

Szennyező atom mágneses anizotrópiája felület közelében

Szilva Attila V. évf.

Konzulens: Szunyogh László, Elméleti Fizika Tanszék

A Kondo ellenállás redukált dimenziójú híg mágneses ötvözetekben észlelt anomális viselkedésének [1] legvalószínűbb magyarázata a szennyező atom spinjének befagyása a felület és a spin-pálya kölcsönhatás együttes következményeképpen. [2,3] TDK dolgozatomban egy felület közeli szennyező atom mágneses anizotrópiáját vizsgálom abban az esetben, amikor az anizotrópiát a hordozó anyag atomjain fellépő spin-pálya kölcsönhatás indukálja. Az [2]-es cikkhez hasonlóan egy félig betöltött d -héjú, $5/2$ spinű szennyezőt vizsgálok és az elektron-spin kölcsönhatását egy Kondo Hamilton operátorral veszem figyelembe. A hordozó anyag vezetési elektronjainak leírásához szoros kötésű közelítést (tight-binding modellt) alkalmaztam, melyben az s és p típusú pályák közötti spin-pálya csatolást egzaktul (nem perturbatív módon) figyelembe vettem. Módszerünk alkalmas arra, hogy egy két-dimenziós transláció invariáns felület 'félvégtelen' geometriáját ugyancsak egzaktul kezelje. A vezetési elektronok sűrűségmátrixának felhasználásával a szennyező spin energianívóinak felhasadásának kiszámítására a kicserélődési kölcsönhatásban másodrendű perturbációs technikát használok másodrendig, ugyanis belátható, hogy az első rendű korrekció zérus. A numerikus eljárás eredményeképpen tehát ezen energiafelhasadást, azaz az anizotrópia energiát, kapjuk meg a szennyező atom felülettől mért távolságának függvényében.

A numerikus számolások megkezdése előtt sok analitikus munkát végeztem. A felületet jellemző tetragonális C_{4v} szimmetria és a két-dimenziós translációs invariancia kihasználásával igazoltam a sűrűségmátrix numerikus számítással megkapott szerkezetét. Itt a kulcslépést az jelentette, hogy a hordozó atomokra centrált s -pályákból a szennyező atom d -pályáival azonos szimmetriájú bázist keverjünk ki.

Első számításaim eredményeit összehasonlítom a korábban már vizsgált félig betöltött p -héjú, $3/2$ spinű szennyező esetével. Későbbiekben tervezem, hogy sp bázis helyett realisztikusabb spd bázist használok a hordozó anyag vezetési sávjának leírásában, különös tekintettel a spin-pálya kölcsönhatásra. Az ehhez szükséges előzetes levezetések a TDK munkámban közölni fogom.

Irodalom:

1. Guanlong Chen and N. Giordano, *Phy. Rev. Lett.* **66**, 209 (1991)
2. O. Újsághy, A. Zawadowski, and B.L. Györfly, *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 2378(1996)
3. L. Szunyogh, G. Zarand, C.M. Muñoz, and B.L. Györfly, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 067204 (2006)