

Горизонты физики

Микромагнитное моделирование

Бобков Григорий
gabobkov@mail.ru

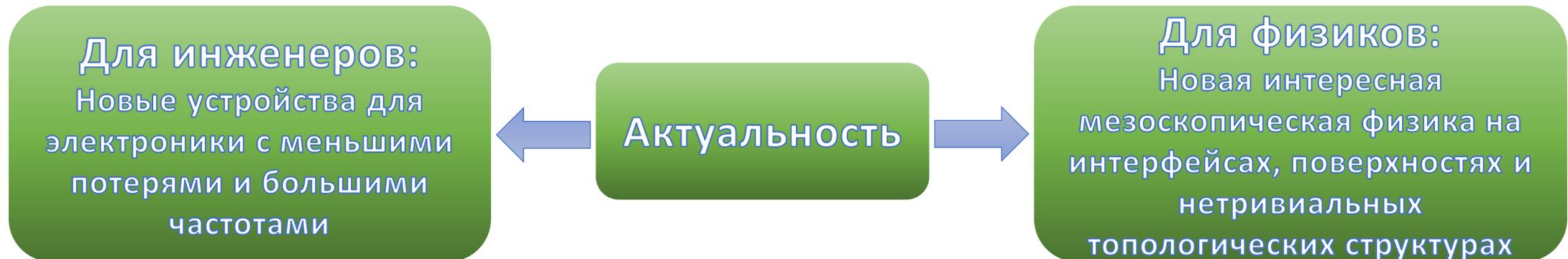
Кафедра фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур

План

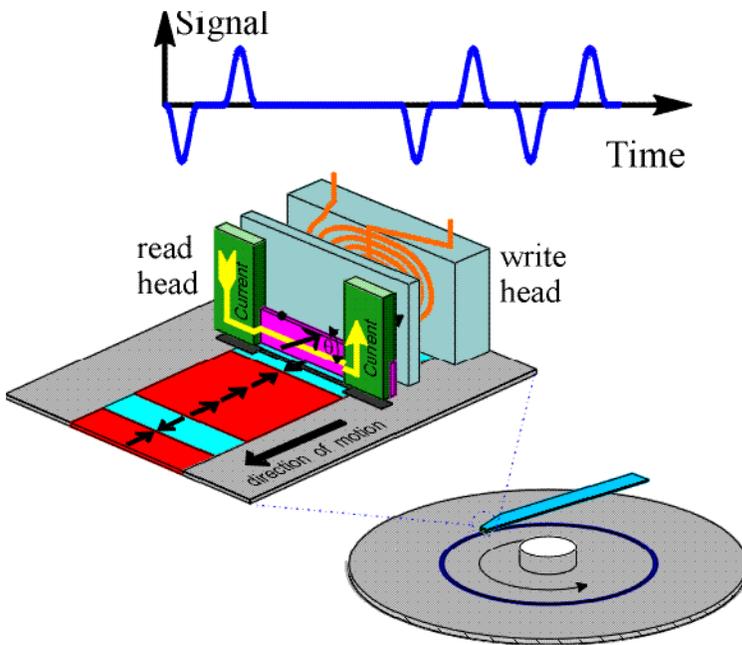
- **Спинтроника**, что это и для чего?
- Примеры магнитных структур. Что здесь изучают?
- Чем **мы** будем заниматься.
- Что нужно для зачета.

О чем вообще речь...

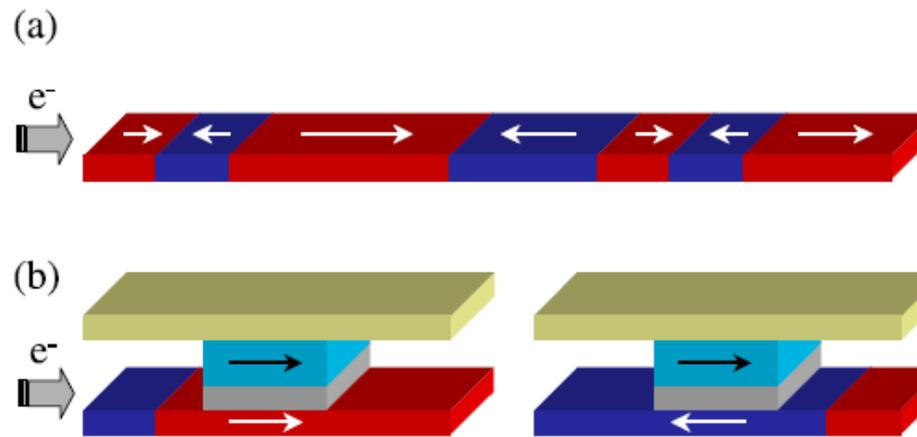
- **Микромагнитное моделирование** – численное исследование конфигурации и динамики магнитной системы – один из важных методов исследования в спинтронике.
- **Спинтроника** – в узком смысле раздел квантовой электроники, занимающийся изучением спинового тока (а не электрического!) в твердотельных устройствах. В широком – всех эффектов связанных со спином.



Практическое применение

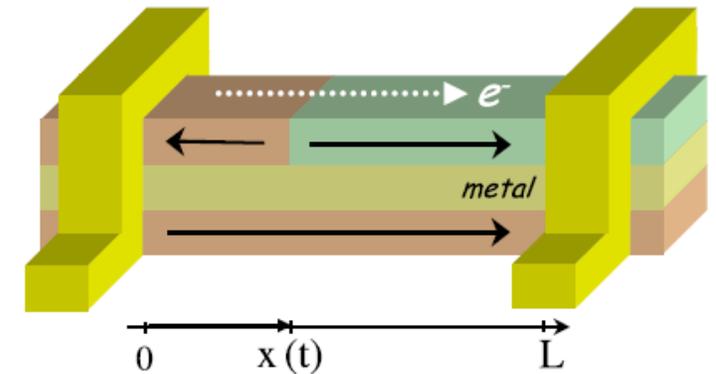


Текущая технология – Жесткий диск



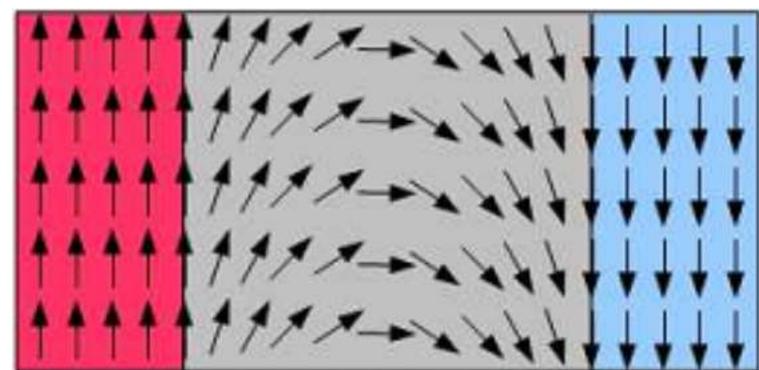
Применение спинтроники:
Race-track Memory

(a) GMR structure:

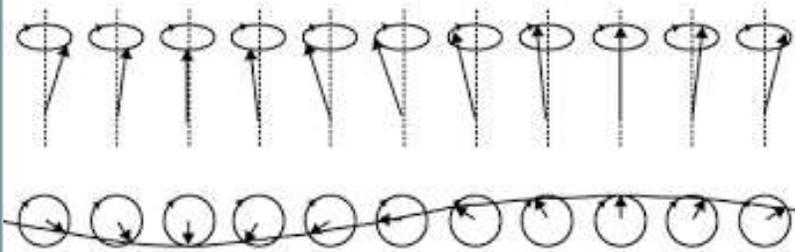


Мемристор – искусственный аналог синапсов нейронных сетей. Параметры изменяются пропорционально интегральному внешнему возмущению

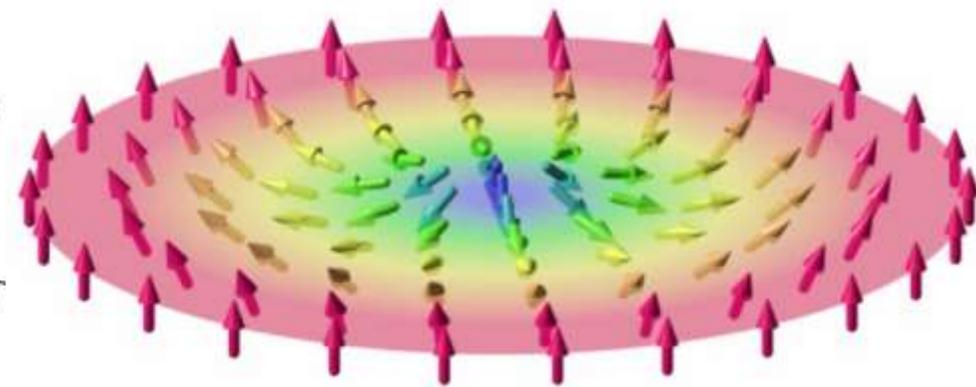
Разнообразные нетривиальные магнитные конфигурации



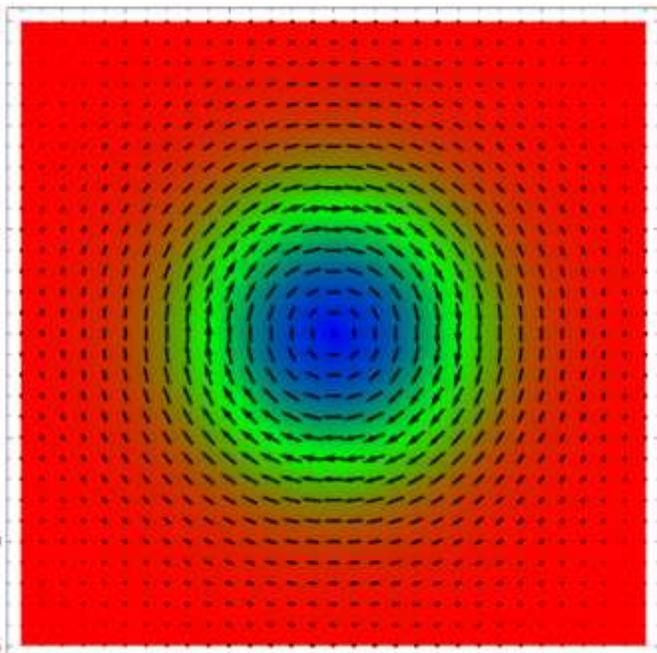
Доменная стенка



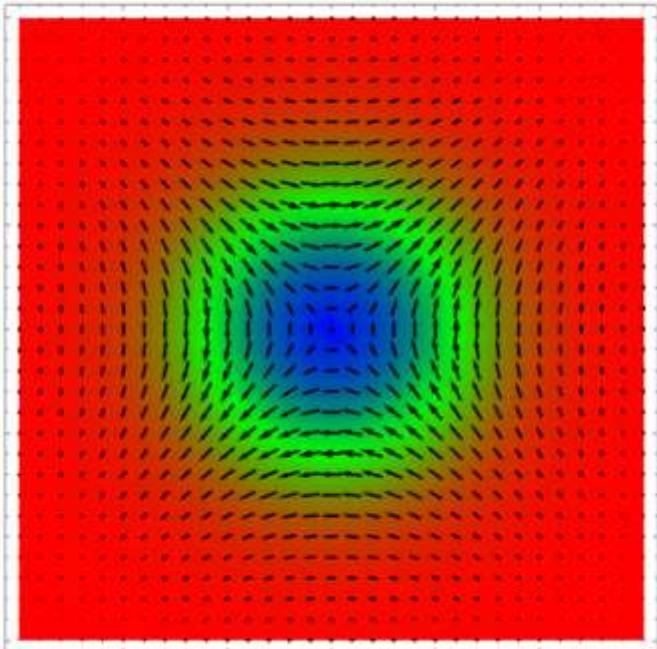
Магنون



Скирмион

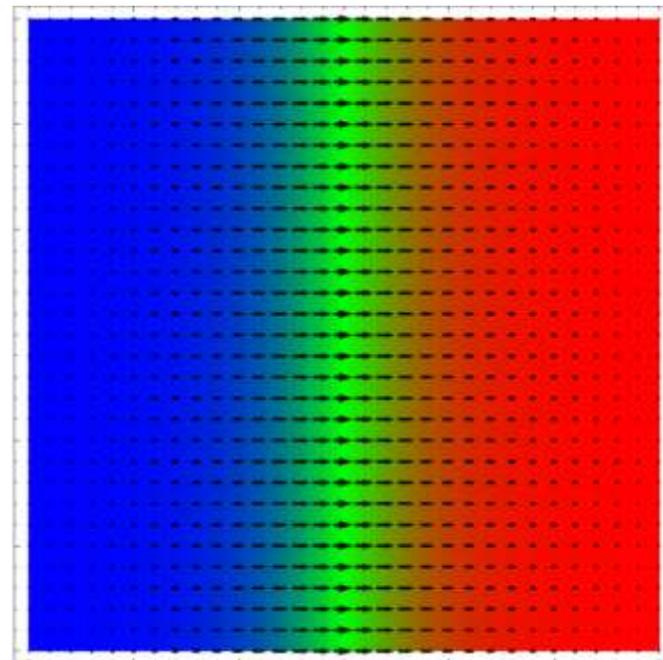


Скирмион

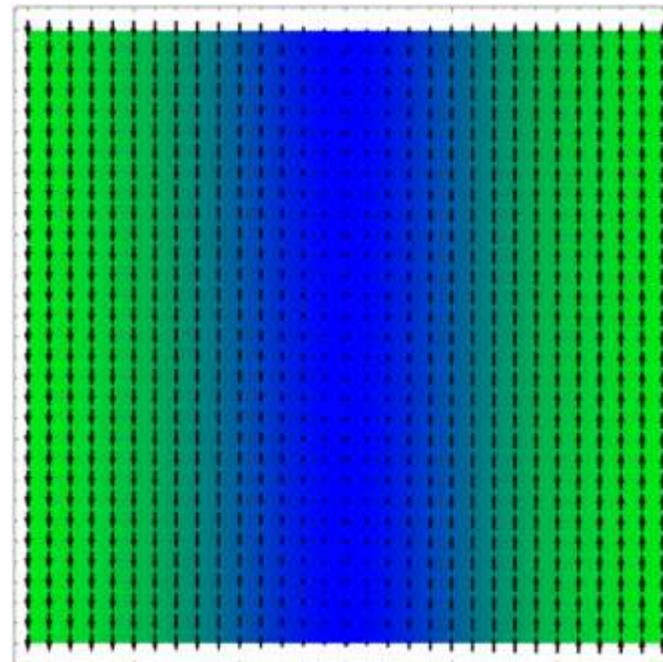


Антискирмион

Доменная стенка
(Неелевская)

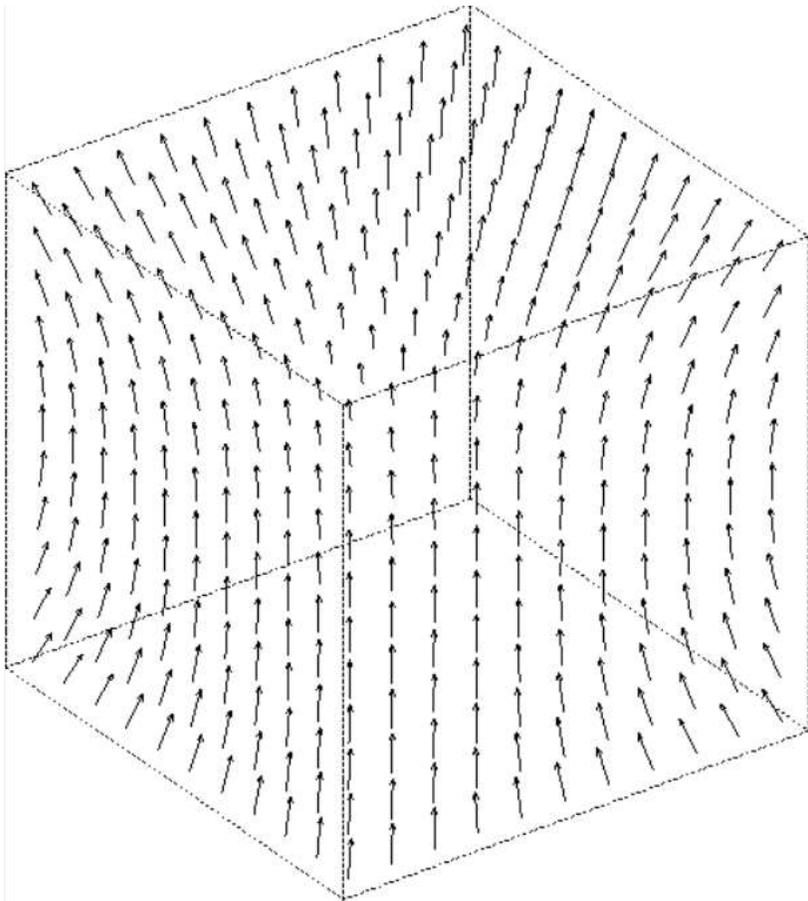


Доменная стенка
(Блоховская)

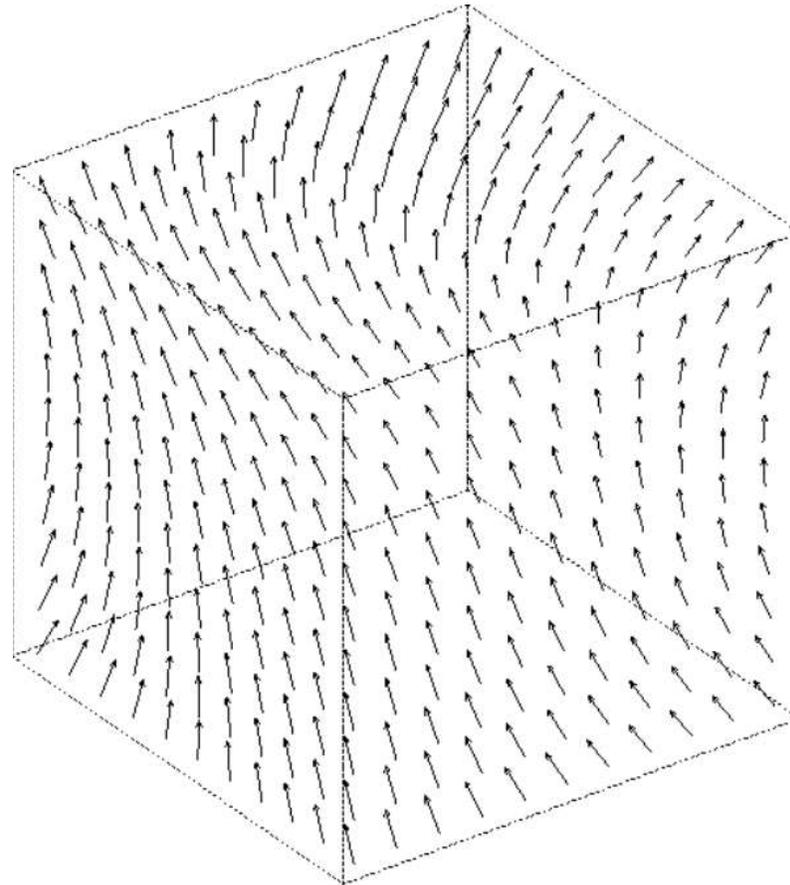


Равновесные конфигурации намагниченности

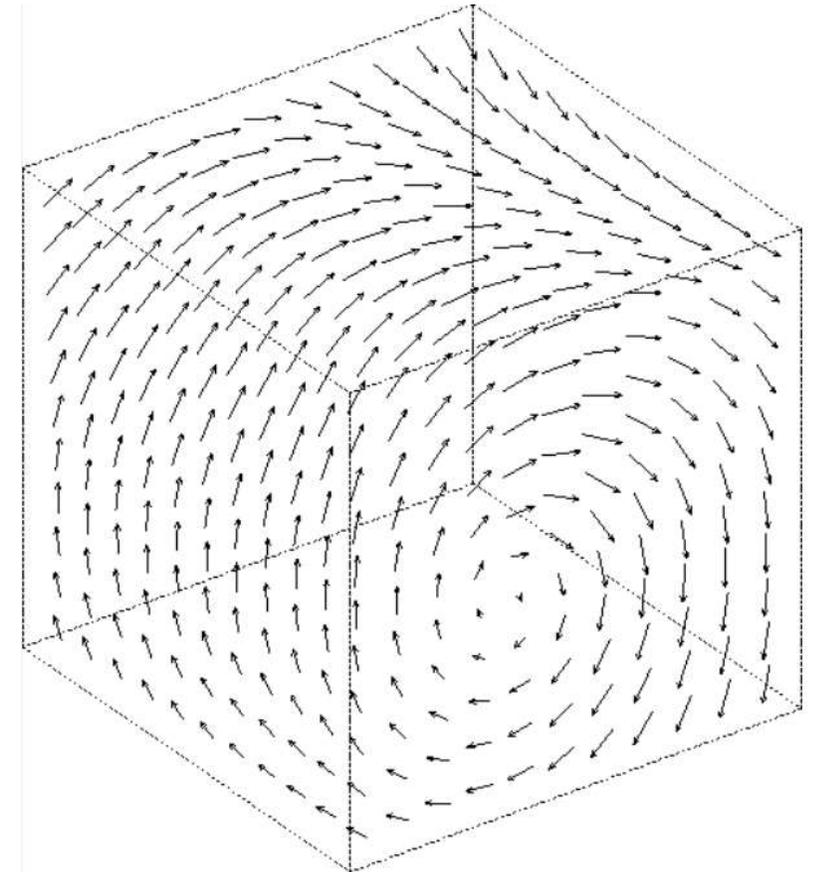
Flower



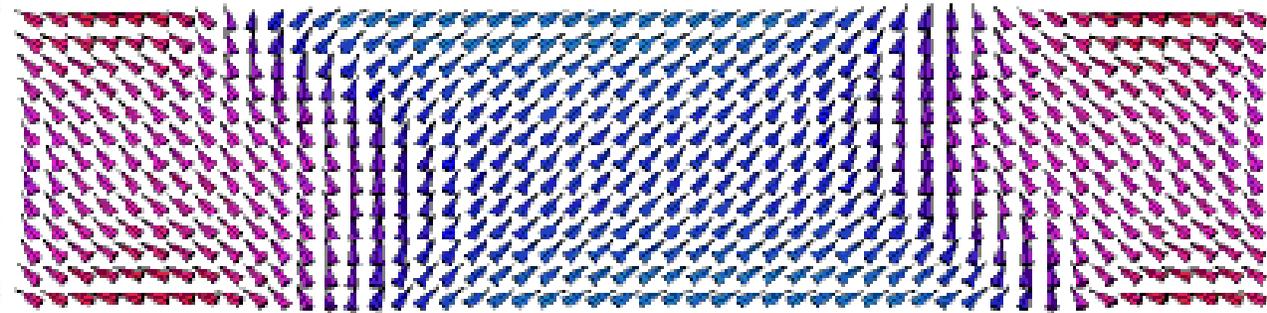
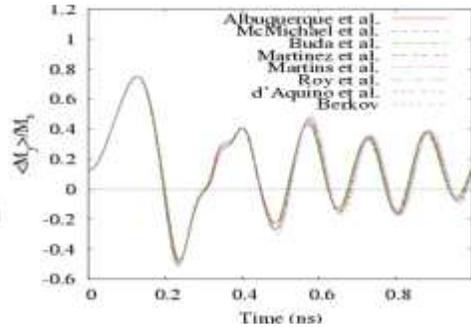
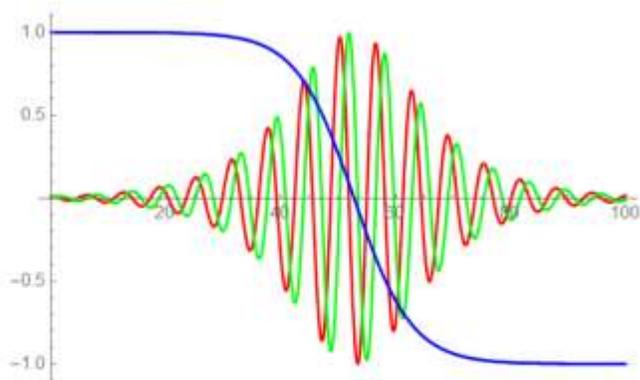
Twisted



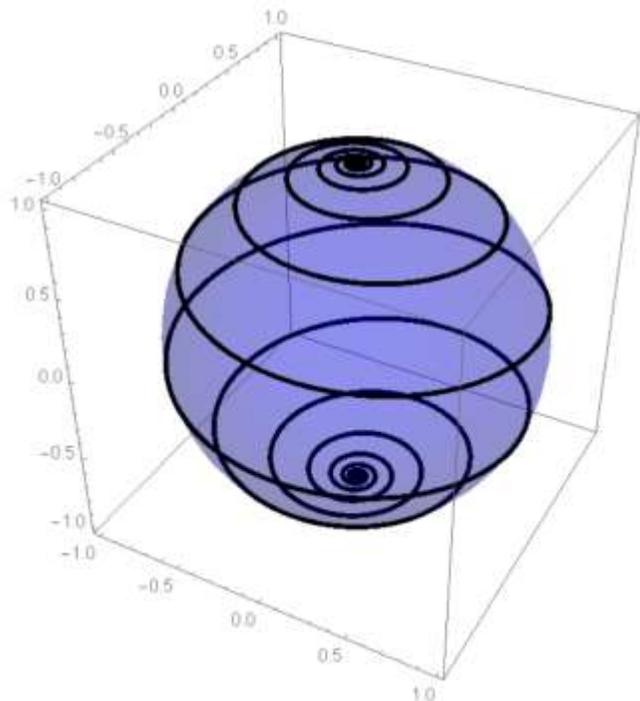
Vortex



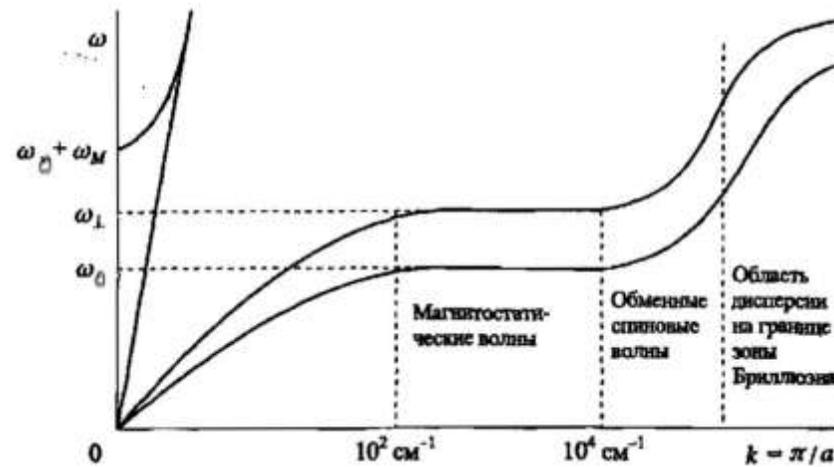
Динамика намагниченности



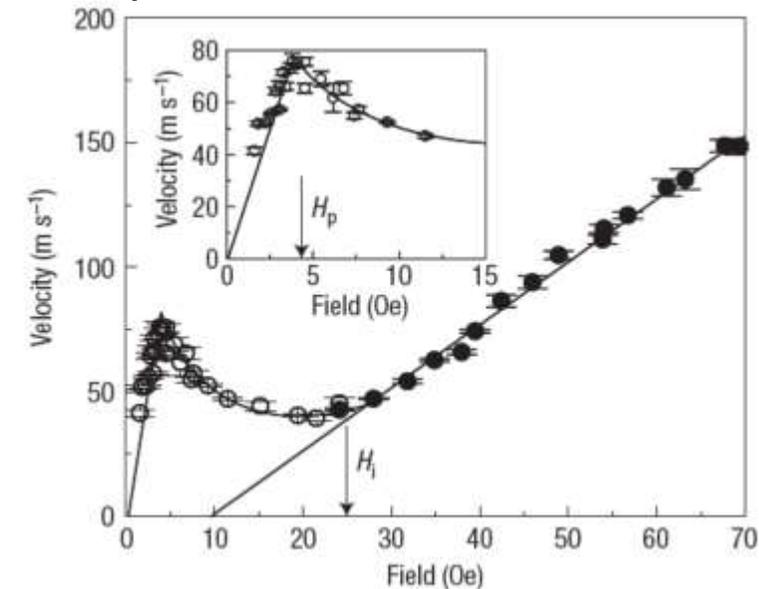
Перестройка намагниченности образца конечного размера из-за импульса поля



Переворот однородной намагниченности полем



Спектр элементарных возбуждений - магнонов



Скорость движения доменной стенки магнитным полем

Чем мы будем заниматься

Самостоятельно писать программы для описания динамики намагниченности в различных системах. (Численное решение уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта)

- Динамика однородной намагниченности (ферромагнитный резонанс)
- Движение доменных стенок магнитным полем.
- Изучение стабильной (метастабильной) конфигурации намагниченности в конкретной геометрии
- Влияние геометрии образца на динамику намагниченности и распространение спиновых волн

Что лежит в основе

- ☉ Каждый атом обладает собственным моментом импульса – спином $\frac{\hbar}{2}$
- ☉ Магнитный момент атома пропорционален моменту импульса $M = -\gamma \frac{\hbar}{2}$
- ☉ Магнитное поле оказывает момент сил на магнитный момент $M \times H$

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t}$$

H_{eff} - эффективное поле, складывающееся из всего, что есть в системе:
обменное поле, поле анизотропии, внешнее поле, поле рассеянных полей и т.д.

Зачет

- Сначала (для тренировки) решение нескольких простых задач.
(Если вы уже решали численно какое-нибудь уравнение, каждая задача наверное займет у вас не более часа)
- Потом выбрать одну из предложенных задач (более сложных) и в течении семестра её решить
- В процессе решения мы вам будем всячески помогать, как и положено в нормальной научной группе

Квантовые явления в материалах нового поколения

Направления исследований

- двумерные материалы
 - наноматериалы
 - сверхпроводники
 - метаматериалы
-

LK - 99

В начале прошлого месяца научное сообщество облетела новость о возможном прорыве: вещество под названием LK-99 якобы является комнатно-температурным сверхпроводником.



상온 초전도체 개발했다는 연구에 논란...왜? / SBS / 1분하트뉴스

931 тыс. просмотров · 1 месяц назад

SBS 뉴스

과학계의 난제인 상온 초전도체를 한국 연구진이 개발했다는 논문이 나와 논란이 일고 있습니다. 상온 초전도체는 과학계에서 발표와 ...



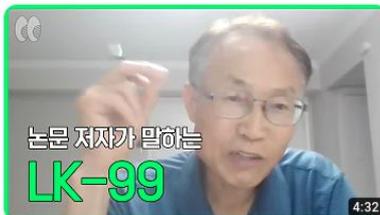
【最新消息】傳說中的常溫超導體，現在進度怎麼樣了？

925 тыс. просмотров · 3 недели назад

啾啾鞋

討論度爆表的常溫常壓超導體，現在經過了三個禮拜的實驗驗證，證實根本不是夢寐以求的超導體，甚至LK-99本身還是個絕緣體？

4K



"LK-99 초전도체 맞다" 논문 저자 김현탁 박사 만나 봄 | 신문물** Ep3

809 тыс. просмотров · 1 месяц назад

SEIZE 씨즈

8월 3일, LK-99 검증 과정에 참여한 김현탁 박사를 씨즈가 만나봤습니다. 아직 LK-99가 상온, 상압 초전도체나 아니냐에 대한 검증이 ...

Субтитры



事実なら世界が激変する世紀の大発見...「室温超伝導」を実現したとする論文が公開 4人の研究者に聞く【橋本幸治の理系通信】(2023年8月3日)

808 тыс. просмотров · 1 месяц назад

テレ東BIZ

韓国の研究チームが、世界で初めて、「常温常圧」で超伝導状態を示す物質「LK-99」を合成することに成功したと発表し、世界 ...

LK - 99

В начале прошлого месяца научное сообщество облетела новость о возможном прорыве: вещество под названием LK-99 якобы является комнатно-температурным сверхпроводником.



"World-changing" LK-99 Superconductor explained quickly

1 млн просмотров · 1 месяц назад

Fireship

What is a superconductor? LK-99 claims to be the first room-temperature superconductor, and if true, it could revolutionize the ...

4K



LK-99 Superconductor Breakthrough - Why it MATTERS!

1,7 млн просмотров · 1 месяц назад

Two Bit da Vinci

Is this the Biggest Discovery of the Century? Physics has always been my favorite field of study. Everything from how planes fly, ...

4K Субтитры



Introduction | What we Know | What is a Superconductor? | The Controversy | The Timeline | The... Эпизоды (8) ▾



LK-99 - South Korea's Room-Temperature Superconductor?

32 тыс. просмотров · 7 дней назад

Science Unbound

Unlock the secrets of a potential game-changing discovery! Dive into the thrilling world of room-temperature superconductors with ...



LK-99 Superconductor Update, Was It Just Contamination?

235 тыс. просмотров · 4 недели назад

Anton Petrov

0:00 Magical two weeks 0:35 New video from the original authors 1:55 Amazing new video? Ugh...no 2:55 More positive results?

4K

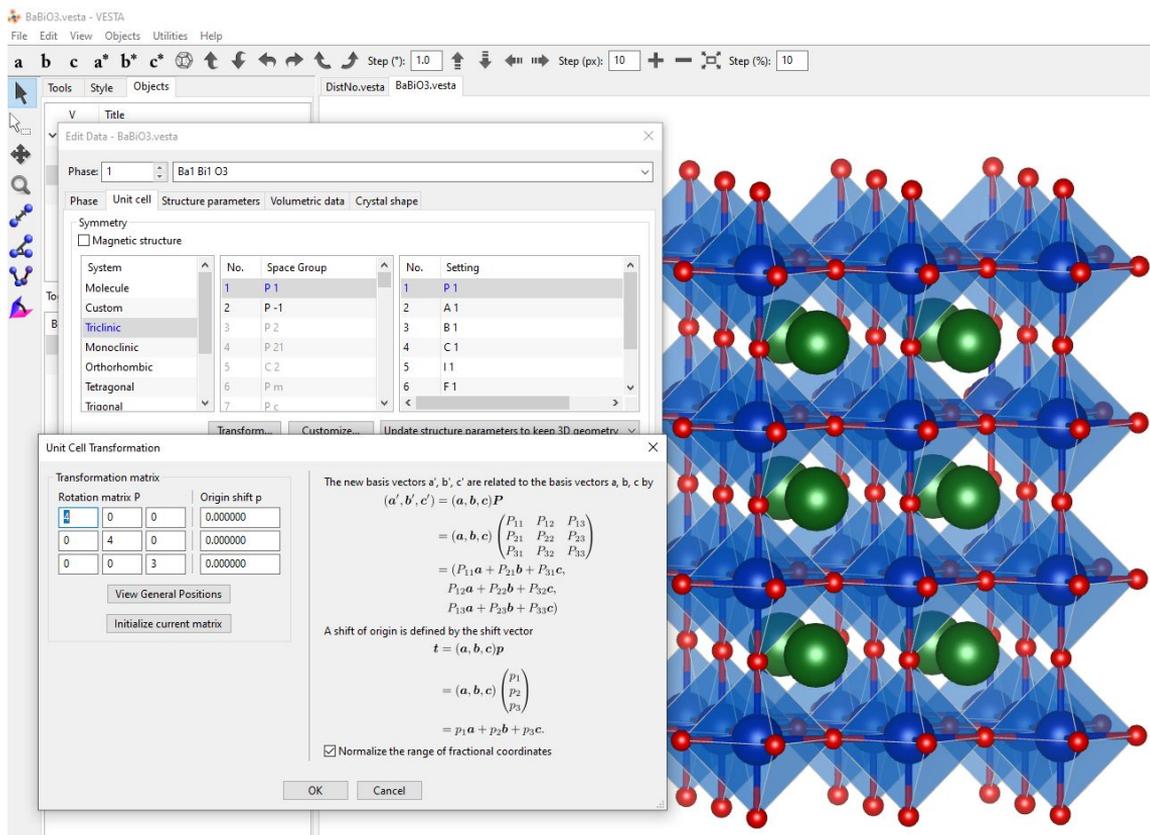


Magical two weeks | New video from the original authors | Amazing new video? Ugh...no | More... Эпизоды (13) ▾

Рабочий процесс

Создание кристаллической структуры

Файл, содержащий информацию о кристаллической структуре исследуемого вещества, можно скачать из доступных баз данных или сделать самостоятельно, зная параметры кристаллической решетки. Один из программных пакетов, который позволяет это делать, – Vesta.



The screenshot displays the VESTA software interface. The main window shows a 3D crystal structure model with blue and red spheres representing atoms. Two dialog boxes are open:

Edit Data - BaBiO3.vesta

Phase: 1 Ba1 Bi1 O3

Phase Unit cell Structure parameters Volumetric data Crystal shape

Magnetic structure

System	No.	Space Group	No.	Setting
Molecule	1	P 1	1	P 1
Custom	2	P -1	2	A 1
Triclinic	3	P 2	3	B 1
Monoclinic	4	P 21	4	C 1
Orthorhombic	5	C 2	5	I 1
Tetragonal	6	P m	6	F 1
Trigonal	7	P c		

Unit Cell Transformation

Transformation matrix

Rotation matrix P	Origin shift p		
0	0	0.000000	
0	4	0.000000	
0	0	3	0.000000

The new basis vectors a', b', c' are related to the basis vectors a, b, c by

$$(a', b', c') = (a, b, c)P$$
$$= (a, b, c) \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{pmatrix}$$
$$= (P_{11}a + P_{21}b + P_{31}c, P_{12}a + P_{22}b + P_{32}c, P_{13}a + P_{23}b + P_{33}c)$$

A shift of origin is defined by the shift vector

$$t = (a, b, c)p$$
$$= (a, b, c) \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}$$
$$= p_1a + p_2b + p_3c.$$

Normalize the range of fractional coordinates

Запуск расчета из первых принципов

Теория функционала плотности (DFT, Density Functional Theory) – хорошо апробированный метод, на котором основаны расчеты из первых принципов. За разработку этого метода была присуждена Нобелевская премия. Существует много пакетов, реализующих расчеты в рамках DFT. Для работы с одними пакетами (например, с Wien2k) есть интерфейс, взаимодействие с другими (например, с Quantum Espresso) происходит через консоль.

```
#!/bin/bash
#
#SBATCH --partition=cpu
#SBATCH --job-name=bbo_0.10
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --tasks-per-node=4
#SBATCH --cpus-per-task=4
#SBATCH --time=100:00:00
#SBATCH --output=comp_log_%j
#

i=0.10
path_to_qe=/mnt/pool/5/alexloner/qe_tensor/bin
export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
source /opt/fftw-3.3.9/double/customvars.sh
source /opt/openblas-0.3.13/customvars.sh
echo "$(date)"

cd /mnt/pool/5/alexloner/bbo/bbo_${i}
mpirun ${path_to_qe}/pw.x < ./bbo_${i}.in > ./bbo_${i}.out
echo "${i} scf done $(date)"
mpirun ${path_to_qe}/pw.x < ./bands_${i}.in > ./bands_${i}.out
echo "${i} bands done $(date)"
mpirun ${path_to_qe}/ph.x < ./ph_${i}.in > ./ph_${i}.out
echo "${i} ph done $(date)"
mpirun ${path_to_qe}/pw.x < ./bbo_${i}_nscf.in > ./bbo_${i}_nscf.out
echo "${i} nscf done $(date)"

${path_to_qe}/wannier90.x -pp ./bbo_${i}.win
echo "${i} wan pp done $(date)"
mpirun ${path_to_qe}/pw2wannier90.x < ./bbo_${i}.pw2wan > ./bbo_${i}.pw2wan.out
echo "${i} pw2wan done $(date)"
${path_to_qe}/wannier90.x ./bbo_${i}.win
echo "${i} xsf done $(date)"
rm -rf UNK*.1
█
~
~
```

Запуск расчета из первых принципов

```
[1]: 1 from ase.io import read

[2]: 1 atoms = read('BB0_exc.cif')
    ...

[3]: 1 from ase.build import bulk
    2 from gpaw import GPAW, PW, FermiDirac
    3
    4 # Perform standard ground state calculation (with plane wave basis)
    5 calc = GPAW(mode=PW(200),
    6             ...)
```

Origin of correlated isolated flat bands in copper-substituted lead phosphate apatite

Sinéad M. Griffin^{1,2}

¹*Materials Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, 94720, USA and*

²*Molecular Foundry Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, 94720, USA*

(Dated: August 4, 2023)

A recent report of room temperature superconductivity at ambient pressure in Cu-substituted apatite ('LK99') has invigorated interest in the understanding of what materials and mechanisms can allow for high-temperature superconductivity. Here I perform density functional theory calculations on Cu-substituted lead phosphate apatite, identifying correlated isolated flat bands at the Fermi level, a common signature of high transition temperatures in already-established families of superconductors. I elucidate the origins of these isolated bands as arising from a structural distortion induced by the Cu ions and a chiral charge density wave from the Pb lone pairs. These results suggest that a minimal two-band model can encompass much of the low-energy physics in this system. Finally, I discuss the implications of my results on possible superconductivity in Cu-doped apatite.

Работа с аналитическими выражениями

Иногда приходится иметь дело со сложными выкладками.

$$\epsilon = 1 + \left\{ \frac{1}{\epsilon(0) - 1} + \alpha \left(\frac{q}{q_{TF}} \right)^2 + \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega_p^2} \right\}^{-1} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{COH}^{st} &= \frac{1}{2} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \rho(\mathbf{r}))} - 1 \right] = \\ &= \frac{e^2}{4\pi^2} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underbrace{\int d^3 \mathbf{q} \frac{1}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \rho(\mathbf{r}))} - 1 \right]}_I \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty q^2 dq \frac{1}{q^2} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \rho(\mathbf{r}))} - 1 \right] = 4\pi \int_0^\infty dq \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \rho(\mathbf{r}))} - 1 \right] = \\ &= -4\pi \int_0^\infty dq \frac{\left\{ \frac{1}{\epsilon(0) - 1} + \alpha \left(\frac{q}{q_{TF}} \right)^2 + \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega_p^2} \right\}^{-1}}{1 + \left\{ \dots \right\}^{-1}} = -4\pi \int_0^\infty dq \frac{1}{1 + \frac{1}{\epsilon(0) - 1} + \alpha \left(\frac{q}{q_{TF}} \right)^2 + \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega_p^2}} = \\ &= -4\pi \int_0^\infty dq \frac{1}{\underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{4m^2 \omega_p^2} \right)}_\gamma \underbrace{\left(\frac{4m^2 \omega_p^2}{\hbar^2} \cdot \left(1 + \frac{1}{\epsilon(0) - 1} \right) \right)}_b + \underbrace{\frac{4m^2 \omega_p^2}{\hbar^2} \cdot \frac{\alpha}{q_{TF}^2} \cdot q^2 + q^4}_a} = \\ &= -\frac{4\pi}{\gamma} \int_0^\infty \frac{dq}{b + aq^2 + q^4} = -\frac{4\pi}{\gamma} I_0 \end{aligned} \quad (3)$$

where

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega_p^2}, \quad b = \frac{1}{\gamma} \cdot \left(1 + \frac{1}{\epsilon(0) - 1} \right), \quad a = \frac{1}{\gamma} \cdot \frac{\alpha}{q_{TF}^2} \quad (4)$$

Разработка собственного кода

Использование существующих

```
#-----  
def set_screening_length(self, d=0):  
    cb = [2, 3]  
    vb = [0, 1]  
    chi2D = 0  
    vel = np.einsum("xyac,xycd,xybd->xyab", self.D.conj(), self.velocity[d], self.D)  
    vel /= Hartree * Bohr  
    dE = (self.E[:, :, :, None] - self.E[:, :, None, :]) / Hartree  
    for i in vb:  
        for j in cb:  
            chi2D += 2 * np.sum(vel[:, :, i, j] ** 2 / dE[:, :, j, i] ** 3)  
    chi2D /= self.N2  
    self.r0 = 2 * np.pi * chi2D.real  
    print(r"Screening length [A]:", self.r0)  
  
#-----  
def set_screened_potential(self, epsilon=2):  
    norb = self.D.shape[3]  
    self.eps = np.zeros((self.N, self.N, norb, norb), dtype=complex)  
    self.W = np.zeros((self.N, self.N, norb, norb), dtype=complex)  
    self.f = np.array(self.E <= self.fermi, dtype=int)  
  
    pol = polarization(  
        np.zeros((self.N, self.N, norb, norb), dtype=complex),  
        self.E,
```

No superconductivity in $\text{Pb}_9\text{Cu}_1(\text{PO}_4)_6\text{O}$ found in orbital and spin fluctuation exchange calculations

Niklas Witt ^{1,2} Liang Si ^{3,4} Jan M. Tomczak ^{5,4} Karsten Held ^{4,*} and Tim Wehling ^{1,2,*}

¹*I. Institute for Theoretical Physics, University of Hamburg, Notkestraße 9-11, 22607 Hamburg, Germany*

²*The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging, Luruper Chaussee 149, 22607 Hamburg, Germany*

³*School of Physics, Northwest University, Xi'an 710127, China*

⁴*Institute of Solid State Physics, TU Wien, 1040 Vienna, Austria*

⁵*Department of Physics, King's College London, Strand, London WC2R 2LS, United Kingdom*

(Dated: August 15, 2023)

— Игра в шахматы и кофе-брейки

Отдыхать тоже иногда нужно.

На картинке белые ходят и
выигрывают.



Задача

Имеется двумерный массив данных, характеризующий плотность частицы. Необходимо аппроксимировать зашумленные экспериментальные данные известной аналитической функцией и найти параметры частицы - характерный размер (r_0) и положение центра (x_0, y_0).

Данные:

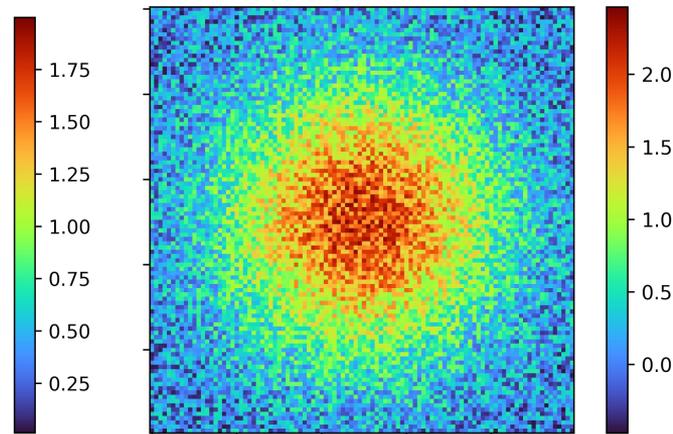
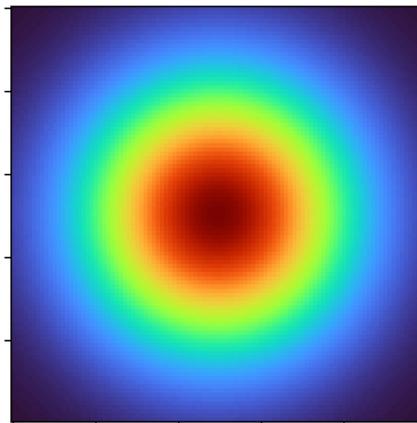
Одномерный массив "x"

Одномерный массив "y"

Двумерный массив "z" = $f(x, y)$

Вид аналитической функции:

$$f(x, y) = A_0 e^{-((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2)/r_0^2}$$



По QR-коду найдите данные для задачи. Связаться с нами можно по почте:

slavesta10@gmail.com

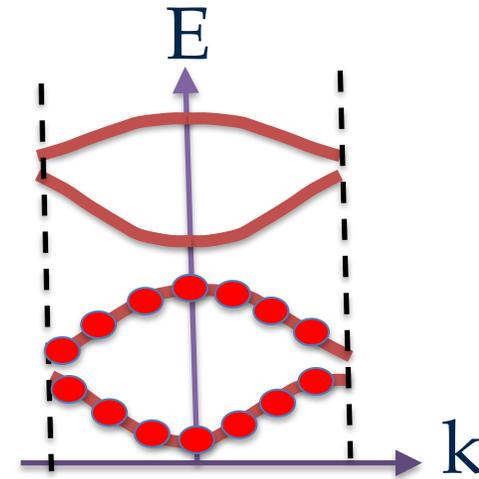
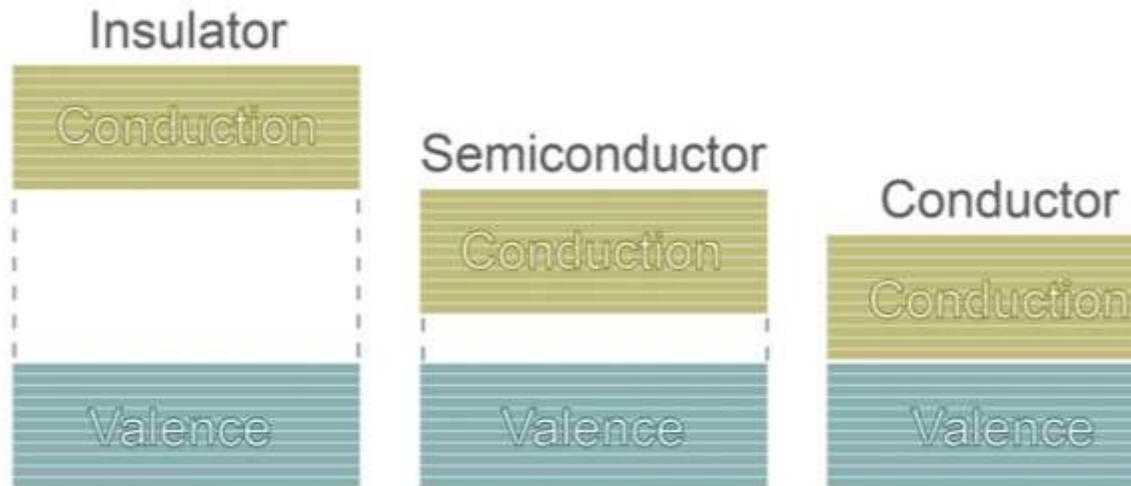
Горизонты физики

Электронно-транспортные свойства магнитных топологических изоляторов

к.ф-м.н, с.н.с. Фролов А.С.

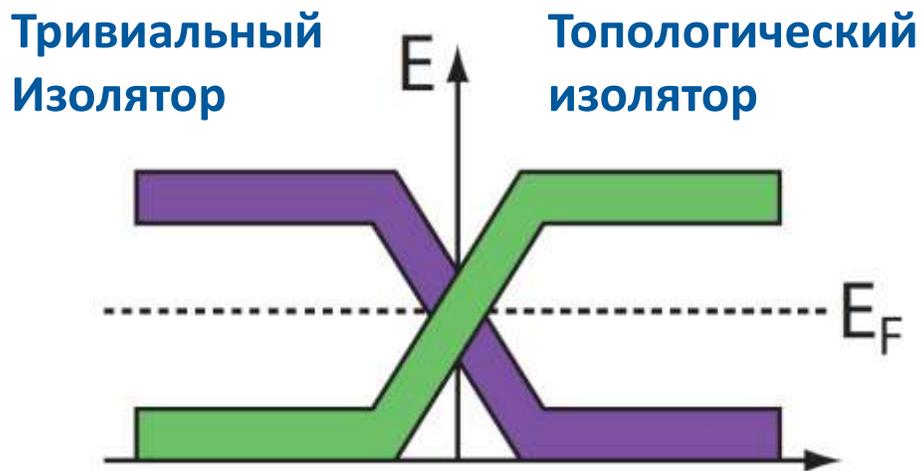
*Лаборатория фотоэлектронной спектроскопии квантовых
функциональных материалов*

Немного об изучаемых объектах...

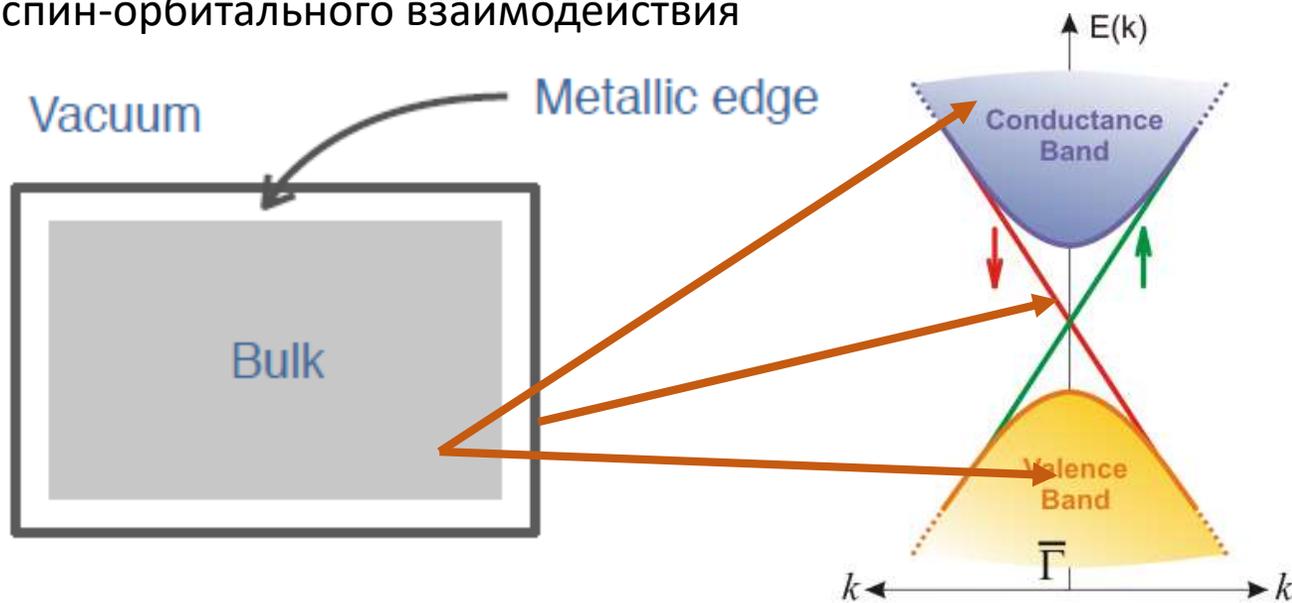


- Зона проводимости отделена от валентной зоны запрещённой зоной
- Уровень Ферми лежит в запрещённой зоне
- Носители заряда – «электроны» с эффективной массой $m^* = \frac{d^2E}{dk^2}$ (квадратичный закон дисперсии)

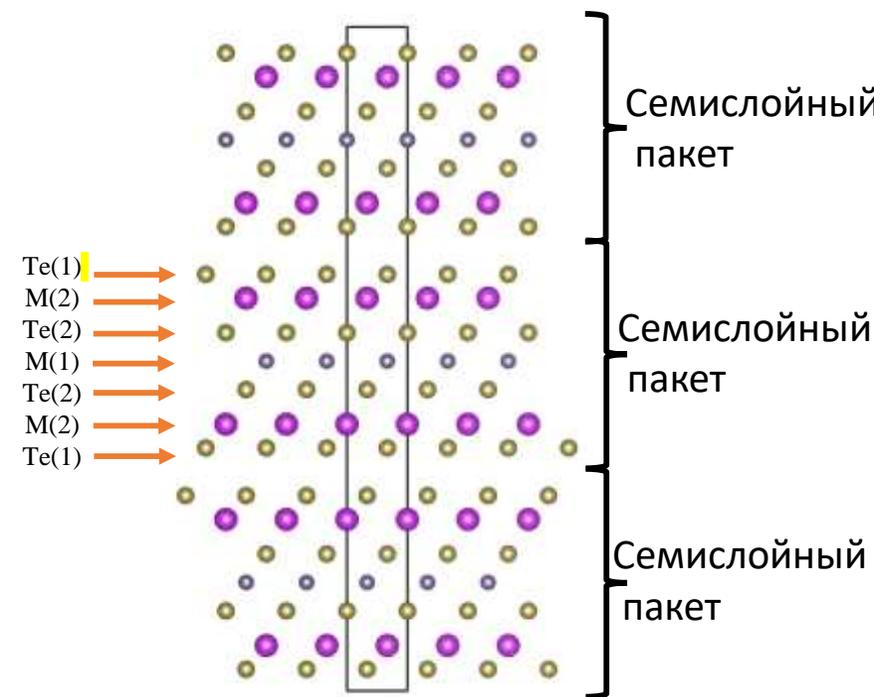
Немного об изучаемых объектах...



Увеличение спин-орбитального взаимодействия



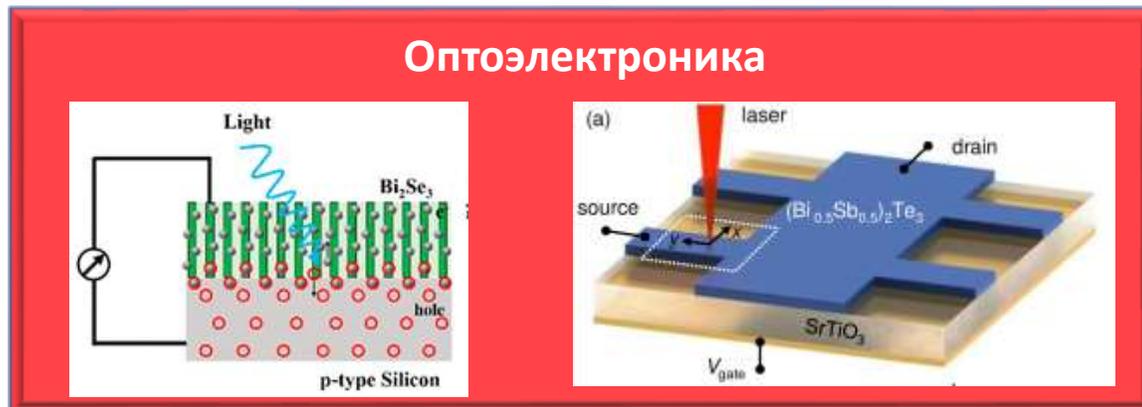
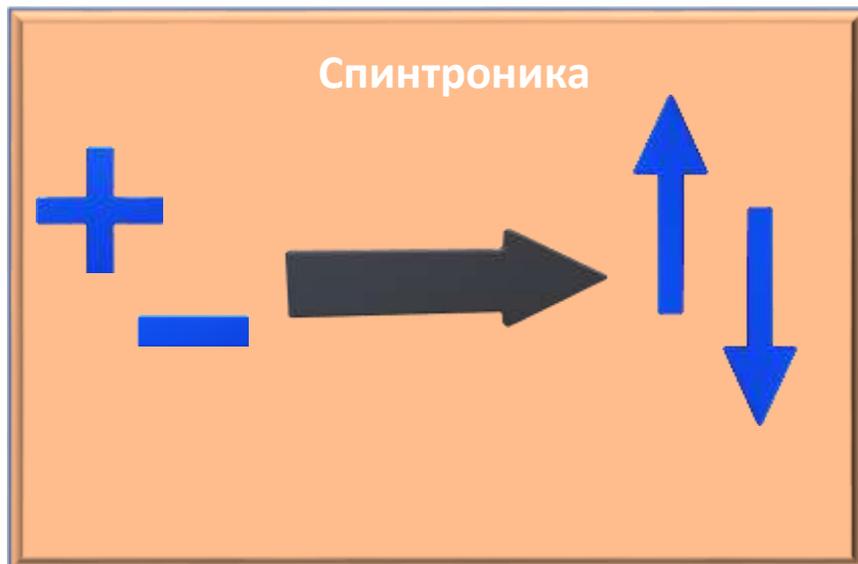
Структурный тип GeAs_2Te_4 .



M(1) = Ge, Sn, Pb, Mn
 M(2) = As, Sb, Bi
 Te(1), Te(2) = Se, Te

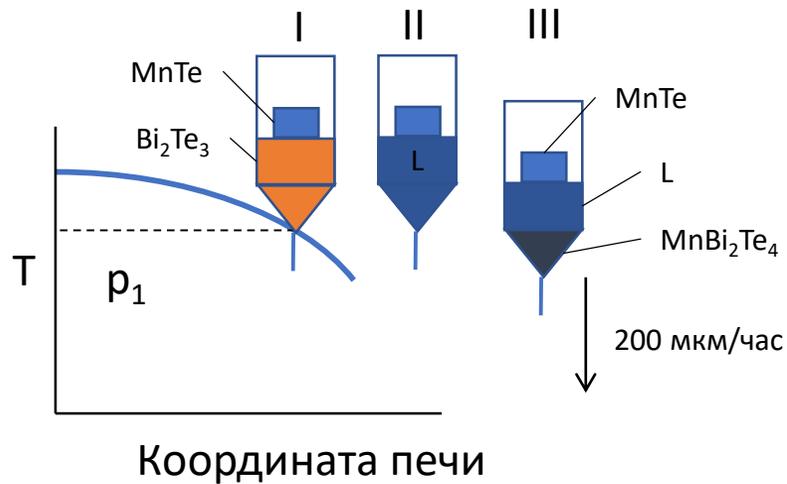
- Линейный закон дисперсии
 $\rightarrow m^*=0$
- Спиновая поляризация состояний
- «Spin-momentum locking»
- Устойчивы к возмущениям!

Зачем это нужно?

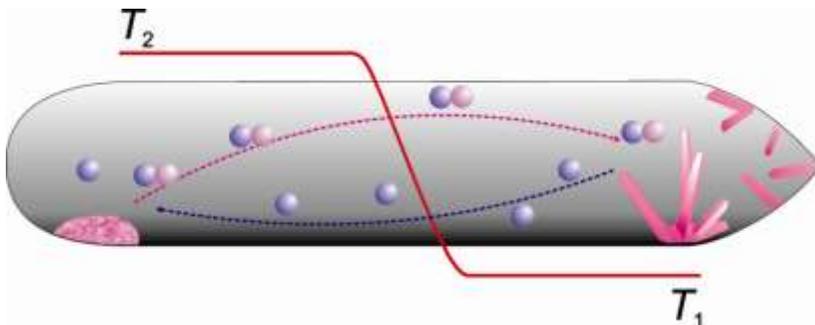


Как получить?

Из расплава – метод Бриджмена



Из газовой фазы – метод ХТР



Как это выглядит?

Монокристалл
в оптическом
микроскопе...



...и в атомно-силовом
микроскопе



Ростовая установка
в объективе
фотоаппарата



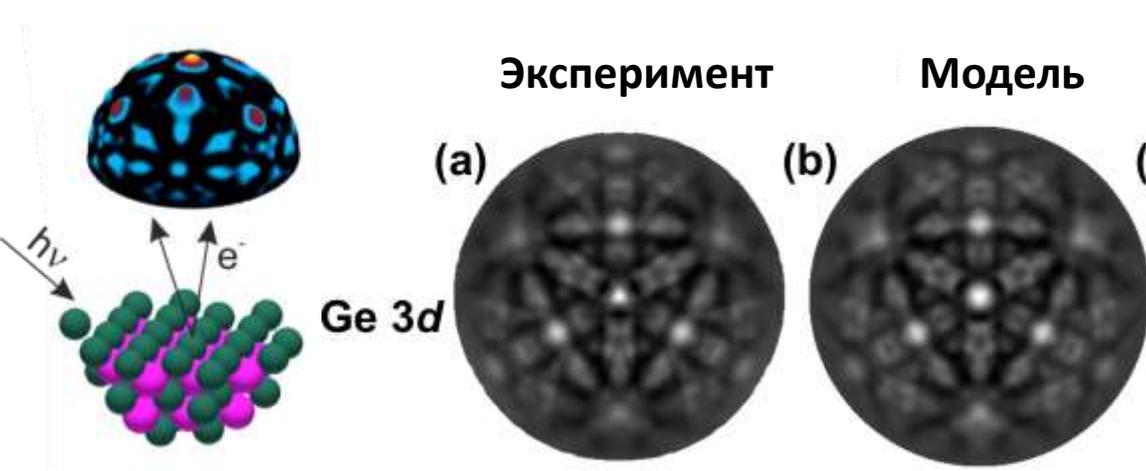
Как это измерить?

XRD, XRF, SEM/EDX, XPS, NAP-XPS, HAADF-(S)TEM, AFM/STM/MFM, SQUID

А так же:

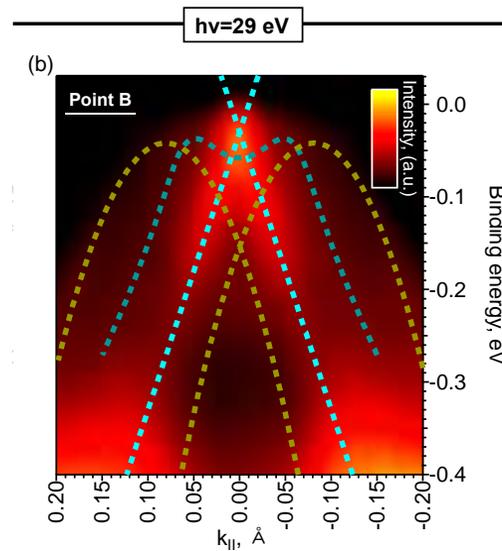


Дифракция фотоэлектронов (XPD)



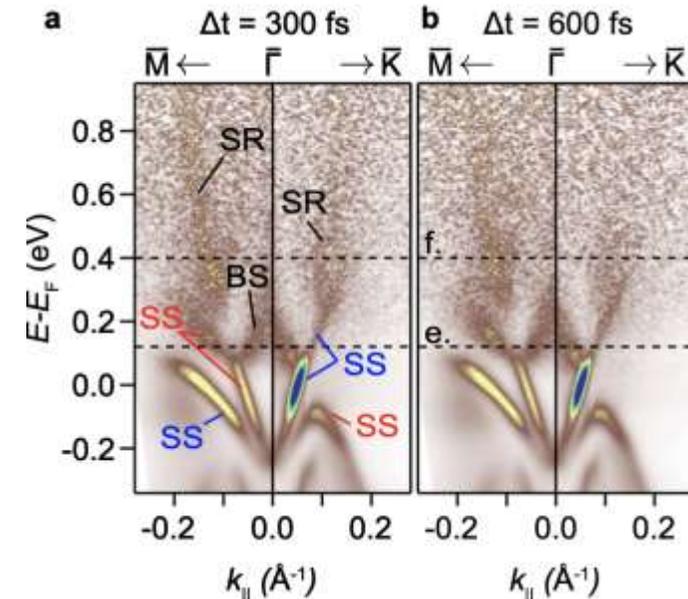
Frolov, A. S. *et al.* *Acs Nano* 12, 16576–16589 (2020).

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением



Frolov A.S. *et al.* *Acs Nano*. 2022. Vol. 16, № 12. P. 20831–20841 (2022)

Динамика «горячих» электронов



Clark, O. J. *et al.* *Commun Phys* 4, 165 (2021).

Чем мы будем заниматься

Изготовлением образцов с различной геометрией контактов и измерением их электронно-транспортных свойств

- Квантовый аномальный эффект Холла в магнитных топологических изоляторах $\text{Mn}(\text{Sb},\text{Bi})_2\text{Te}_4$, $(\text{Ge},\text{Mn})\text{Bi}_2\text{Te}_4$.
- Сверхпроводимость в $\text{Mn}(\text{Bi},\text{In})_2\text{Te}_4$, $\text{Sn}(\text{Bi},\text{In})_2\text{Te}_4$.

Горизонты физики

*Изучение магнитных свойств пермаллоя
при помощи ФМР спектроскопии*

Тюменев Радик

tiumenev.r@phystech.edu

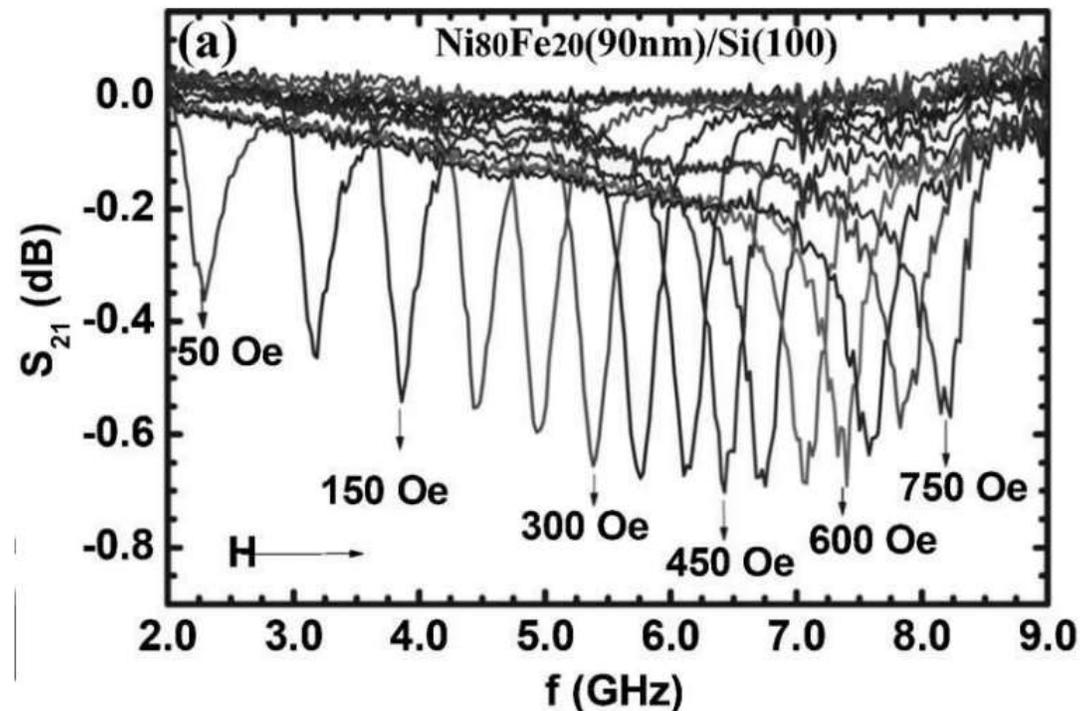
Полевой Константин

polevoy.kb@phystech.edu

Кафедра фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур

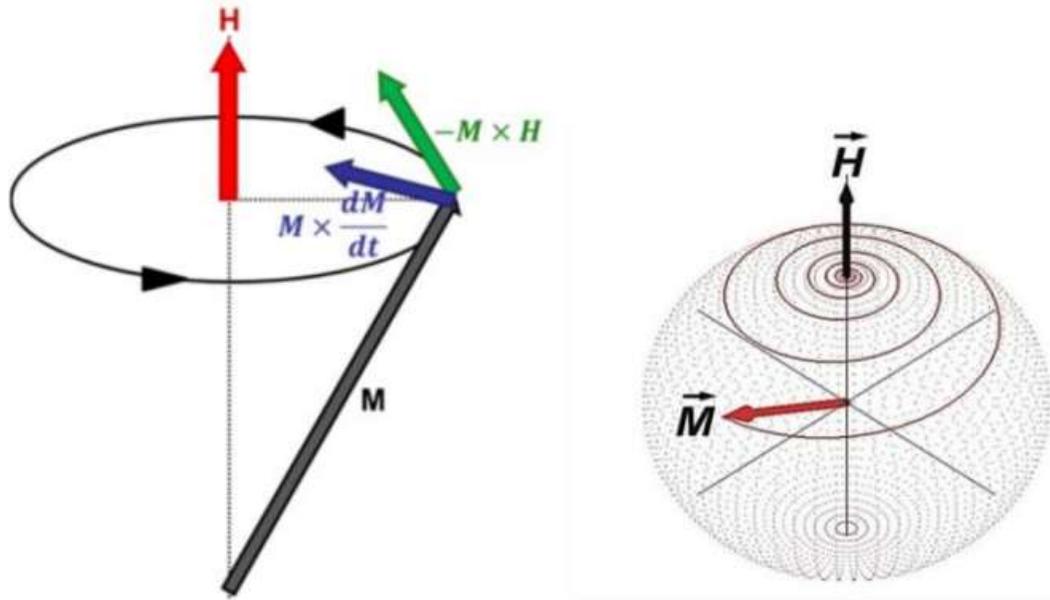
Что такое ФМР спектроскопия?

- **Ферромагнитный резонанс**, или **ФМР**, представляет собой связь между электромагнитной волной и намагниченностью среды, через которую она проходит. Это взаимодействие приводит к значительной потере мощности волны.
- Спектроскопический метод ФМР используется для определения намагниченности ферромагнитных материалов.



*Chen et al., J. Appl. Phys. 101, 09C104 2007

ОСНОВЫ ФМР

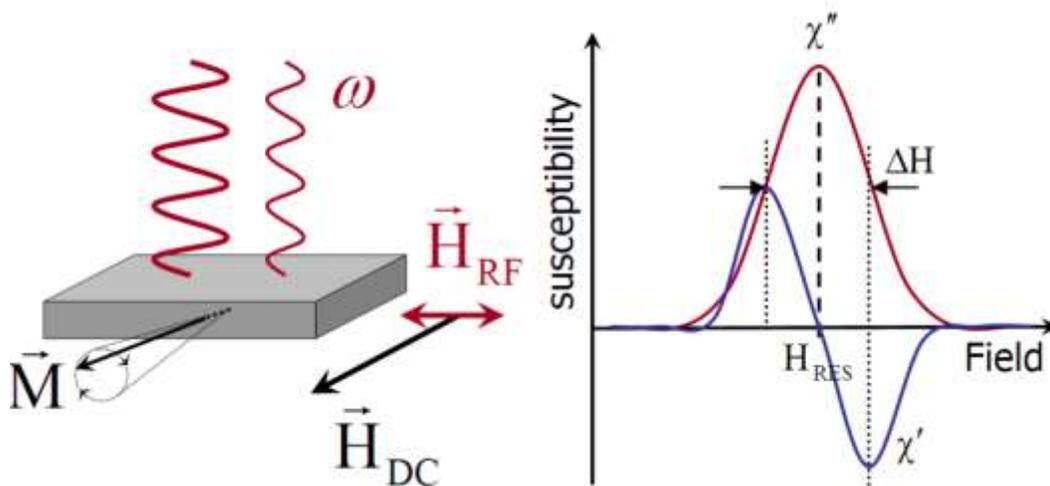


уравнение ландау лифшица гильберта:

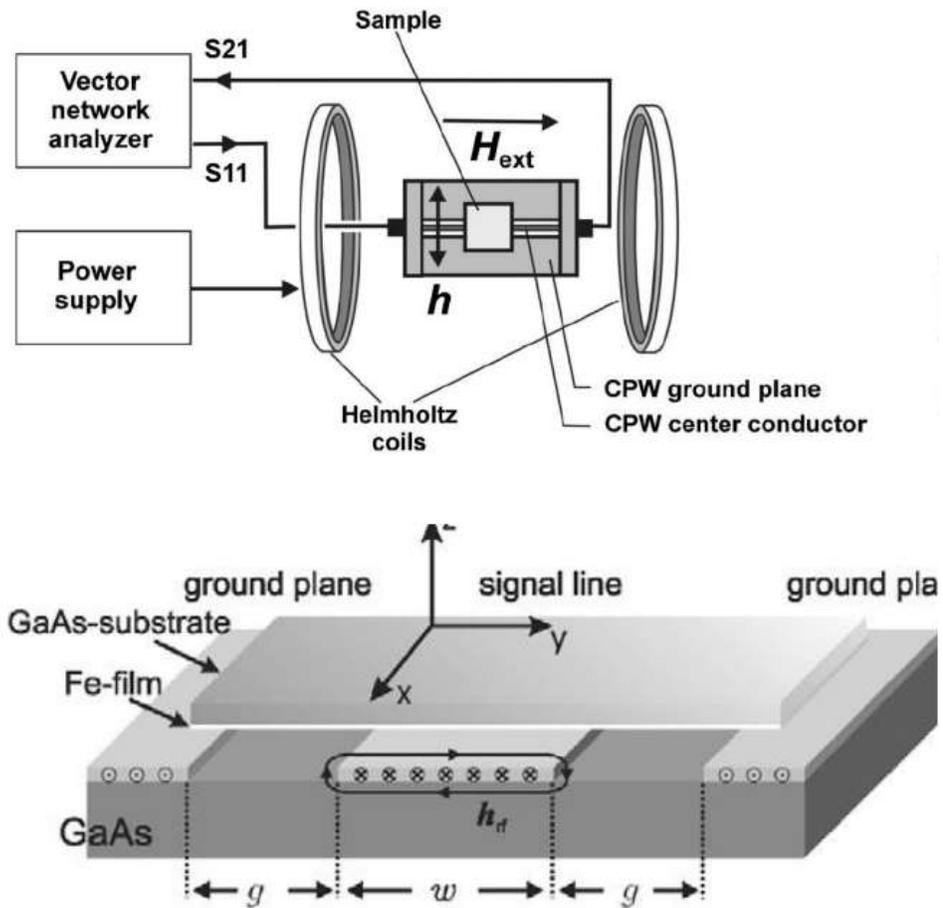
$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma\vec{M} \times \vec{H} + \frac{\alpha}{|\vec{M}|}\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}$$

формула Киттеля:

$$\left(\frac{2\pi f_r}{\gamma}\right)^2 = (H_0 + (N_x - N_z)M_s) \times (H_0 + (N_y - N_z)M_s)$$



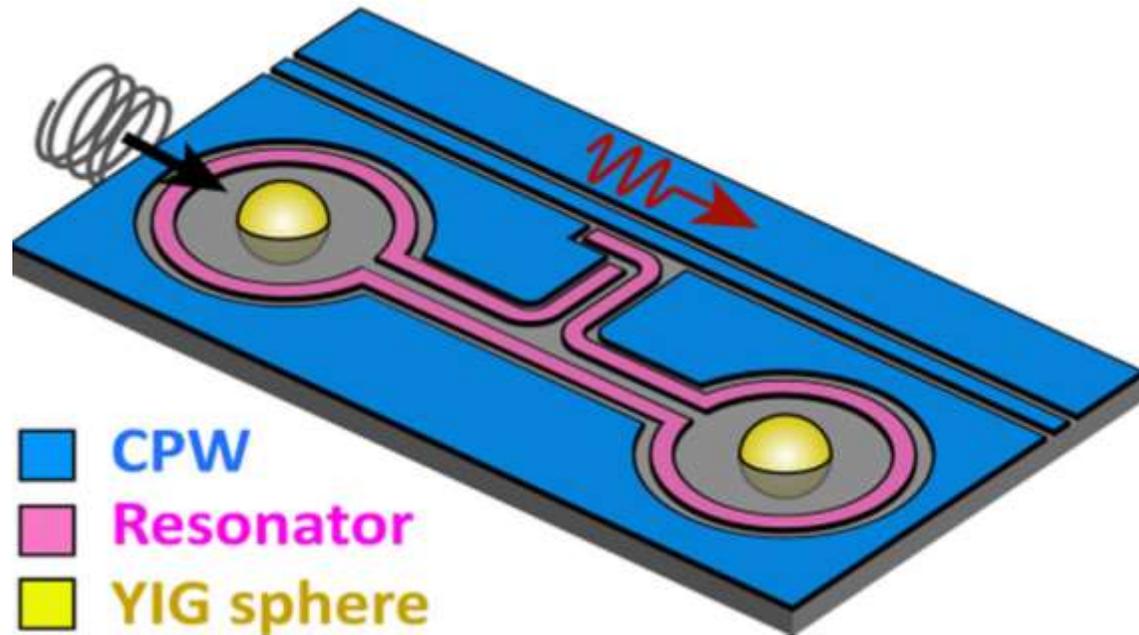
Экспериментальная часть



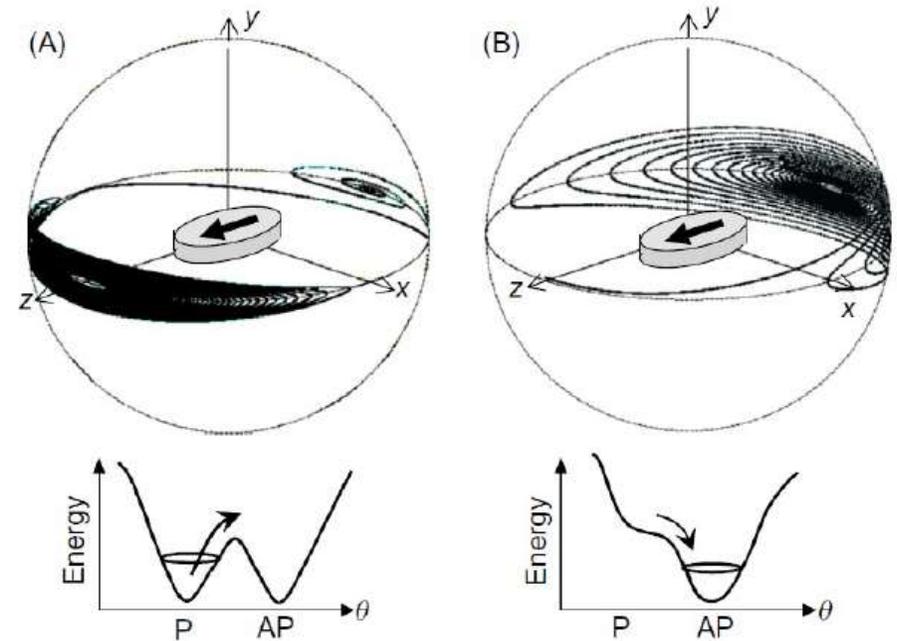
*Neudecker et al., J. Magn. Magn. Mater. 307 (2006) 148–156

Зачем это нужно?

Новый тип кубитов



Спинтроника

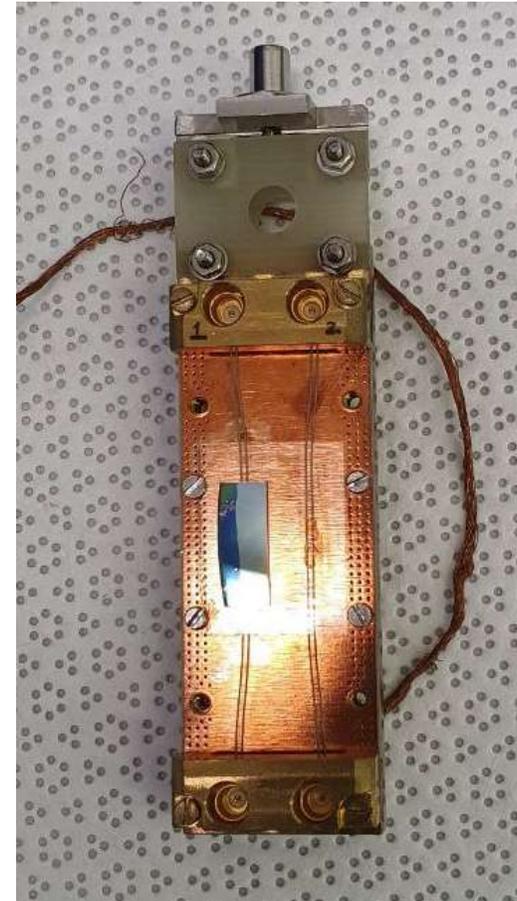


*Yi Li/Argonne National Laboratory

*Nanomagnetism and spintronics, edited by Teruya Shinjo, Second edition, 2014

Исследуемая пленка пермаллоя

	YIG	Py	Unit
γ	1.76×10^{11}	1.76×10^{11}	1/T s
$4\pi M_s$	1.4×10^5 a	8.0×10^5 f	A/m
D	5.0×10^{-40} b	5.5×10^{-40} f	J m ²
α	5×10^{-5} a	0.01 ^g	
ω_0	10 ^a	20 ^g	GHz
τ_{mp}	10 ⁻⁶ c,d	10 ⁻⁷ (Ni) ^d	s
τ_m	10 ^{-9~7} c,e	10 ⁻⁹ h	s
g_r/A	10 ¹⁶ a	10 ¹⁸ i	1/m ²
$V_a^{1/3}$	14.1	11.7	nm
η	0.45	0.27	
λ (th)	0.85–8.5	0.3	mm
λ (expt.)		4.0 ^j	mm
ξ (th)	0.25	4.4	μ V/K
ξ (expt.)		0.25 ^j	μ V/K



Чем мы будем заниматься

- Подготовка и проведение эксперимента ФМР спектроскопии для пленки пермаллоя
- Ознакомление с криостатом растворения
- Используя Python, написание кода для автоматизированного проведения эксперимента
- Обработка полученных данных для конечных результатов
- Сравнение легкости проведения ФМР экспериментов по сравнению с другими