$
 Niedopasowanie sieci $\approx 1\%$

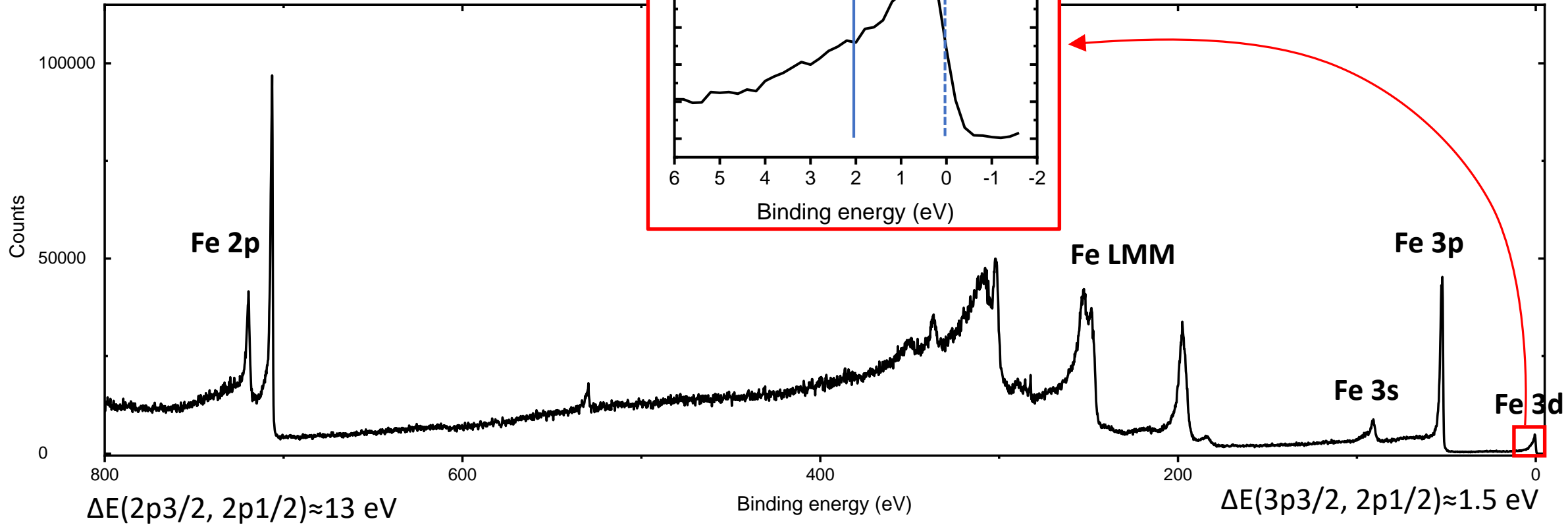
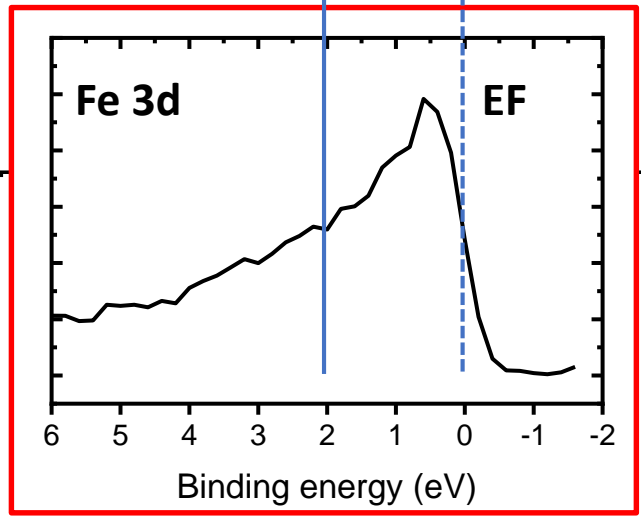
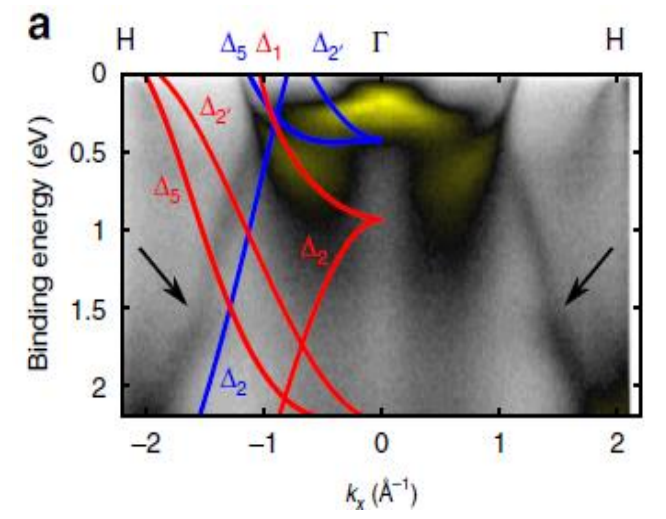
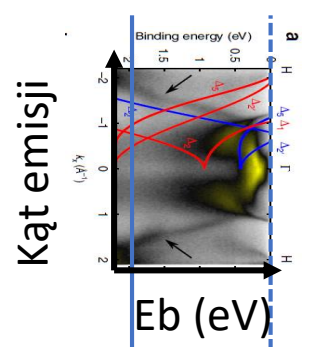


$a_{\text{Fe}} = 4.08 \text{ \AA}$

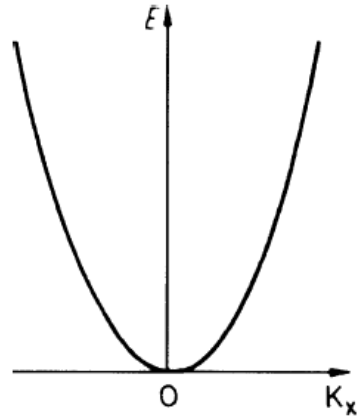


Warstwa Fe naniesiona w $T \approx 80\text{K}$

- Dobre dopasowanie stałych sieci Fe i Au,
- Powierzchnia Fe czysta chemicznie (brak Au na powierzchni) [XPS, UPS],
- Wysoka jakość uporządkowania sieci krystalicznej (LEED),



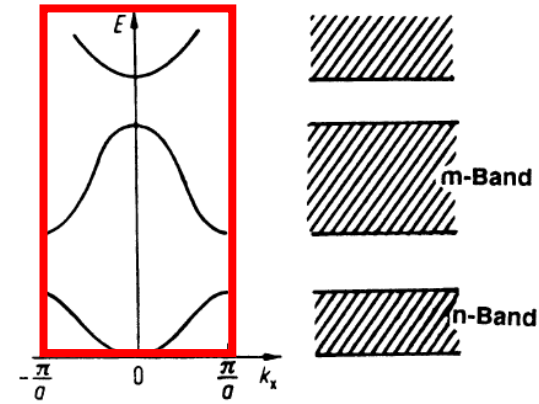
Struktura pasmowa – model prawie swobodnych elektronów



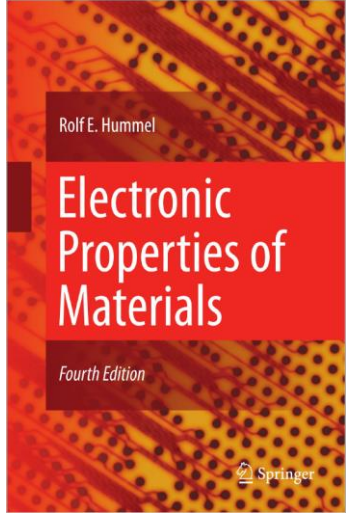
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

Periodyczne zwielokrotnienie



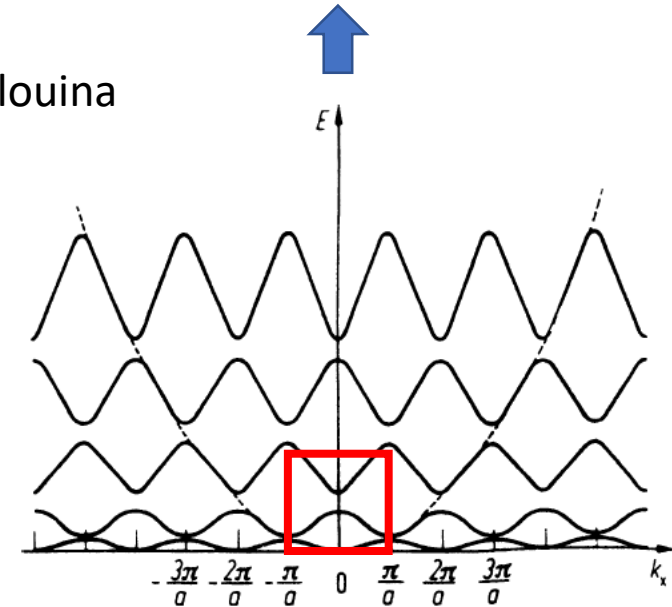
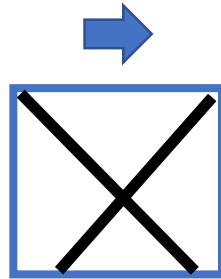
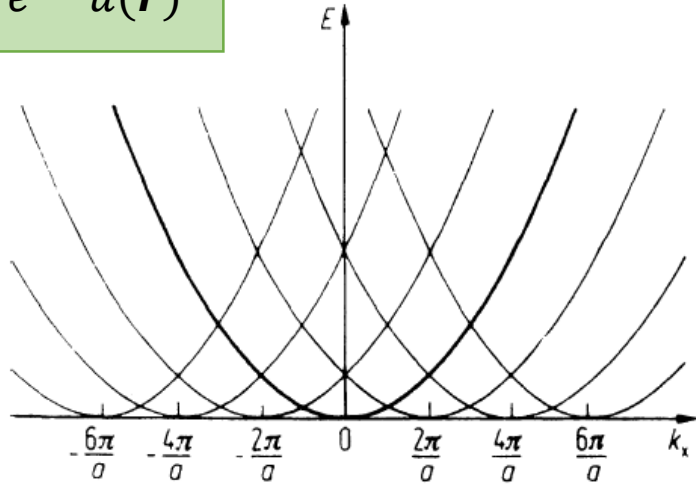
Schemat strefy zredukowanej



Funkcja Blocha
 $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r})$



+ 'anticrossing' na granicy strefy Brillouina

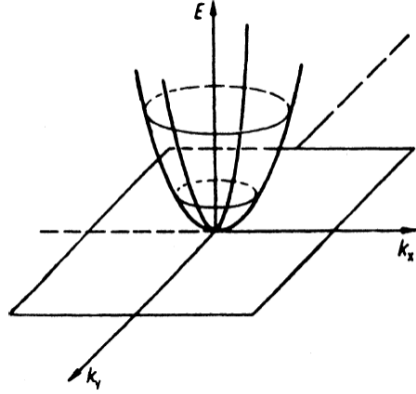


Schemat strefy periodycznej

$$k = \pm n \frac{\pi}{a} \text{ (warunek Bragga)}$$

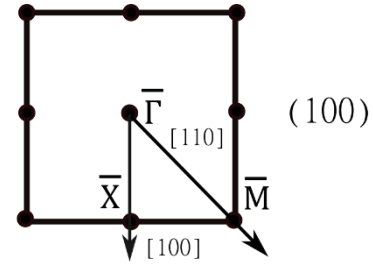
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + n \frac{2\pi}{a}\right)^2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$E(k_x, k_y)$

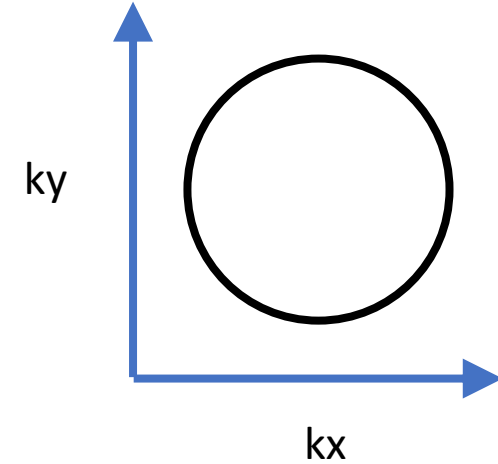


Np. materiały 2D,
stany powierzchniowe

Strefa Brillouina (2D)



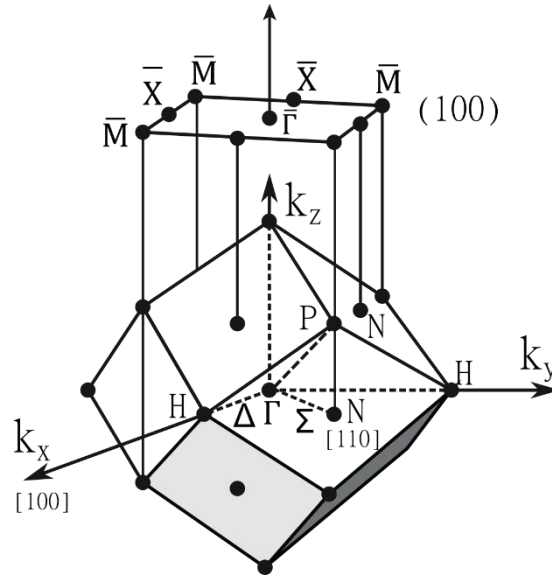
Kontur stałej energii (2D)



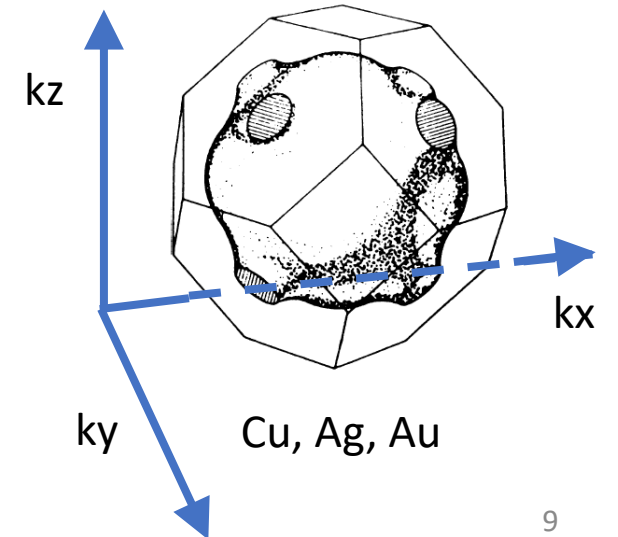
$E(k_x, k_y, k_z)$

Materiały lite

Strefa Brillouina (3D)



Powierzchnia stałej energii (3D)





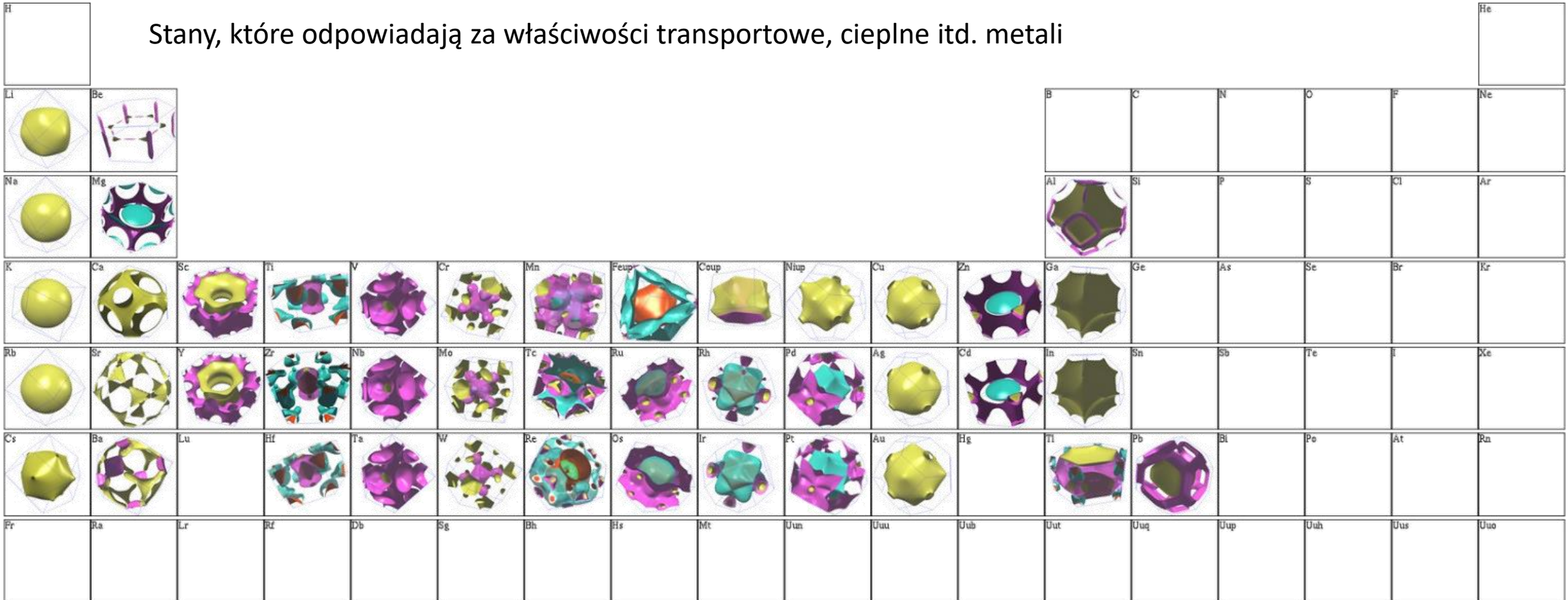
Powierzchnie Fermiego

‘fantasies of a modern artist’

Powierzchnia stałej energii między stanami obsadzonymi a stanami nieobsadzonymi w przestrzeni wektora falowego

1A 2A 3B 4B 5B 6B 7B 8 1B 2B 3A 4A 5A 6A 7A NG

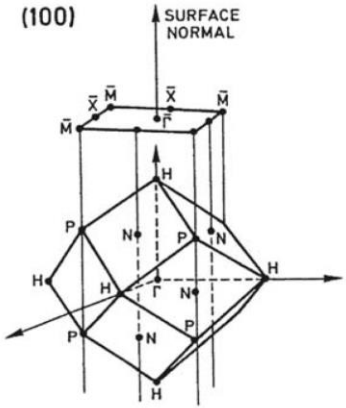
Stany, które odpowiadają za właściwości transportowe, cieplne itd. metali



The Fermi surface is ‘the stage on which the ‘drama of the life of the electron’ is played out’

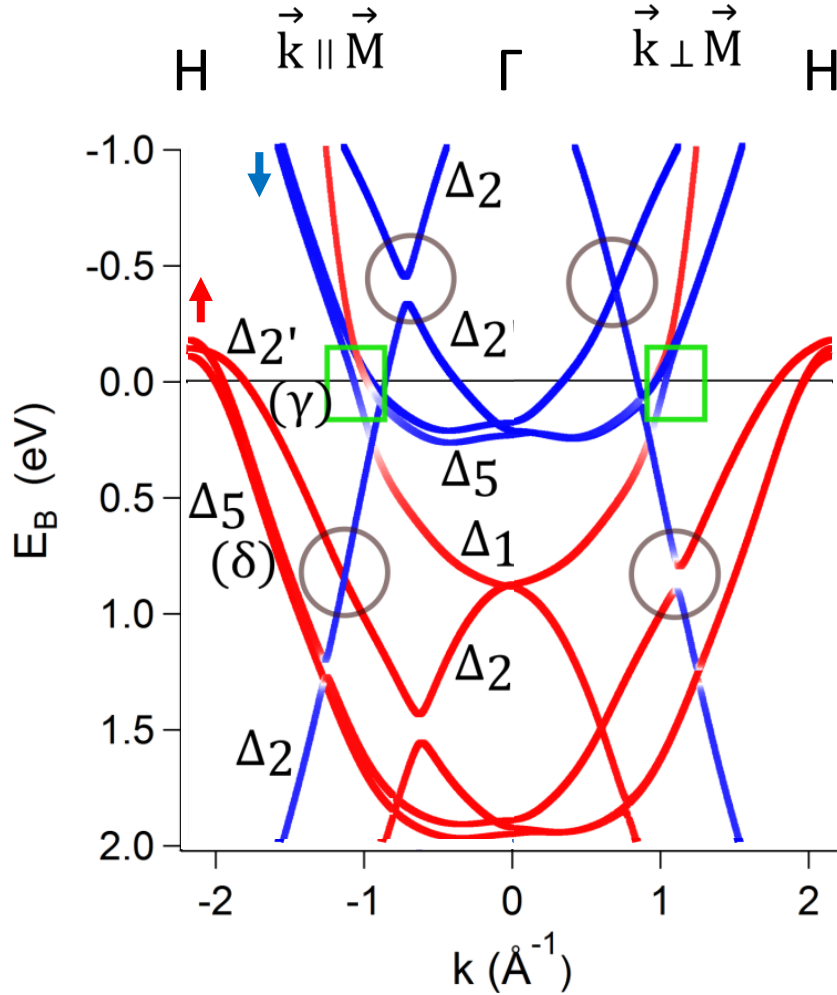
[M. I. Kaganov and I. M. Lifshits Sov. Phys. Usp. 22, 904 (1979)]

Relatywistyczna struktura elektronowa bcc Fe – stany objętościowe



$$\hat{H}_{so} = \zeta \vec{s} \cdot \vec{L}$$

$\zeta(\text{Fe}) = 30 \text{ meV}$
 $\zeta(\text{Au}) = 362 \text{ meV}$

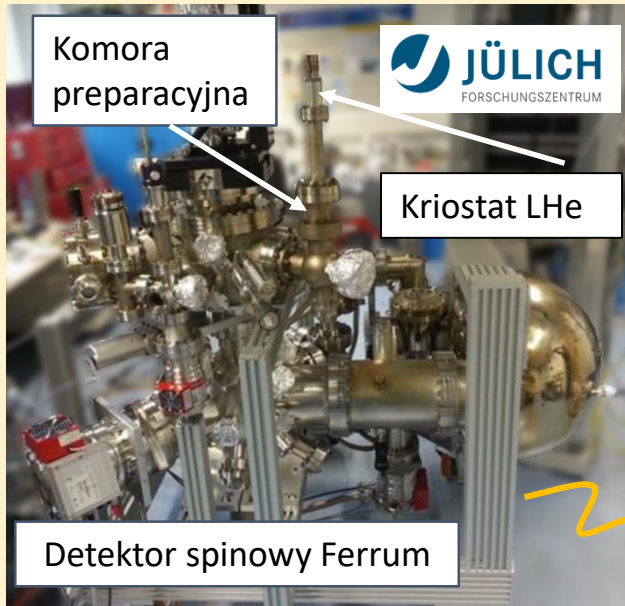


SOC ON

GW calculations by I. Aguilera, FZJ PGI-1

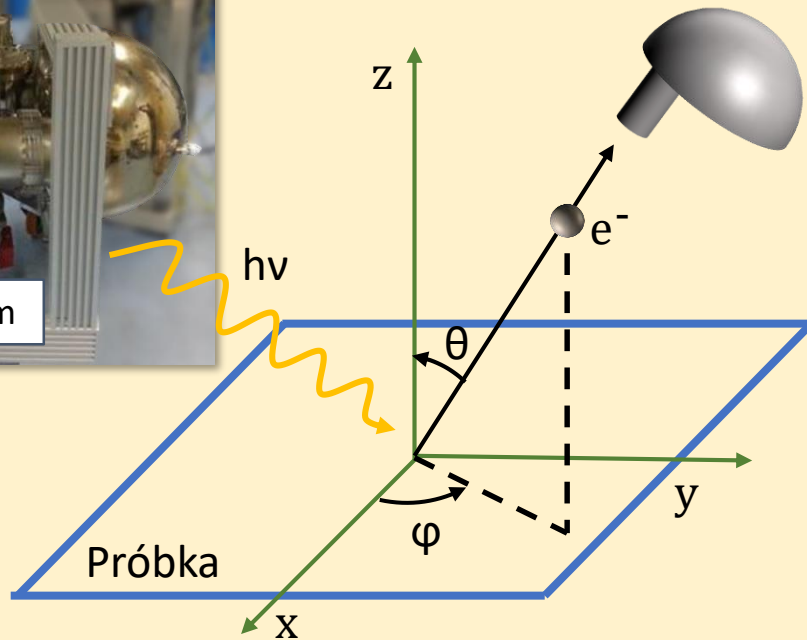
C_{4v}	Orbital representation
Δ_1	
Δ_2'	
Δ_2	
Δ_5	

Spektrometr fotoemisyjny ARPES

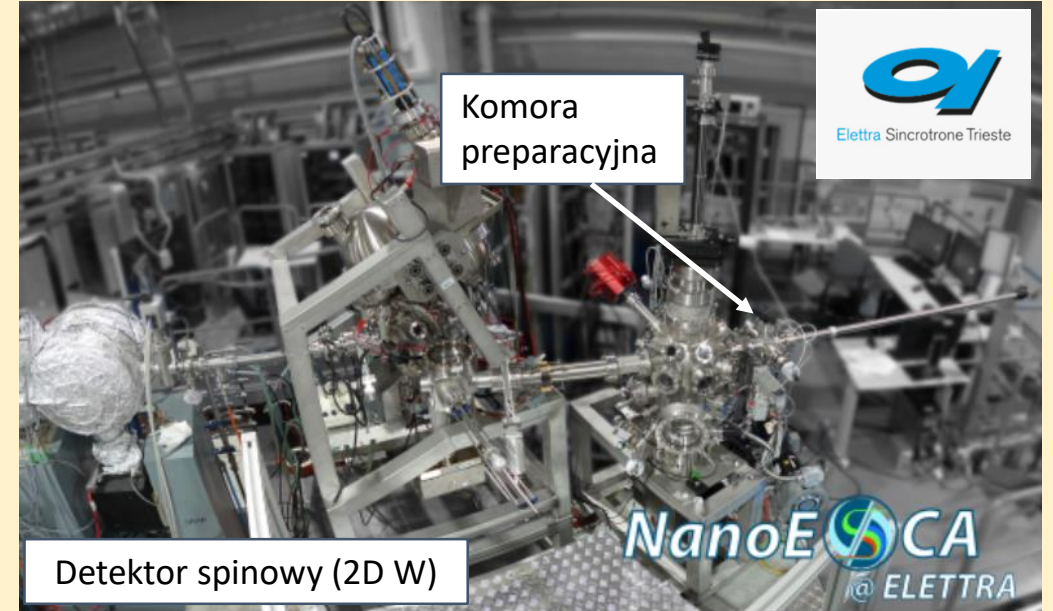


Kriostat LHe

Detektor spinowy Ferrum

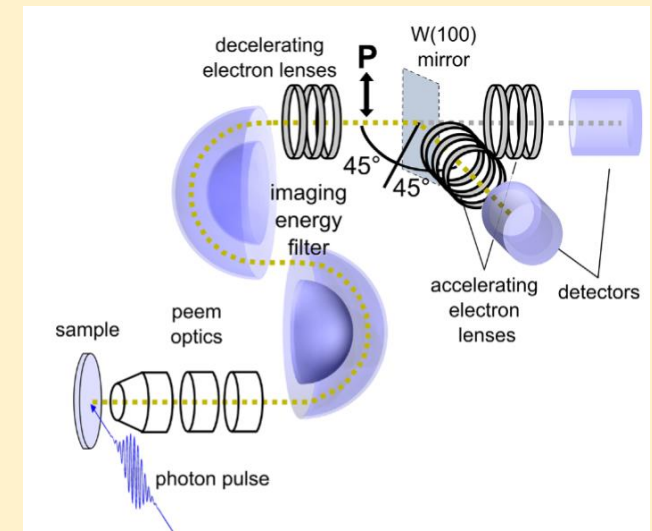


NanoESCA photoemission microscope



Detektor spinowy (2D W)

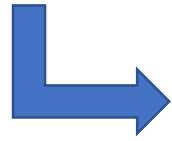
NanoESCA @ ELETTRA



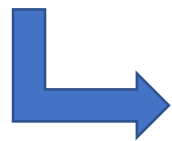


$$E(k_x, k_y)$$

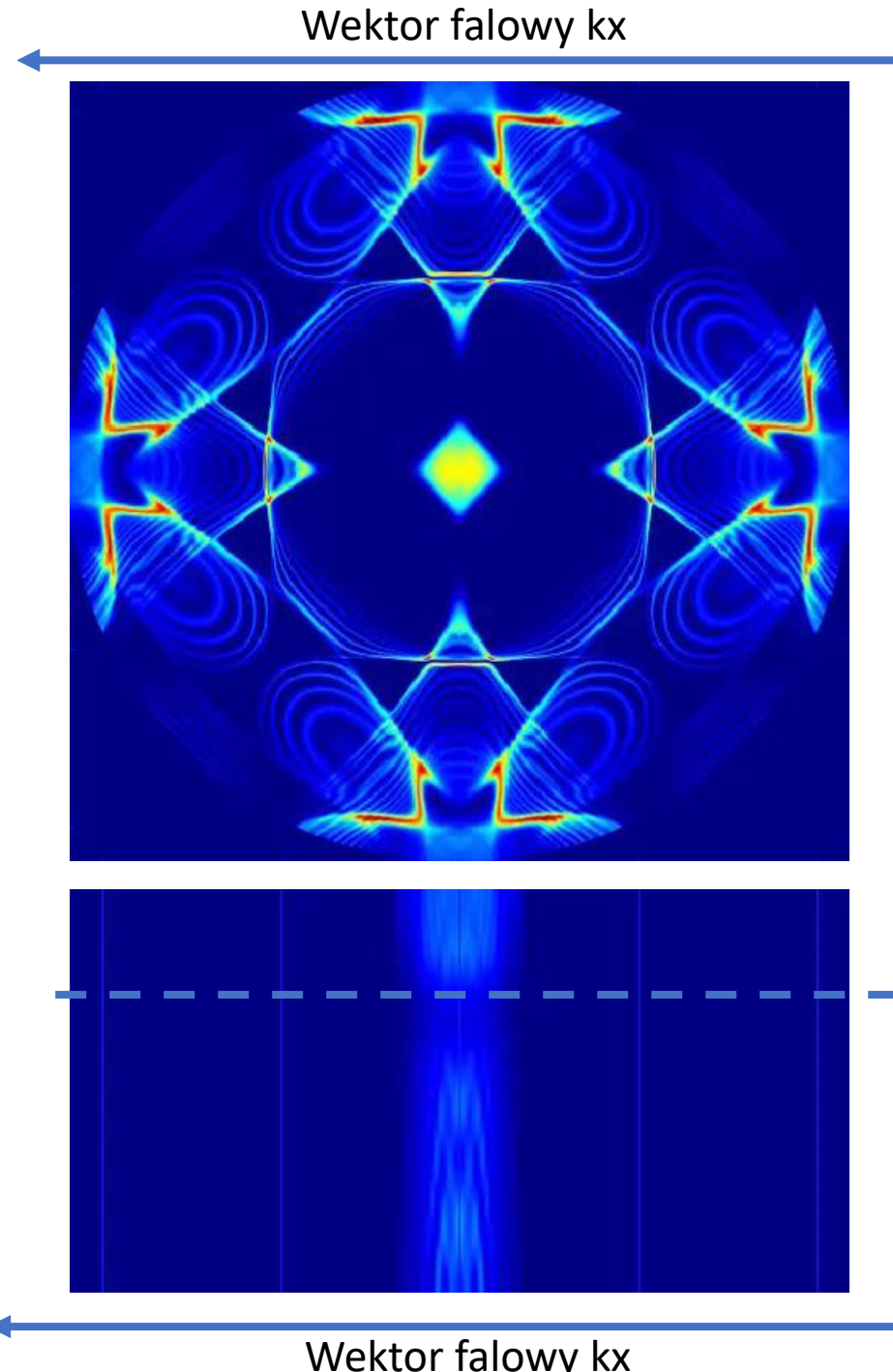
Różne energie kinetyczne elektronów



Zmiana kąta emisji – dostęp do różnych wektorów falowych



Dostęp do k_z - zmiana energii fotonu

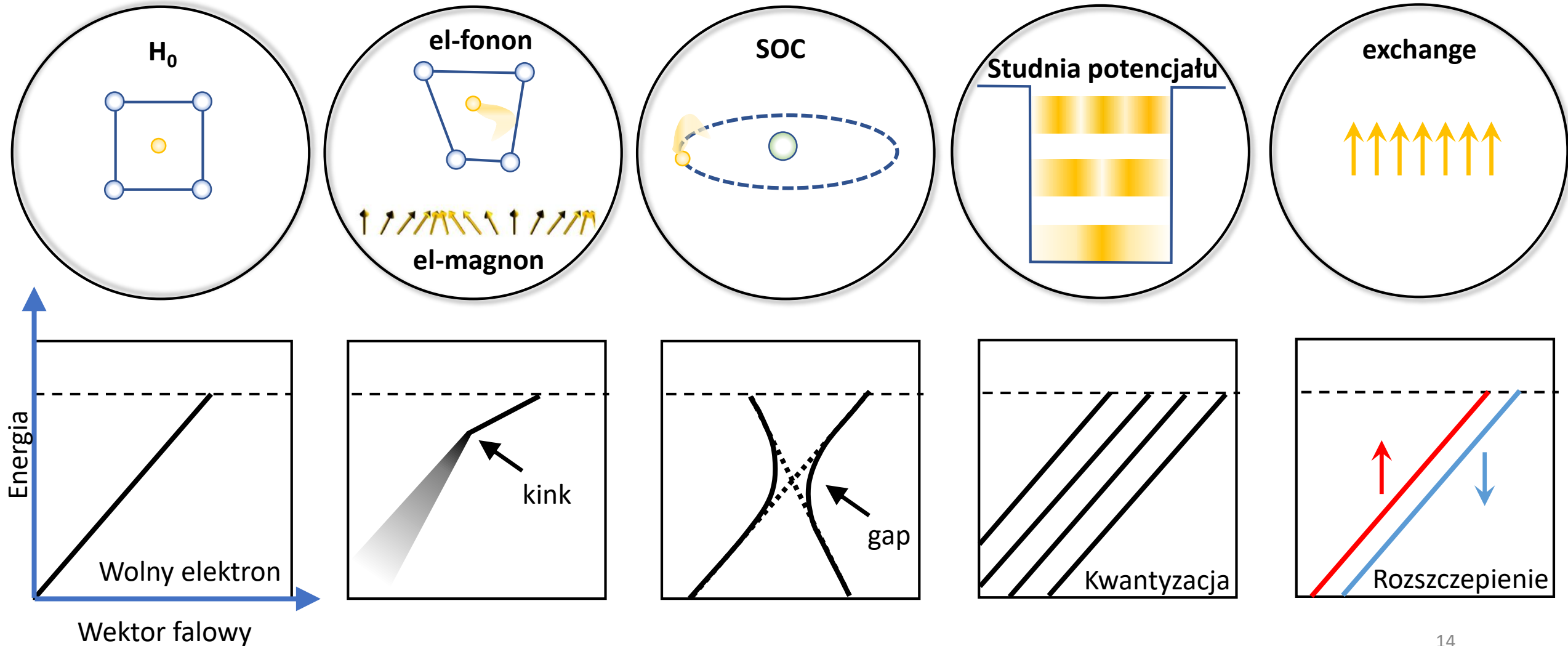


"One shot" w „momentum microscope”

Poziom Fermiego

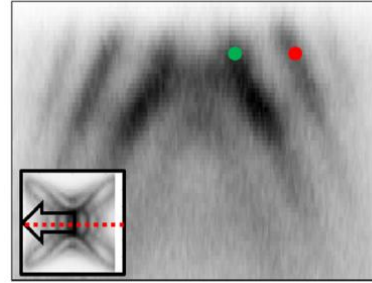
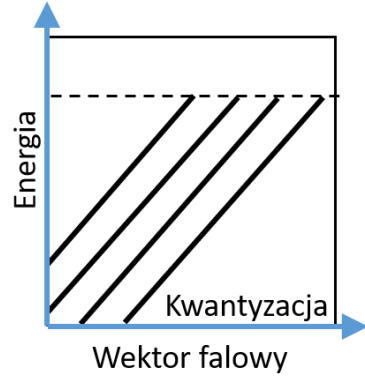
"One shot" w standardowym ARPES

Co możemy wyczytać z widma ARPES – „sekretne” życie elektronów



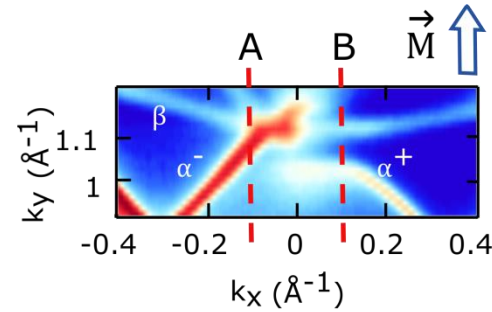
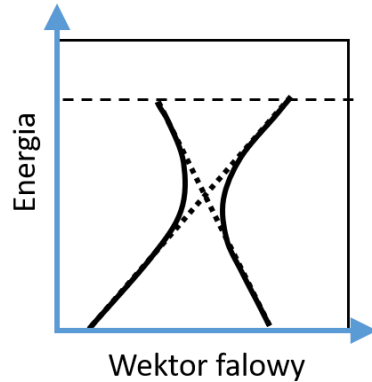
Wyniki

1



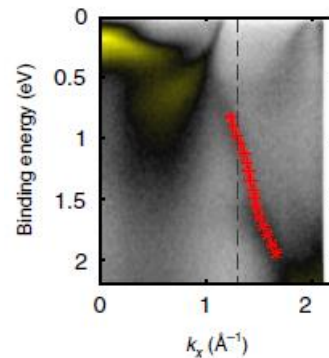
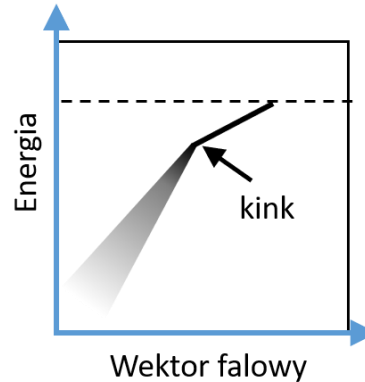
- Oscylacje anizotropii magnetycznej
- Oscylacje magnetotransportu

2



- Anomalny efekt Halla (intrinsic),
- Tunelowy (balistyczny i anizotropowy) magnetoopór
- Zmiana anizotropii magnetycznej indukowana polem E
- Topologia

3



- Zależność temperaturowa magnetooporu
- Magnonika
- Ultraszybka demagnetyzacja

Od stanów objętościowych do cienkich warstw: studnie kwantowe

Reguła kwantyzacji Bohra-Sommerfelda:
(Phase accumulation model)

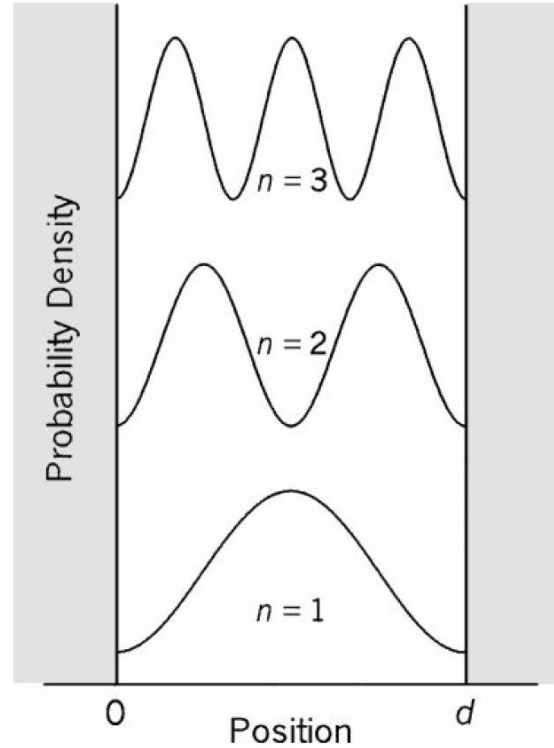
Zmiana fazy przy odbiciu

Grubość filmu

$$2k(E)Nt + \Phi(E) = 2n\pi$$

Całkowita zmiana fazy „tam i z powrotem”

gdy $\Phi(E) = 0 \text{ or } 2\pi$ $k = \frac{n\pi}{Nt}$



Konsekwencje:

Oscylacje:

- Gigantyczny magnetooprór (GMR),
- Tunelowy magnetooprór (TMR),
- Anizotropia magnetyczna,
- Sprzężenie wymienne międzywarstwowe,



Studnie kwantowe i oscylacje MAE* in Fe

Oscylacje anizotropii magnetycznej wywołanej istnieniem stopni atomowych wraz z grubością filmu Fe

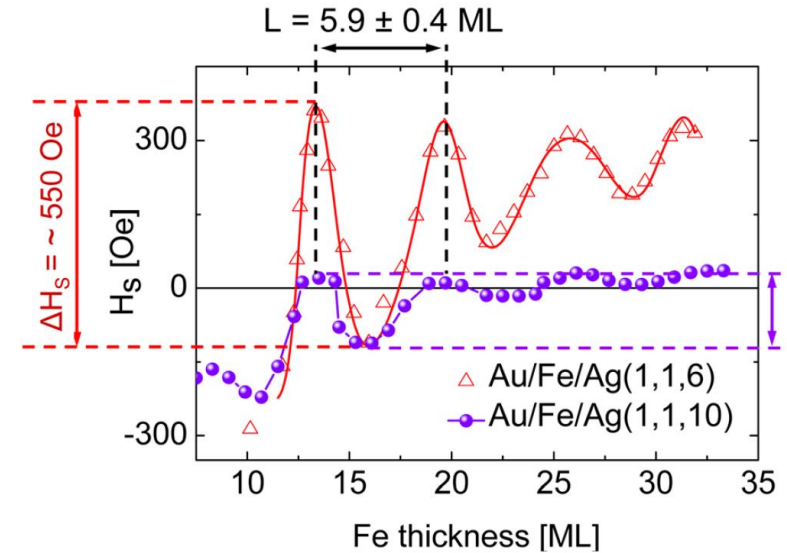
Interpretacje:

- Mniejszościowy stan Δ_2
(J. Li et al. Phys. Rev. Lett. **102**, 207206 (2009)),
- Większościowy stan Δ_5
(M. Dabrowski, Phys. Rev. Lett. **113**, 067203 (2014)),
- Szeroki region 2D BZ odległy od centrum BZ
(L. M. Sandratskii, Phys. Rev. B **92**, 134414 (2015))

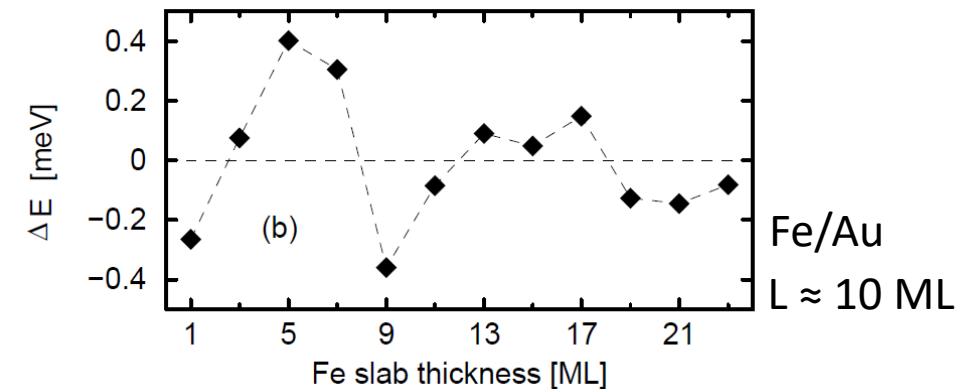
$$k_{env} = k_{ZB} - k_{Fermi}$$

$$k_{env} = k_{ZB} - k_{Fermi}$$

$$p = \frac{\pi}{k_{env}}$$



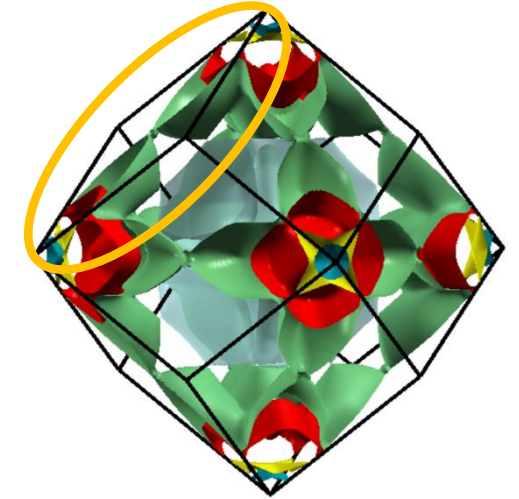
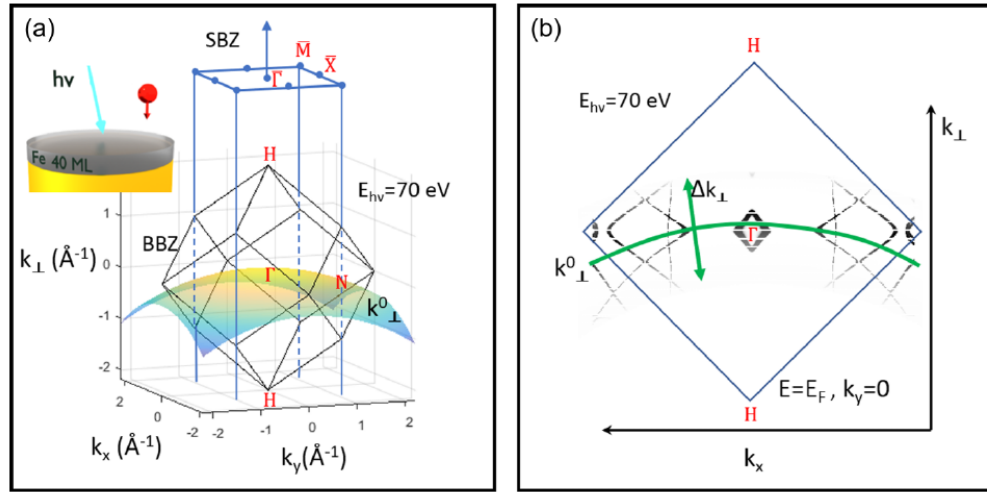
M. Przybylski et al. J. Appl. Phys. 111, 07C102 (2012)



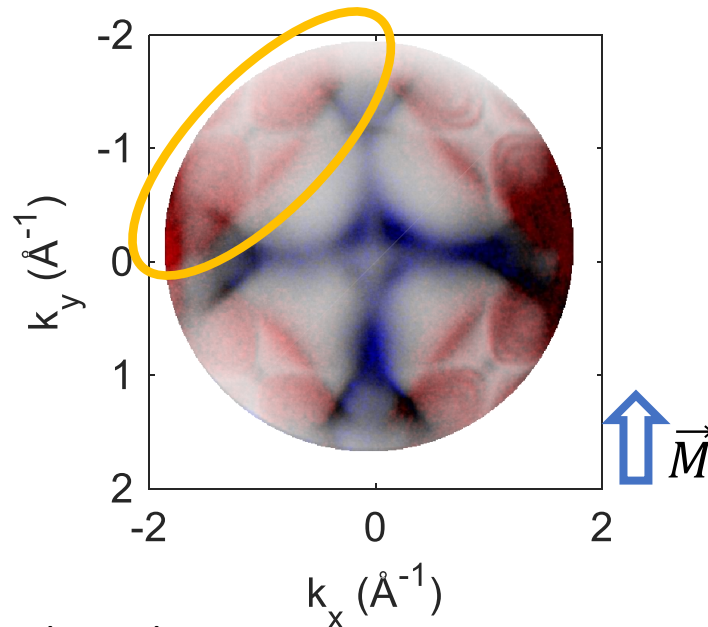
G. Y. Guo J. Phys.: Condens. Matter 11 4329 (1999)

*MAE – energia anizotropii magnetokrystalicznej

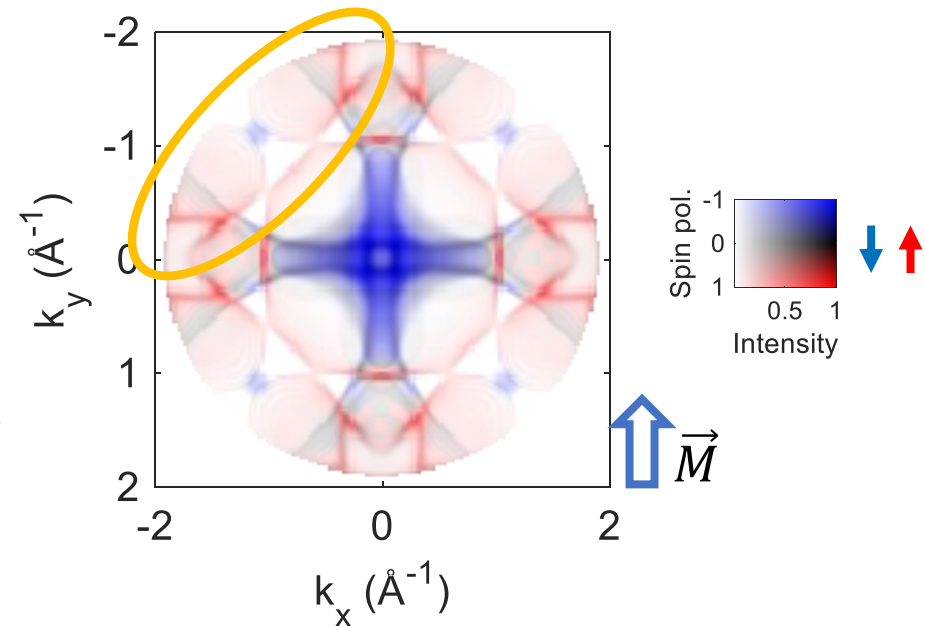
Powierzchnia Fermiego bcc Fe, Fe(001)



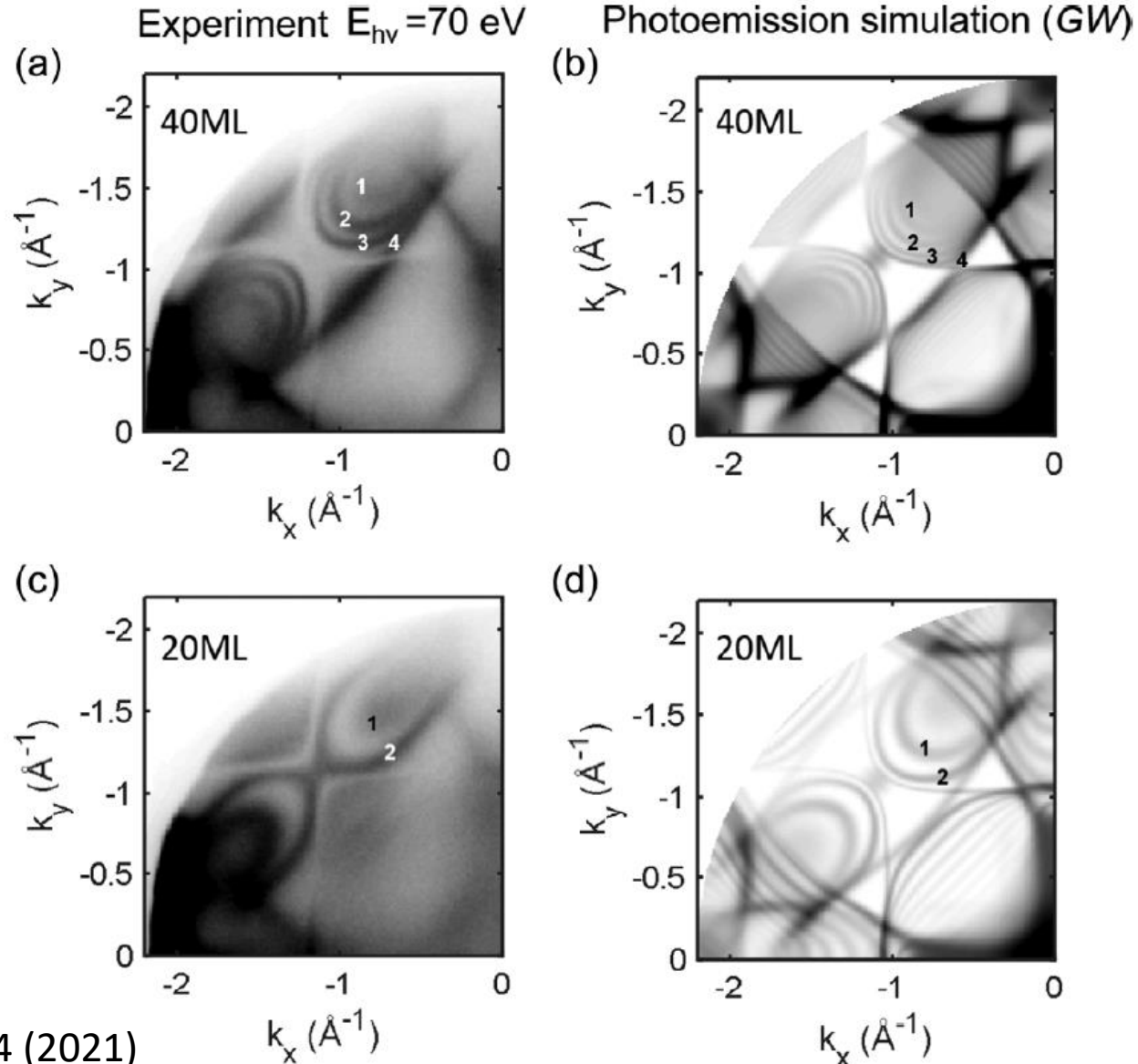
Eksperyment $E_{hv} = 70$ eV p-pol



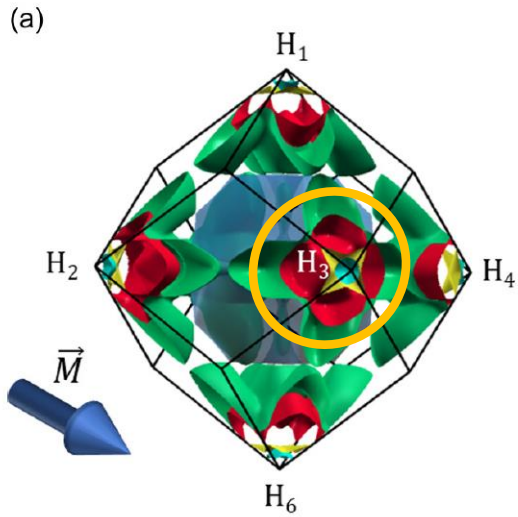
Symulacja fotoemisji (GW)



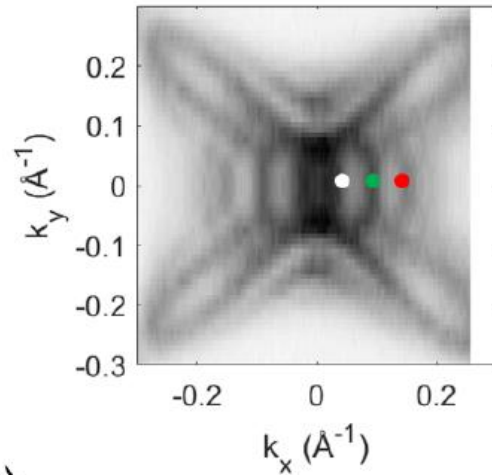
Powierzchnia Fermiego Fe(001): studnie kwantowe



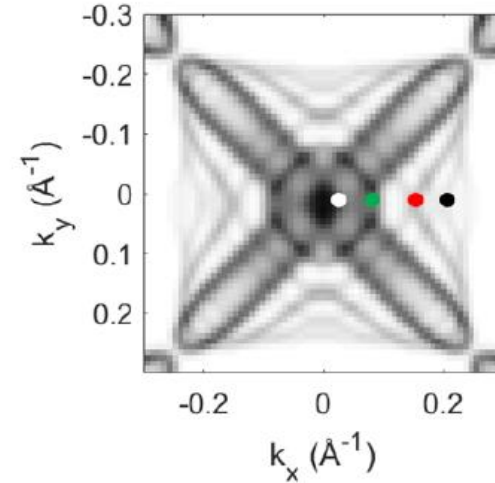
Studnie kwantowe wzdłuż linii Γ -H \leftrightarrow Fe[001]



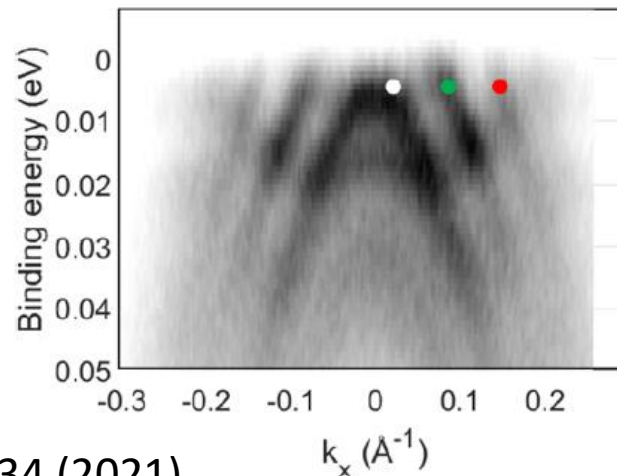
(a) Experiment $E_{hv} = 8.4$ eV



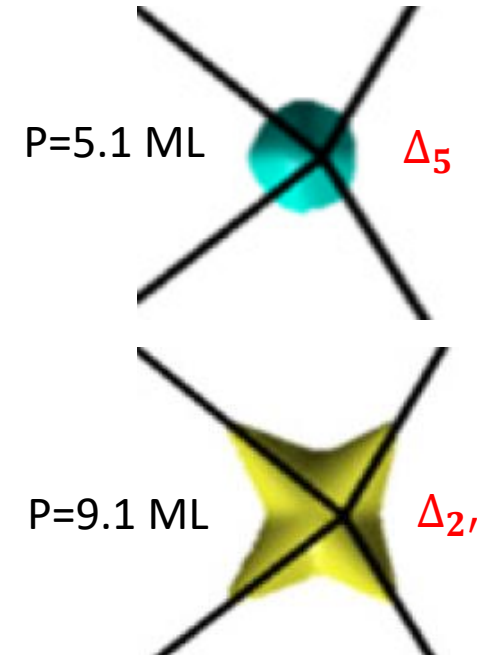
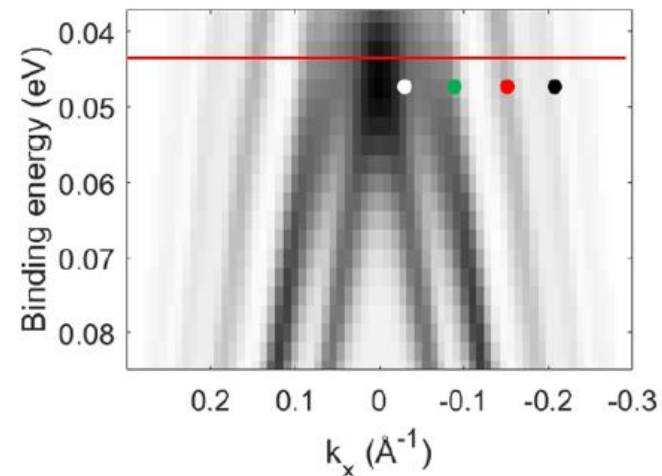
(c) Photoemission simulation (GW)



(b)



(d)



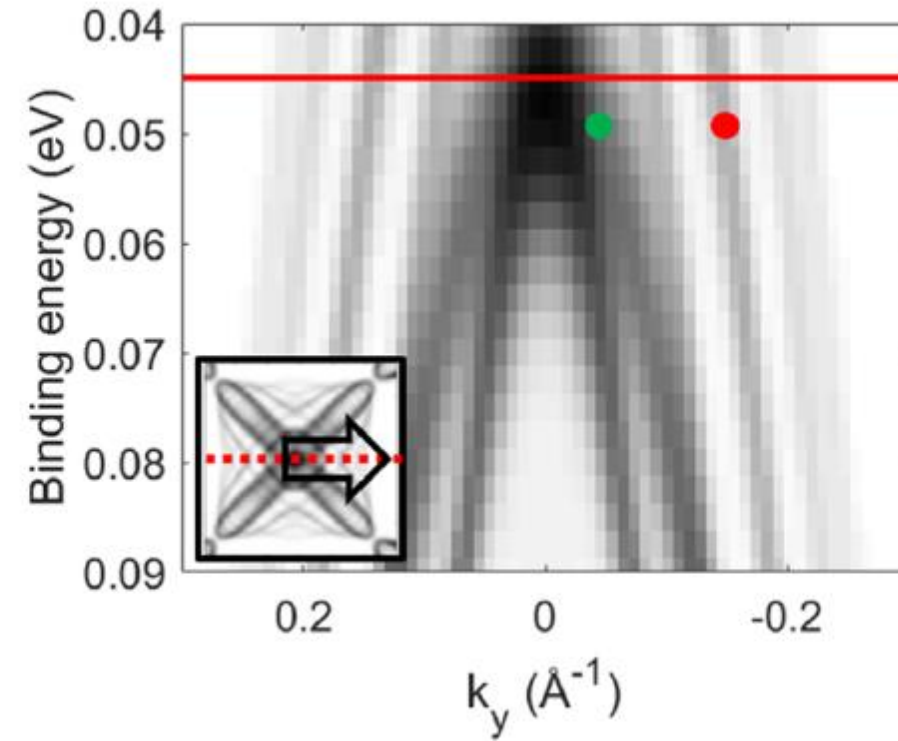
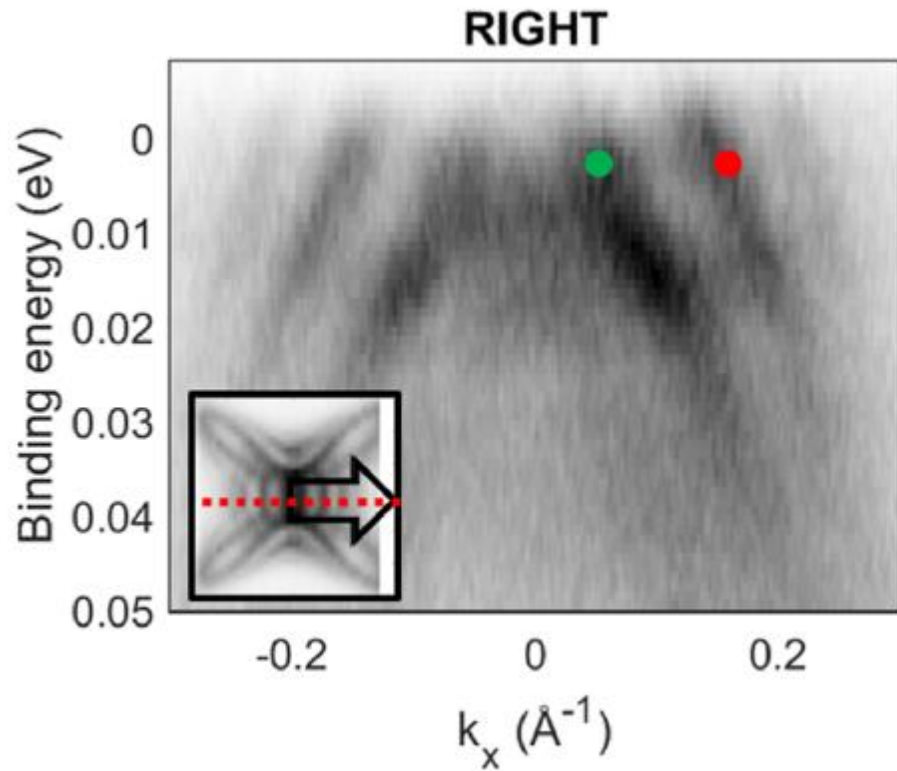
$$k_{env} = k_{ZB} - k_{Fermi}$$

$$\rho = \frac{\pi}{k_{env}}$$

P=5.1 ML and 9.1 ML
(doświadczalny poziom Fermiego)
P=6.8 ML and 10.9 ML
(teoretyczny poziom Fermiego)

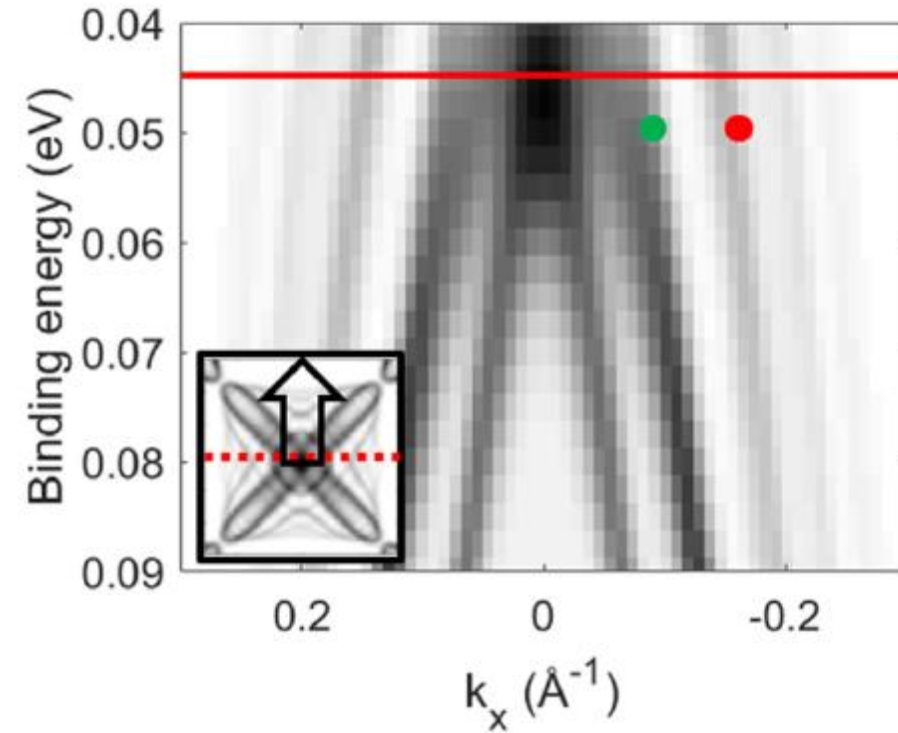
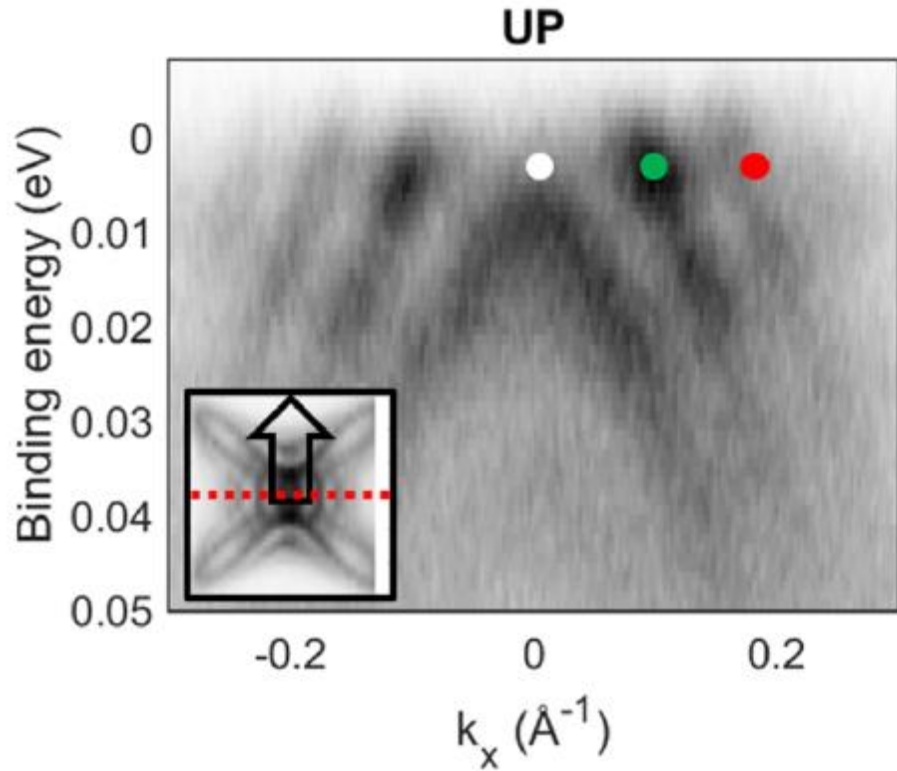
Studnie kwantowe wzdłuż linii Γ -H \leftrightarrow Fe[001]

Zależność od kierunku namagnesowania

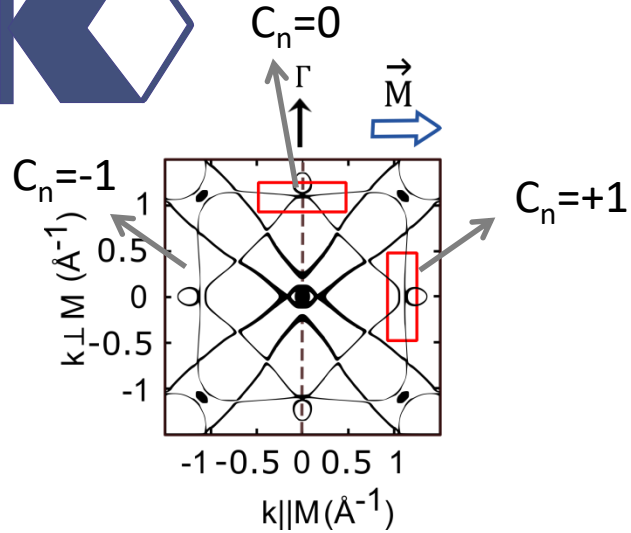


Studnie kwantowe wzdłuż linii Γ -H \leftrightarrow Fe[001]

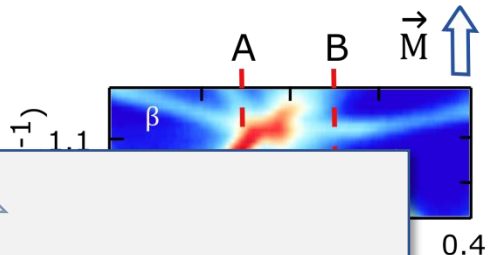
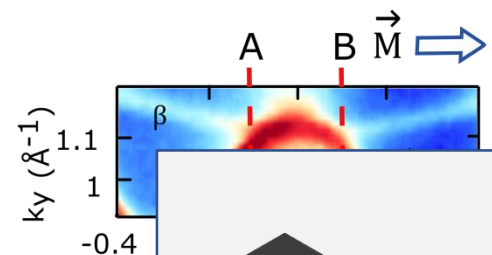
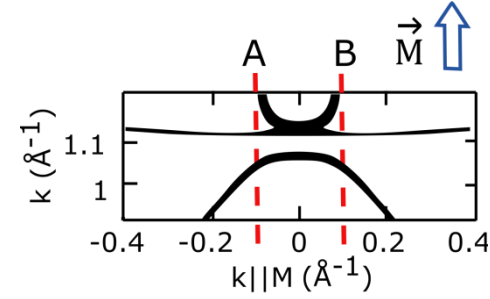
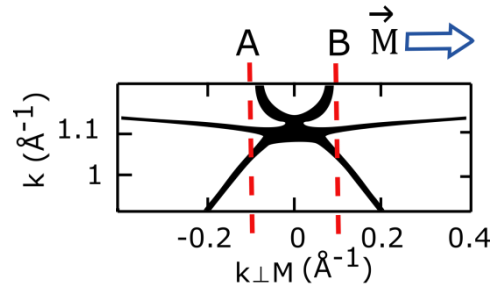
Zależność od kierunku namagnesowania



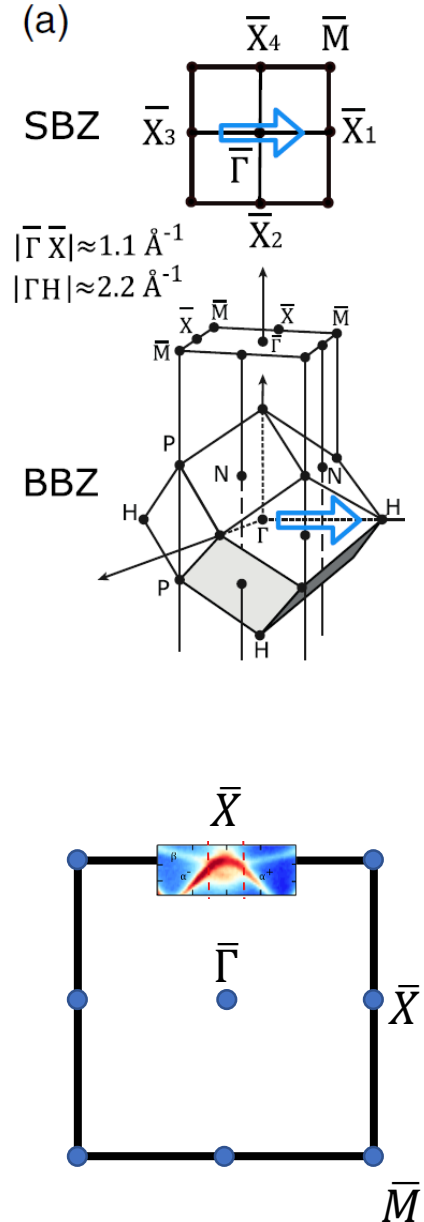
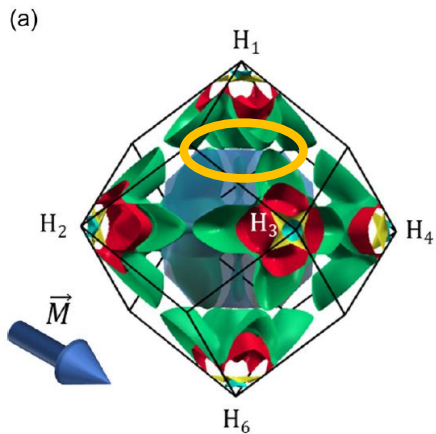
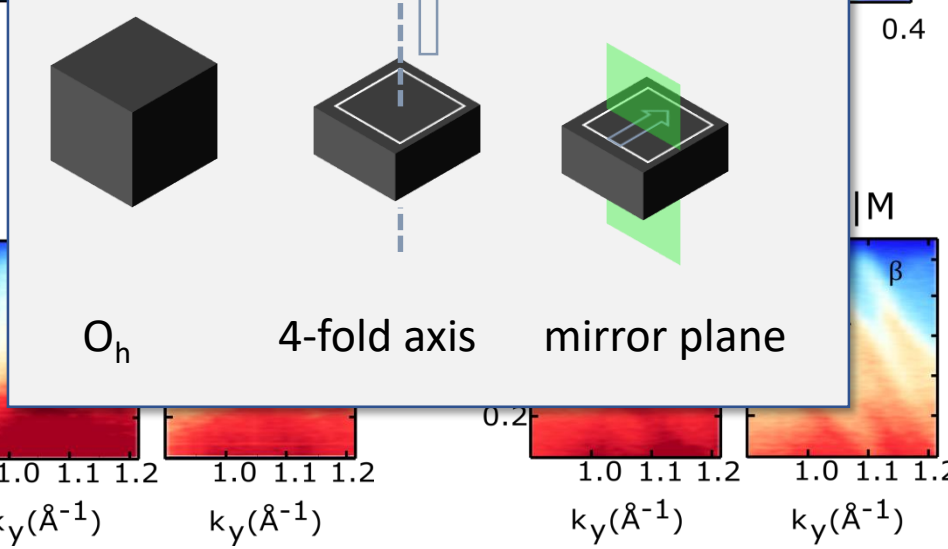
Przetwarzanie przerw spin-orbita



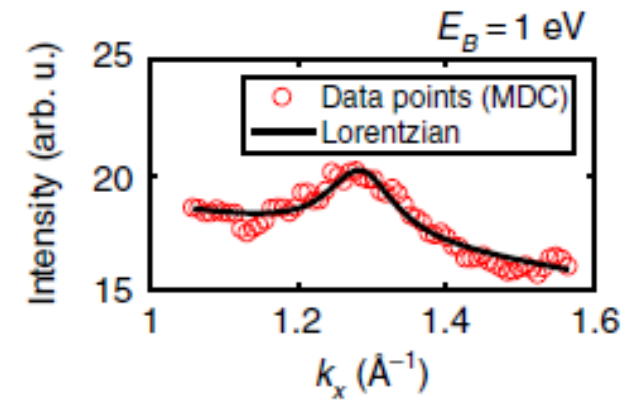
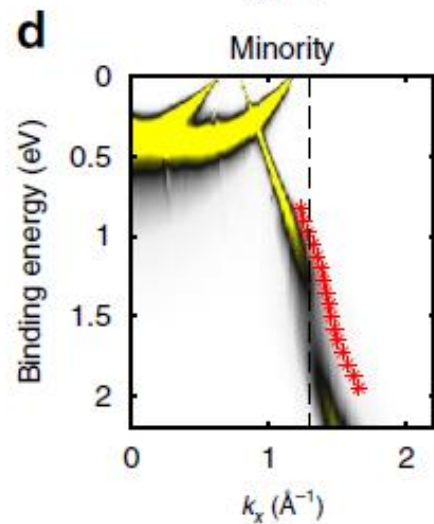
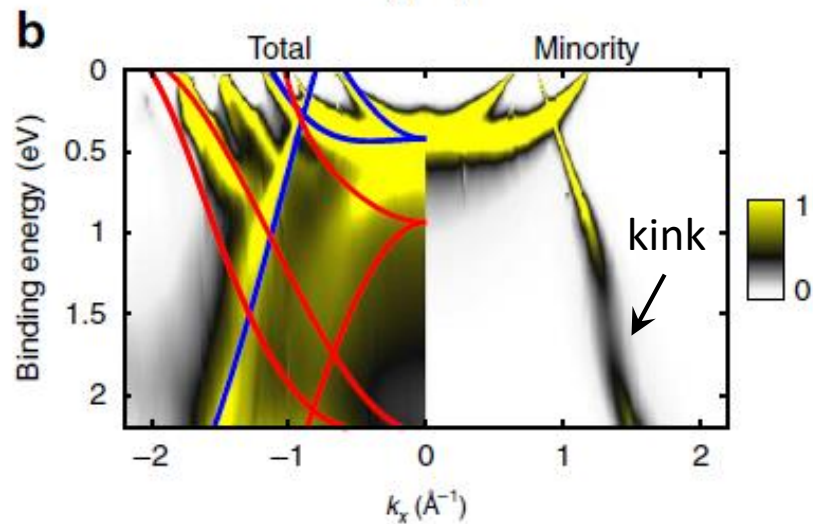
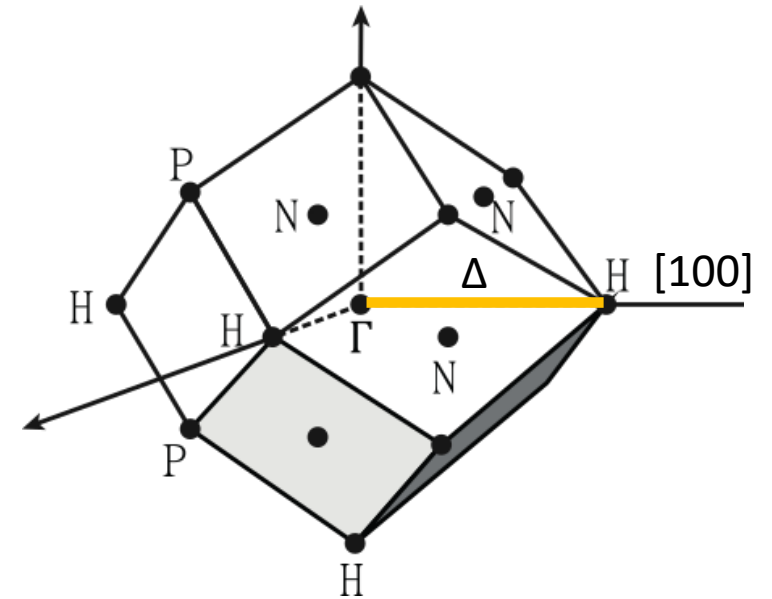
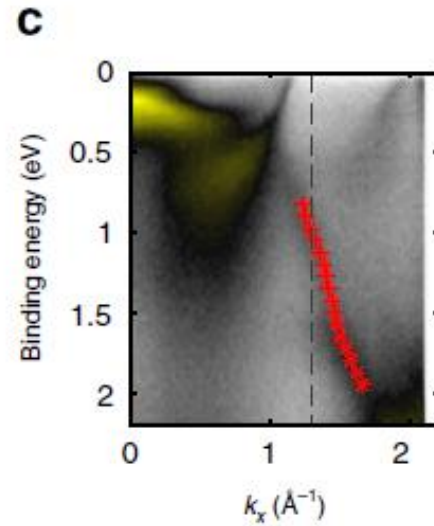
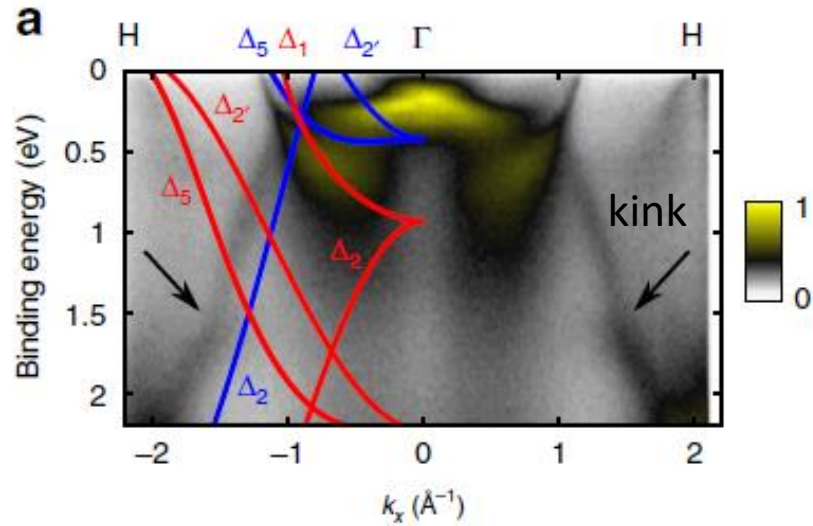
D. Gosálbez-Martínez et al.
Phys. Rev. B **92**, 085138 (2015)



$\Delta k \approx 0.1 \text{ \AA}^{-1}$
 $\Delta E \approx 0.1 \text{ eV}$



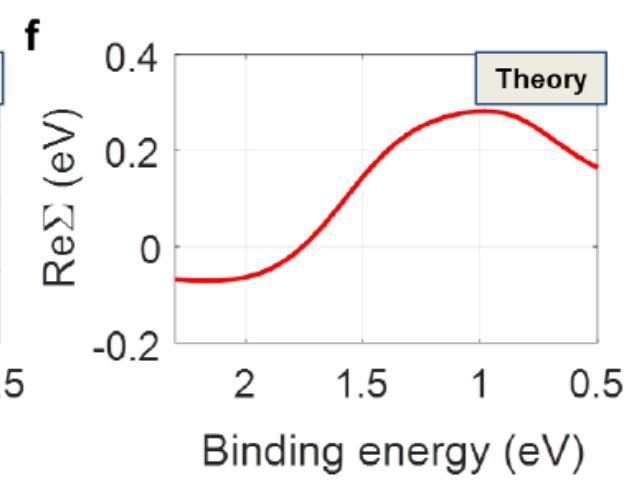
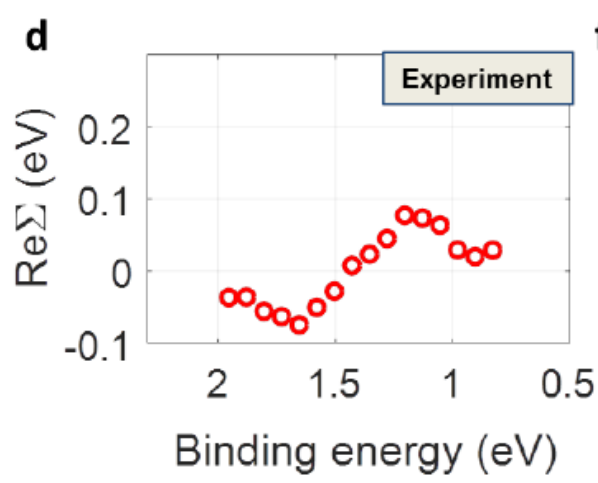
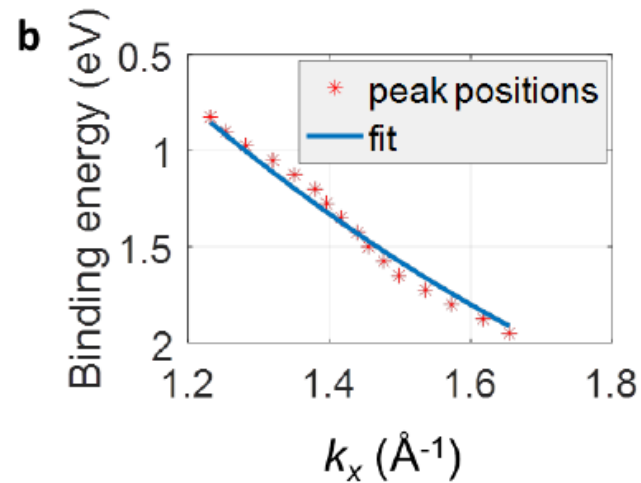
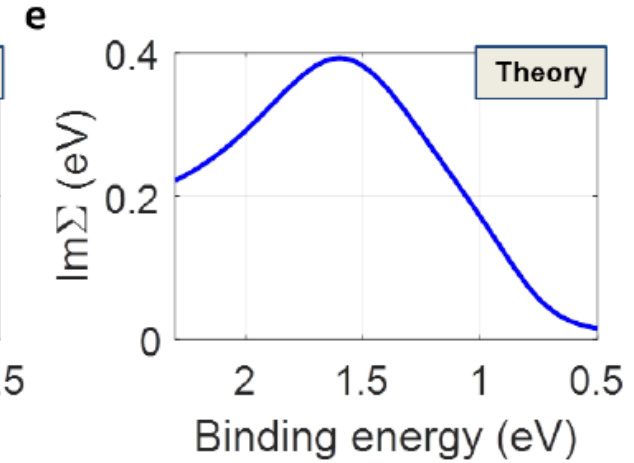
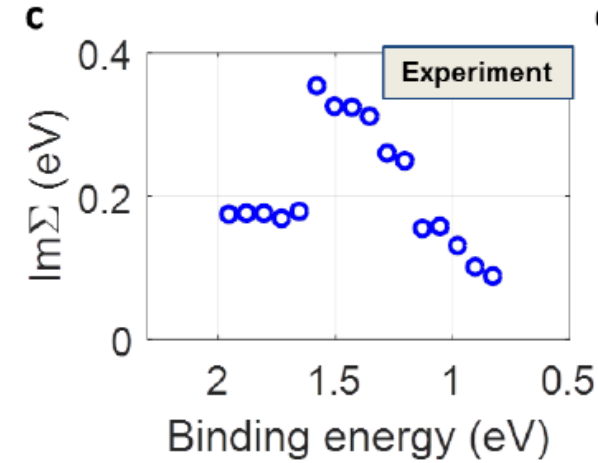
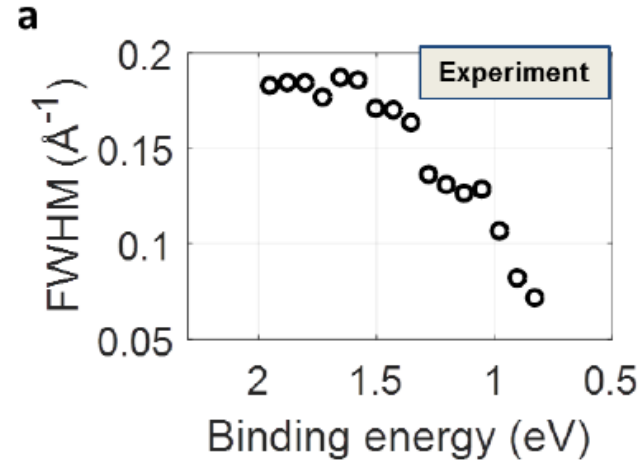
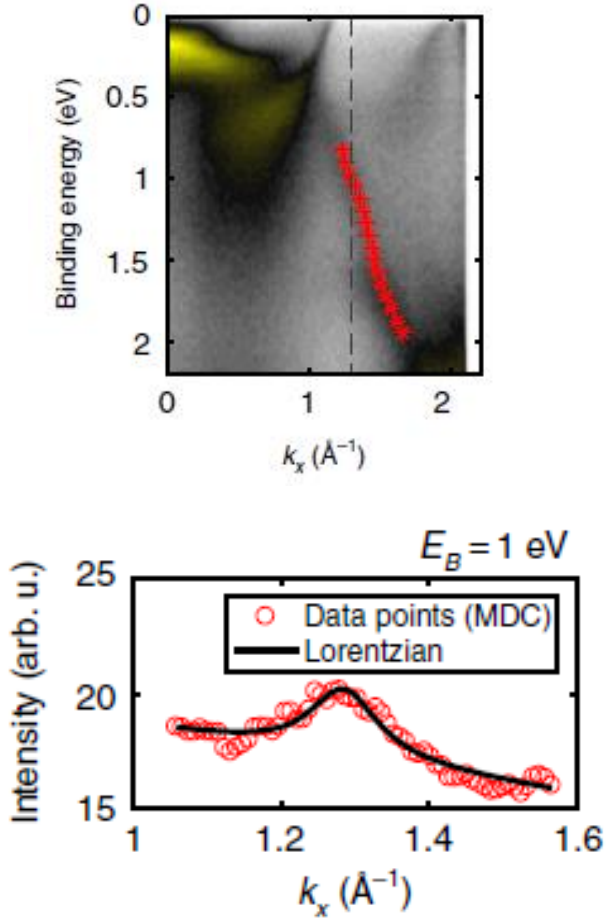
Dyspersje wzdłuż linii Γ -H \leftrightarrow Fe[001]



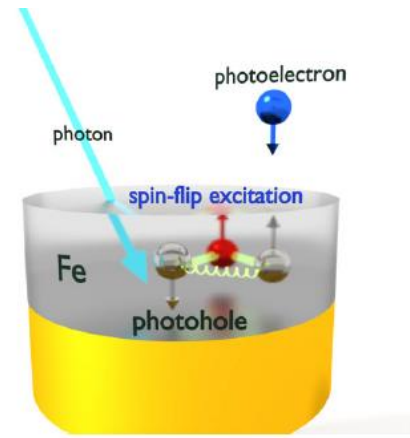
GT

Energia własna (Self energy)

Wkład do energii cząstki związany z oddziaływaniem cząstki z jej otoczeniem

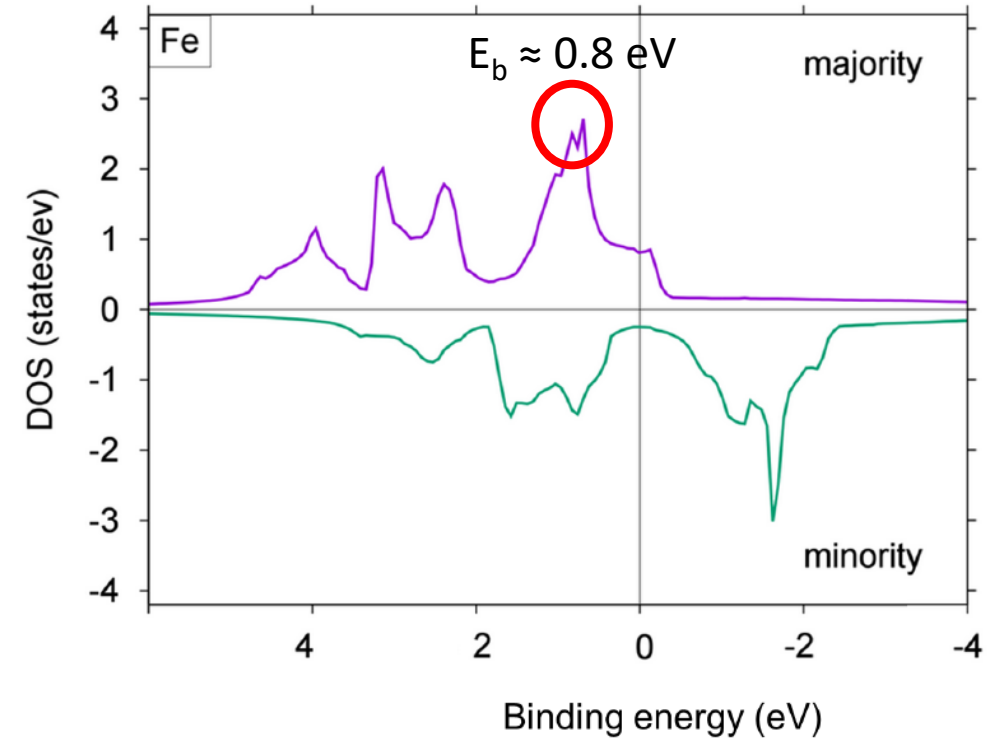
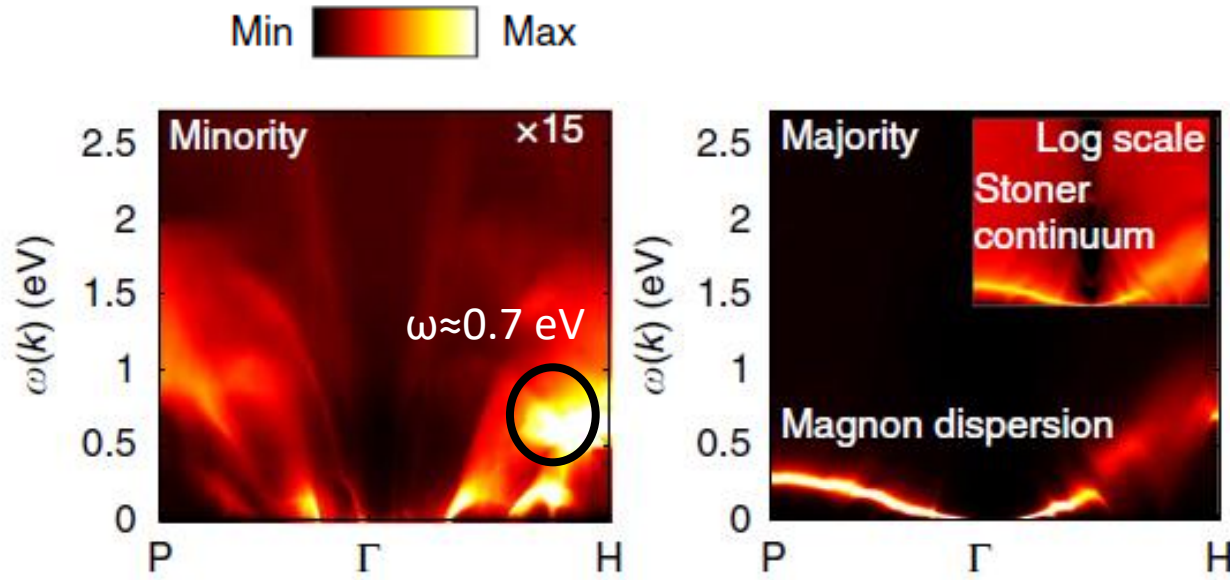


Oddziaływanie elektron-magnon

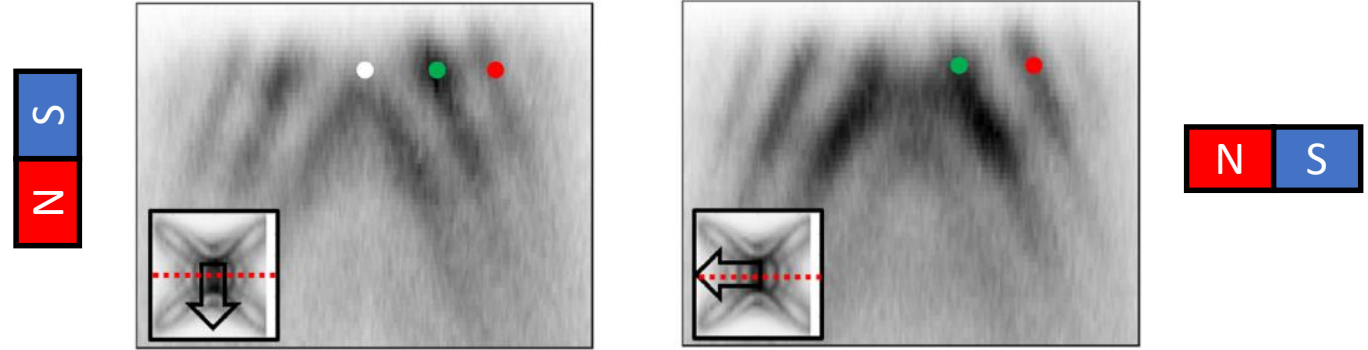


$$E_{anomaly} \approx 0.8 \text{ eV} + 0.7 \text{ eV} \approx 1.5 \text{ eV}$$

Spin wave (magnon)



Magnon dispersion calculations by M.C.T.D. Müller, C. Friedrich, FZJ PGI-1



Dziękuję za uwagę!

Zrozumienie struktury widzianej w eksperymencie – nie trywialne !

Widma ARPES są pełne wartościowych informacji o fizyce układu

- Efekty rozmiarowe (studnie kwantowe)
- Efekty fotoemisyjne (reguły wyboru, elementy macierzowe)
- Rola powierzchni (złamana symetria)
- Rola kierunku namagnesowania
- Rozmycie wektora falowego (zasada nieoznaczoności Heisenberga)

Po więcej szczegółów zapraszam do:

E. Młyńczak et al. 'Fermi surface manipulation by external magnetic field demonstrated for a prototypical ferromagnet', Phys. Rev. X 6, 041048 (2016)

E. Młyńczak et al. 'Kink far below the Fermi level reveals new electron-magnon scattering channel', Nature Comm.10, 505 (2019)

E. Młyńczak et al. 'Spin-polarized quantized electronic structure of Fe(001) with symmetry breaking due to the magnetization direction', Phys. Rev. B. 103,035134 (2021)

E. Młyńczak et al. 'Fe(001) angle resolved photoemission and intrinsic anomalous Hall conductivity in Fe seen by different ab initio approaches: LDA and GGA versus GW', PRB, submitted (2022)