

Zárójelentés

Mágneses heteroszerkezetek első elveken alapuló többszintű vizsgálata

OTKA K-77771

Vezető kutató: Szunyogh László

Ötéves időtartamú pályázatunkban fémes mágneses rendszerek – tömbi ötvözetek, réteges heteroszerkezetek, vékonyrétegek és kisméretű nanorészecskék – atomi szintű vizsgálatát végeztük többszintű számítógépes elméleti módszerek segítségével. Számos új eljárást dolgoztunk ki, melyek további kutatásaink alapját képezik. Az alap kutatás és a technológiai fejlesztések frontvonalába tartozó mágneses jelenségek széles skáláját tanulmányoztuk. Vizsgálatainkat és elért eredményeinket ezen témakörök mentén az alábbiakban ismertetjük. A cikkeket a beszámoló közleményjegyében található sorszámok szerint idézzük.

Itineráns mágnesség véges hőmérsékleten

Publikációk: 3, 14, 32

Pályázatunk egyik alappillére volt a Disordered Local Moments (DLM) eljárás alkalmazása komplex mágneses heteroszerkezetek elméleti vizsgálatára. A [3] publikációban a mágneses atomok közötti korrelációkat tanulmányoztuk Cu(100) felületre helyezett CoFeCo és FeCoFe multirétegekben. Azt találtuk, hogy a Co atomok mágneses momentuma a Fe réteg közelében mindig csökken, míg a Fe atomok mágneses momentuma növekszik. A CoFeCo multirétegek Curie hőmérséklete oszcillál a Fe réteg vastagságának növelésével, míg az FeCoFe multirétegek Curie hőmérséklete a Co rétegvastagság lényegében monoton növekvő függvénye.

A relativisztikus DLM (RDLM) módszer alapján, angliai kollégáink közreműködésével kidolgoztuk a paramágneses szuszceptibilitás lineáris válaszelméleten alapuló ab initio szintű számítását. A paramágneses szuszceptibilitás divergens viselkedéséből következtetni lehet a rendszer alacsony hőmérsékletű mágneses szerkezetére. A [14] munkánkban Mn monorétegek mágneses szerkezetét vizsgáltuk különböző szubsztrátok felületén. Számításaink azt mutatják, hogy Ag és Au felületén az atomsorok szerinti antiferromágneses ill. a Néel típusú trianguláris szerkezetek energiája közel azonos, míg Pt és Pd felületen egyértelműen a Néel típusú szerkezet preferált.

Az RDLM módszert már a 2000-es évek közepén kiterjesztettük véges hőmérsékletre, mellyel pl. egy ferromágneses ötvözet Curie hőmérséklet alatti mágneses tulajdonságai ab initio szinten tanulmányozhatók. Most lezárult pályázatunkban az RDLM program önkonzisztens változatát dolgoztuk. Számításainkban így a transzverzális spin-fluktuációk mellett a longitudinális spinkomponens hőmérsékletfüggését is figyelembe tudtuk venni. A [32] cikkben megmutattuk, hogy bcc vasban a lokális mágneses momentumok kb. 15 %-kal csökkennek a zérus és a Curie hőmérséklet között. Önkonzisztens számításokkal közvetlenül bizonyítottuk, hogy a FePt és FeRh ötvözetekben a Pt és Rh atomok indukált lokális mágneses momentummal rendelkeznek. A FePt mágneses anizotrópia energiájára a kísérlettel megegyező hatványviselkedést kaptunk az átlagos mágnesezettség függvényében a hosszútávú kémiai rendezetlenség különböző értékei mellett. Az elmélet számára nagy kihívást jelent a FeRh ötvözet hőmérsékletfüggő metamágneses (antiferromágnes – ferromágnes) átmenetének magyarázata. Jóllehet az alkalmazott átlagtér közelítés az átalakulási hőmérsékleteket jócskán fölébecsülte, az önkonzisztens RDLM módszerrel számított szabadenergia alapján, egy adott rácsállandó tartományban sikerült reprodukálnunk a metamágneses fázisátalakulást.

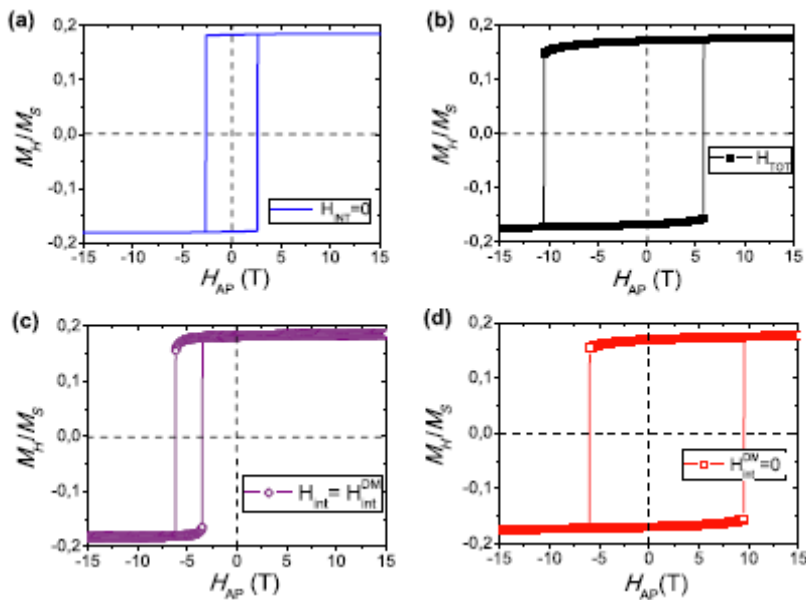
Exchange bias vizsgálata többszintű spin-modellel

Publikációk:13,31

A spin-klaszter kifejtés (spin-cluster expansion - SCE) és a DLM technika ötvözésével új módszert fejlesztettünk ki a kicserélődési kölcsönhatás tenzor számítására. Ennek lényege, hogy egy relativisztikus korrekciókkal kiterjesztett Heisenberg model paramétereit a rendszer paramágneses fázisában határozzuk meg. A módszer univerzálisan

alkalmazható, mert a számolásban nincsen szükség a spin-rendszer sok esetben ismeretlen alapállapot konfigurációjának ismeretére. Az exchange bias jelenség vizsgálatára a prototípusnak tekinthető IrMn_3 antiferromágnes (AFM)/Co ferromágnes (FM) határfelületet választottuk. (Megjegyezzük, hogy az IrMn ötvözetek a leggyakrabban használt ipari antiferromágnesek.) Megmutattuk, hogy a határfelület csak egy keskeny, mindkét oldalon legfeljebb 6 atomi rétegnyi tartományban módosítja a tömbi kicserélődési kölcsönhatásokat. A két részrendszert összecsatoló izotróp Mn-Co kölcsönhatásokat az antiferromágneses jelleg dominálja. Kiderült, hogy igen jelentős antiszimmetrikus csatolás, azaz Dzyaloshinskij-Moriya (DM) kölcsönhatás lép föl a határfelületen, amely a Mn és Co momentumok merőleges beállítását preferálja [13].

Az SCE-RDLM módszerrel számított kölcsönhatásokból felépített spin-modellen atomi szintű, Langevin spin-dinamika szimulációkat végeztünk a mágneses átfordulás tanulmányozására véges hőmérsékleten és alkalmazott tér jelenlétében [31]. Szimulációink egyértelműen igazolták az exchange bias – a hiszterézis görbe eltolódásának – jelenségét a vizsgált rendszerben. Az elméleti elvárásoknak megfelelően, a ferromágneses réteg vastagságának növelésével mind a koercitív tér (a hiszterézisgörbe szélessége), mind az eltolódás mértéke hozzávetőleg fordított arányban csökkent. Az exchange bias eredetének felderítése céljából egy Co monoréteg esetén vizsgáltuk a hiszterézis görbe változását a határfelületi kicserélődési kölcsönhatás különböző komponenseinek szelektív be- és kikapcsolásával szemben. A vonatkozó szimulációk eredményeit az 1. ábra mutatja. Ebből nyilvánvalóan kiderül, hogy az $\text{IrMn}_3/\text{Co}(111)$ rendszerben az exchange biast kiváltó mechanizmus a határfelületi Dzyaloshinskij-Moriya kölcsönhatás következtében kialakuló effektív unidirekcionális anizotrópia [31].



1. ábra: Szimulált hiszterézis görbék az $[\text{IrMn}_3]_6/\text{Co}_1(111)$ rendszerre a határfelületre merőleges mágnesezettség esetén: (a) minden határfelületi kölcsönhatást kikapcsolva, (b) minden határfelületi kölcsönhatást bekapcsolva, (c) csak a határfelületi Mn-Co DM kölcsönhatásokat bekapcsolva, (d) csupán a határfelületi Mn-Co DM kölcsönhatásokat kikapcsolva. [31]

Rashba effektus és mágneses szennyezők kölcsönhatása fémes felületeken

Publikációk: 4, 5, 10, 22

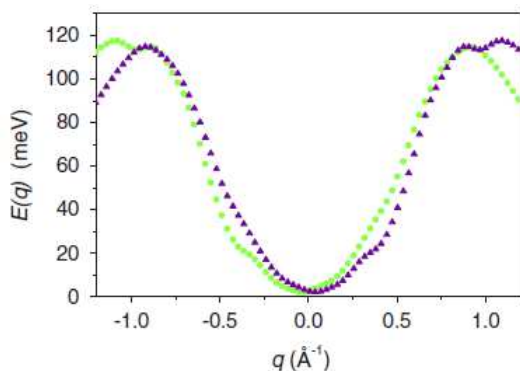
Több munkánkban a fémek felületén kialakuló Shockley típusú felületi állapotokat és azok következményeit vizsgáltuk. Jól ismert jelenség ezen állapotok ún. Bychkov-Rashba (BR) felhasadása a spin-pálya kölcsönhatás következtében. A [4] munkánkban az Au(110) felületi állapotokra jellemző anizotróp BR felhasadás elméletét írtuk le a $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ perturbációs számítás alapján és ab-initio számításokkal valószínűsítettük, hogy ez az anizotrópia kísérletileg megfigyelhető. További vizsgálataink célja az volt, hogy az anizotróp BR felhasadást általánosan leíró effektív Hamiltonit konstruáljunk. A $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ perturbációs számítással és csoportelméleti módszerekkel az összes felületi pontcsoportra meghatároztuk a Hamilton mátrixok lehetséges alakját a hullámszámban harmadrendig. A C_{2v} és C_{3v} pontcsoportok esetében eredményünk összhangban volt a korábbi számításainkkal, ill. az irodalomban már közölt Hamilton mátrix-szal. A C_{3v} szimmetria esetén levezetett anizotrópia paraméter formulák és a számolt spektrálsűrűségek alapján sikerült kielégítő magyarázatot adni arra, hogy az Au(111) felületi állapotok miért nem mutatnak a hullámszámban harmadrendű BR felhasadást, ellenben az ugyanolyan szimmetriával rendelkező $\text{BiAg}_2/\text{Ag}(111)$ felületi ötvözetnél erős harmadrendű BR effektus tapasztalható. Ab initio számításainkkal arra is rámutattunk, hogy a harmadrendű BR effektust hasonló nagyságrendű izotróp és anizotróp járulékok jellemzi [22].

[5] munkánkban a Cu(110) felületre helyezett mágneses szennyező atomok közötti kicserélődési kölcsönhatás irányfüggésére mutattunk rá. A kölcsönhatás oszcillációinak periódusából egyértelműen arra lehetett következtetni, hogy azt a Cu(110) felület Shockley-állapotai közvetítik. További ab-initio számításokkal igazoltuk, hogy a fémek felületén lévő mágneses adatomok közötti hosszútávú kicserélődési kölcsönhatás a betöltött Shockley állapotok következménye: a megfigyelt oszcillációk periódushossza a felületi állapotok Fermi-hullámszámának reciproka. Au(111) felületen sikerült kimutatnunk a periódushosszak Bychkov-Rashba felhasadását is [10].

Felületi spinhullámok és komplex mágneses struktúrák

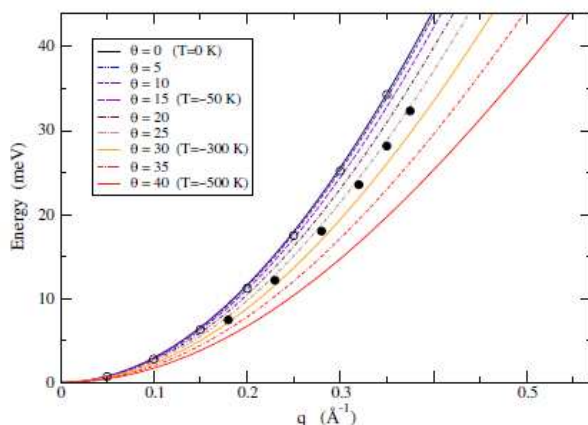
Publikációk: 1, 7, 8, 29, 30, 36

Az utóbbi években számos kísérleti és elméleti vizsgálat bizonyította, hogy a relativisztikus eredetű aszimmetrikus kicserélődési kölcsönhatás, azaz a Dzyaloshinskij-Moriya (DM) kölcsönhatás jelentősen befolyásolja a redukált szimmetriájú nanoszerkezetek mágneses állapotát. [1] cikkünkben az irodalomban elsőként mutattunk rá, hogy a DM kölcsönhatás következtében az ultravékony mágneses filmek magnonspektruma a hullámszám iránya (+/-) szerint aszimmetrikussá válik. A 2. ábra világosan mutatja ezt az aszimmetriát. Ez a felfedezés azért fontos, mert a spinhullám spektrum aszimmetrikus komponense közvetlen lehetőséget teremt a DM kölcsönhatás kísérleti meghatározására, ahogy azt cikkünk nyomán a hallei MPI kísérleti csoportja igazolta is.



2. ábra: A Fe/W(110) monoréteg magnon spektruma a (001) irány mentén adiabatikus közelítésben számolva. A zöld körök és lila háromszögek a +1 illetve -1 kiralitású magnonok diszperziós relációját mutatják [1].

[29] munkánkban egy C_{2v} szimmetriájú ferromágneses monoréteg, pl. Fe/W(110), véges hőmérsékletű viselkedését tanulmányoztuk mágneses anizotrópia és DM kölcsönhatás jelenlétében. A kváziklasszikus Landau-Lifshitz-Gilbert egyenletről kiindulva, lineáris válaszelmélet segítségével meghatároztuk a rendszer magnon spektrumát. Előző munkánkkal összhangban kimutattuk, hogy a DM kölcsönhatás a spektrum aszimmetriájához vezet, míg a mágneses anizotrópia a spektrumban gap-et indukál. Megmutattuk továbbá, hogy rácshibák jelenlétében mind a szimmetrikus anizotróp, mind az aszimmetrikus kicserélődési (DM) kölcsönhatás csökkenti a magnonok energiáját. Kidolgoztuk a klasszikus dinamikus egyenletek átlagtér megoldását a magnon spektrumok hőmérsékletfüggésének vizsgálatára. Ugyancsak erre a problémára alkalmaztunk egy kvantumelméleti variációs megoldást is. Mindkét módszer arra az eredményre vezetett, hogy a magnon energia csökken a hőmérséklet növelésével míg a rezonanciagörbék szélessége növekszik. Elméleti következtetéseink jó egyezést mutattak atomisztikus spin-dinamika szimulációink eredményeivel



3. ábra: Bcc Fe kis hullámszámú adiabatikus magnon spektruma különböző θ nyílásszögű spin-spirál állapotokból nyert kicserélődési kölcsönhatásokkal számolva. Monte-Carlo szimulációkat végezve, a mágneses momentumok átlagos szögeltérésére kapott érték és a nyílásszög megfeleltetéséből kalibráltuk a zárójelben feltüntetett hőmérsékleteket. Az üres és teli körök rendre a 4.2 K illetve 300 K hőmérsékleteken mért kísérleti adatokat mutatják. [30]

A véges hőmérsékletű spin-dinamika szimulációk egy lehetséges továbbfejlesztését jelenti, hogy a spin-model paraméterek számításában figyelembe vesszük a mágneses konfiguráció hőmérsékletfüggő változását. A [30] munkánkban új analitikus kifejezést vezetünk le a kicserélődési kölcsönhatásokra tetszőleges nem-kollineáris mágneses állapotban. Megmutattuk, hogy spin-pálya kölcsönhatásjelenléte nélkül is fellép egy anizotróp tag, mely bcc Fe esetében jelentős, míg fcc Ni-re kicsiny. A módszert spin-spirál állapotokra alkalmazva a bcc Fe magnon spektrumának hőmérsékletfüggésére adtunk közelítést. Ezt mutatja a 3. ábra. Számításunk kiváló egyezést mutatott a neutron szórás kísérletekkel 300 K hőmérsékleten mért magnon spektrummal.

Az SCE-RDLM technikát alkalmaztuk a Fe/Ir(001) ultravékony filmek mágneses alapállapotának vizsgálatára. A számolt tenzoriális kölcsönhatásokból átlagtérközelítésben, ill. atomisztikus spin-dinamika szimulációval határoztuk meg a rendszer spinszerkezetét. A Fe monoréteg esetében azt találtuk, hogy a rétegre relaxáció jelentősen befolyásolja az izotróp kölcsönhatások jellegét és ezáltal a rendszer alapállapotát. Ezenfelül a Dzyaloshinskii-Moriya (DM) és a bikvadratikus kölcsönhatások is jelentős szerepet játszanak. Az utóbbi jellemzésére bevezettük a 'spin-kollinearitás kép' koncepcióját. Megállapítottuk, hogy monoréteg spin-spirál alapállapottal rendelkezik. Ez két vas monoréteg esetében is fennáll, főként a DM kölcsönhatások következtében. Négy réteg vas esetén egy ferromágneses komponensre szuperponálódó, összetett nem-kollineáris alapállapotot találtunk véges mágneses momentummal. Eredményeink összhangban vannak azon kísérleti megfigyeléssel, mely szerint a négy monorétegnél vékonyabb film átlagos mágnesezettsége zérus, míg az ennél vastagabb filmek magneto-optikai Kerr effektus mérésekkel ferromágneses jelet mutatnak [8]

A fenti vizsgálatainkat folytattuk a [36] munkánkban, ahol különböző 5d átmeneti fém felületekre helyezett vas monoréteg mágneses szerkezetét tanulmányoztuk ugyancsak az SCE-RDLM módszerrel nyert spin-moddal átlagtér közelítésben és spin-dinamika szimulációkkal. Megmutattuk, hogy a figyelembe vett kölcsönhatások száma jelentős hatással van a mágneses szerkezet meghatározására. Ennek ellenére erős korrelációt találtunk a elsőszomszéd izotróp kicserélődési és DM kölcsönhatás erősségének aránya és az alapállapot mágneses szerkezet között. Fe/Os(0001) film esetén pl. nagy D/J arányt találtunk, ami spin-spirál alapállapotot eredményezett. A Fe/Re(0001) filmekben az erős antiferromágneses elsőszomszéd kölcsönhatások következtében 120 fokos Néel típusú alapállapot alakult ki.

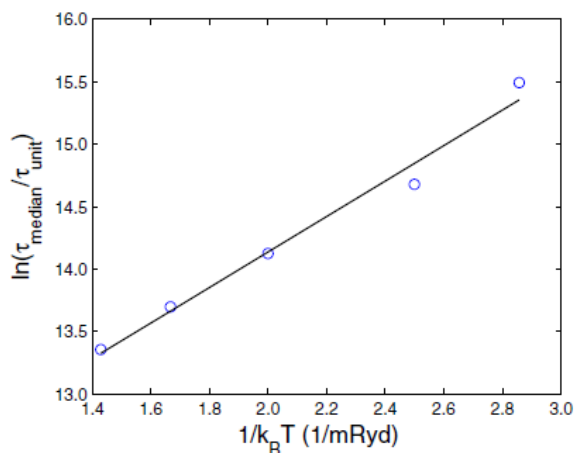
Spanyol kollégáinkkal együttműködve vizsgáltuk a hidrogén abszorpció hatását Co/Ru(0001) filmek geometriai szerkezetére, elektronikus és mágneses tulajdonságaira. Megállapítottuk, hogy teljes hidrogén fedettség nagyon stabil felületet eredményez erős H-Co kötésekkel és a felületi Co mágneses momentumok csökkenésével. Részleges hidrogén fedettség, ezzel szemben, a H-Co kötésben nem résztvevő Co atomok mágneses momentumának jelentős növekedését okozza [7].

Ab initio spin-dinamika nanoszerkezetekben

Publikációk: 6, 21, 35

Kutatásaink egyik markáns iránya olyan számítógépes módszerek kidolgozása volt, melyben spin-modellek használatának elkerülésével, az ab-initio elektronszerkezet számításokat közvetlenül kapcsoljuk össze a statisztikus fizika módszereivel. Ilyen módszert használtunk egy kobalt nanokontaktusban képződő doménfal szerkezetének vizsgálatára. Megmutattuk, hogy a relativisztikus kölcsönhatások következtében különbség adódik a Bloch és Néel típusú doménfalak energiája között. Az energia mágnesezettség irány függéséből arra következtettünk, hogy a rendszer kellő pontossággal csak olyan spin-moddal írható le, melyben több-spin kölcsönhatások szerepelnek. [21]

Bevezettünk egy közvetlen ab initio számításokon alapuló Monte Carlo (MC) szimulációs eljárást, mellyel nanorészecskék hőmérsékletfüggő mágneses tulajdonságait tanulmányoztuk. A spin-moddal alapuló MC módszerrel végeztünk összehasonlítást, valamint a Co felületre helyezett Cr klaszterek nem-kollineáris mágneses állapotait vizsgáltuk [6]. Ezt a munkát terjesztettük ki Langevin spin-dinamika szimulációkra úgy, hogy a dinamikai egyenletekben szereplő effektív mágneses teret közvetlenül ab initio módszerrel számítottuk [35]. Többféle megoldási módszert teszteltünk a stochasztikus Landau-Lifshitz-Gilbert egyenlet megoldására. Részletesen vizsgáltuk egy Au(001) felületre helyezett tízatomos Co lánc mágnesezettségi dinamikáját, kiemelt tekintettel a hőmérséklet indukálta mágneses átfordulásra. A 4. ábra szépen mutatja, hogy számításaink konzisztensek az átfordulási időállandóra vonatkozó Arrhenius-Néel törvénnyel. A módszerrel a nanorészecskék szuperparamágneses viselkedését fogjuk a jövőben tanulmányozni.

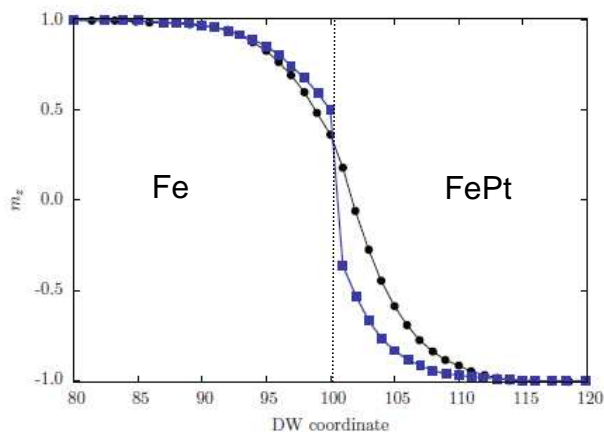


4. ábra: Tízatomos Co lánc átlagos mágneses átfordulási idejének, τ_{median} , logaritmusa az inverz hőmérséklet függvényében ab-initio Langevin dinamika szimulációk alapján [35].

Mágneses anizotrópia tömbi rendszerekben és heteroszerkezetekben

Publikációk: 9, 15, 16, 23, 24, 25

A nagysűrűségű mágneses adattárolás számára ígéretes, réteges szerkezetű, nagy koercitivitású ferromágnesek mágneses anizotrópiája (MA) továbbra is kutatásaink egyik fontos eleme. Különböző geometriai rácsállandójú és kémiai rendezetlenségű $L1_0$ szerkezetű FePt ötvözetekre végeztünk ab initio számításokat. A hőmérsékleti spin-fluktuációk hatását korábbi Langevin dinamika szimulációk alapján skálázással vettük figyelembe. Megállapítottuk, hogy a rácsállandó változása önmagában sem a MA energia nagyságát, sem pedig a mintákra vonatkozó trendet nem képes reprodukálni. A hosszútávú kémiai rendezetlenség figyelembevétele (Fe és Pt atomok interdiffúziója) a trendet már jól visszaadta, de bizonyos, a kísérletben közel teljesen rendezettnek feltételezett minták MA energiája túl nagyknak bizonyult. Mivel más kísérletek arra utaltak, hogy ezen mintákban valójában jelentős a kémiai rendezetlenség, meghatároztuk a kémiai rendezetlenség azon mértékét, melynél a számolt és a kísérleti MA megegyezett. Eredményképpen azt kaptuk, hogy a minták kémiai rendezetlensége és a MA energia lényegében lineáris kapcsolatban vannak. [9] Számításokat végeztünk a nem-sztöchiometrikus FePt ötvözetek mágneses anizotrópiájára is és a kísérletekkel egyezően azt találtuk, hogy a vasban gazdag ötvözetek anizotrópia energiája nagyobb, mint a sztöchiometrikus ötvözeté, amennyiben a minták hosszútávú kémiai rendezetlensége azonos [25]



5. ábra: Szimulált mágnesezettség profil a Fe/FePt kettősrétegben kialakuló 180 fokos doménfal esetén. A határfelület pozícióját a függőleges pontozott vonal jelöli. Az ideális és relaxált geometriájú rendszerek mágnesezettség görbéjét rendre a fekete körök és kék négyzetek ábrázolják.[23].

[23] munkánkban Fe/FePt/Fe heteroszerkezetre végeztünk ab initio számításokat. Ez a rendszer egy lágymágnes (Fe) és keménymágnes (FePt) határfelületét tartalmazza, ezért technológiai szempontból is fontos kérdés, hogy egy ilyen határfelület mennyiben befolyásolja a két részrendszer mágneses tulajdonságait, kiemelt tekintettel a kicserélődési kölcsönhatásokra és a mágneses anizotrópiára. Vizsgáltuk a határfelületi geometriai relaxáció hatását is ezekre a paraméterekre. Azt találtuk, hogy a határfelület melletti vas monoréteg és a lágúvas réteg kicserélődési csatolása jelentősen csökken. Ez az effektus különösen a relaxált rendszerre jellemző. Ugyancsak a relaxált esetben a határfelületi vas monoréteg a MA energiához 1 meV/Fe atom értékkel járul hozzá. Ennek következtében a lágúvasba ágyazott FePt film MA energiája alig csökken a tömbi FePt ötvözetéhez képest. A számolt paraméterekkel egy egyszerű lineáris lánc spin-modelt alkottunk és a Fe/FePt kettősrétegben létrejövő doménfal mágnesezettség profilját szimuláltuk. Az 5. ábráról nyilvánvaló, hogy a relaxált geometriájú rendszerben a mágnesezettség éles átmenetét tapasztaljuk a határfelületen, míg az ideális geometriájú rendszerben folytonos

mágnesszettség görbét kapunk. Ezt a jelenséget annak tulajdonítjuk, hogy relaxált esetben a két részrendszer csatolása jelentősen lecsökken.

Az elméleti kutatás számára is érdekes feladat nagy szaturációs mágnességű, kemény mágneses anyagok keresése. Ilyenek lehetnek a vas és 5d átmeneti fémek alkotta nanorétegek. Mi az $5[\text{Fe}]/2[\text{W}_x\text{Re}_{1-x}]$ ($x = 0.6-0.8$) rétegszekvenciájú ötvözet MA energiájára végeztünk számításokat. Alapgondolatunk az volt, hogy ötvözéssel a Fermi energia úgy hangolható, hogy az elektronsávok spin-pálya felhasadásával keletkező üres sávban helyezkedjen el. Másodrendű perturbációszámítás alapján, ez a MAE értékének nagymértékű növekedését vonja maga után. A vizsgált anyagra a MAE értéke, az ötvözés mértékétől függően, az 5.3–7.0 MJ/m³ tartományba esett, mely megközelíti az FePt ötvözet mágneses anizotrópiáját. [15]

A [16] cikkben platina szennyező hatását vizsgáltuk a hcp Co mágneses anizotrópia energiájára. Modellünkben a hcp rács egy síkjában változó koncentrációjú helyettesítéses ötvözést tekintettünk. Számításaink azt mutatták, hogy kicsiny Pt koncentráció csökkenti a MAE-t, míg magasabb koncentrációnál a MAE növekedését tapasztaltuk. Az eredmények részletes elemzése alapján a fenti változások a Pt atomok lokális, valamint a Co atomok indukált MAE járulékaiknak eredője. Ez utóbbi járulékot hosszútávú Friedel oszcillációk jellemzik, melyek szignifikánsan befolyásolhatják a nanoméretű minták mágneses energiáját. A [24] cikkben azt vizsgáltuk, hogy a különböző rétegződési hibák milyen hatással vannak a hcp Co MA energiájára. Azt találtuk, hogy a rétegződési hibák általában csökkentik a MAE-t, bár éppen a legkisebb energiájú deformációs hiba növeli a MAE-t. A fellépő Friedel oszcillációk miatt két réteghiba együttes hatása a MA energiára nem additív. Abban az esetben, amikor a két réteghiba mindössze három monoréteg távolságban található (rétegszekvencia: ...ABABCBCBABA...), a két réteghiba additív járulékhöz képest, felületi elemi cellánként további 0.4 meV-tal csökken a MAE.

Magnetokalorikus effektus

Publikációk: 17, 18, 34

A kétatomos vas-foszfid (Fe_2P) számos magnetokalorikus ötvözet kiinduló anyaga. Sztöchiometrikus esetben a Curie hőmérséklet ($T_c = 215$ K) ugyan túlságosan alacsony a szobahőmérsékleten működő mágneses hűtéshez, de a foszfor parciális helyettesítése B, Si vagy As elemekkel jelentősen növeli a mágneses rendeződés hőmérsékletét. A dópolás széles koncentráció tartományban megtartja a vas-foszfid kristályszerkezetét, viszont megváltoztatja az egyensúlyi térfogatot és a rácsállandók arányát (c/a). Ab initio számításokkal szétválasztottuk a vas atomok közötti kicserélődési kölcsönhatás dópolás hatására fellépő változásának kémiai és strukturális (térfogati és a c/a aránytól függő) járulékát. Megállapítottuk, hogy a vizsgált ötvözetek esetében a Curie hőmérséklet növekedését a két vas alrács közötti kicserélődési kölcsönhatás növekedése okozza, amit főként a c/a arány változására vezethető vissza. [18] Landau fenomenológikus elméletével magyaráztuk a Fe_2P vegyület dópolását kísérő metamágneses fázisátalakulás eredetét. Megmutattuk, hogy a két vas alrács mágnessége kölcsönösen függ egymástól és ezt az ötvözés nagymértékben befolyásolja. A paramágneses állapotban számolt kicserélődési kölcsönhatásokkal Monte-Carlo szimulációkat végeztünk és sikerült kielégítően reprodukálni a T_c kísérletileg tapasztalt változását B-dópolás hatására. [17]

[34] munkánkban az FeRh ötvözet metamágneses fázisátalakulását és magnetokalorikus tulajdonságait vizsgáltuk az RDLM módszerrel, kiemelt tekintettel a Fe és Rh atomok hosszútávú kémiai rendezetlenségére, melyet a legtöbb kísérletben észleltek. Meghatároztuk a maximális izoterm entrópia változást, és megmutattuk, hogy annak kb. 40 %-a elektronikus járulék. Azt találtuk, hogy a metamágneses fázisátalakulás T_t hőmérséklete rendkívüli érzékeny a hosszútávú kémiai rendezetlenségre: a rendezett ötvözetben $T_t = 495$ K, míg csupán 2%-os Fe-Rh keveredés hatására T_t 290 K-re csökken.

Spin-polarizált pásztázó alagút mikroszkópia és spektroszkópia

Publikációk: 11, 12, 19, 20, 26, 27, 28, 33

A spin-polarizált pásztázó alagút mikroszkópia (STM) ill. spektroszkópia (STS) a felületi mágneses szerkezetek detektálásának legkorszerűbb kísérleti eszköze. A spin-szelektív transzport számításával komplex mágneses szerkezetek STM és STS detektálását tudjuk modellezni. Az atomi szuperpozíció technikára alapozva kifejlesztettünk egy olyan módszert mely tetszőleges elektronszerkezet számításból származó projektált állapotsűrűség felhasználásával, igen egyszerűen és gyorsan képes előállítani az STM képet [11]. Elméleti

vizsgálataink főként arra irányultak, hogy a tú mágnesszettsége és elektronszerkezete miként befolyásolja a mért differenciális vezetőképességet. Kutatási célunk a mérési érzékenységre optimális tú modellezése.

Új módszerünkkel egy Cr/Ag(111) monoréteg nem-kollineáris mágneses alapállapotának (120 fokos Néel állapot) STM képét tanulmányoztuk. Azt találtuk, hogy a mágneses kontraszt igen érzékeny az STM tú elektronszerkezetére, valamint ellentétes kontraszt érhető el az előfeszültség (bias voltage) változtatásával [12]. A módszer továbbfejlesztése figyelembe veszi a korábban elhanyagolt differenciális vezetőképesség (dl/dV) komponenseket. Ezüst (111) felületére helyezett króm monoréteg dl/dV-spektrumát tanulmányoztuk és megmutattuk, hogy a számított dl/dV jól egyezik az alagútáram numerikus deriváltjával. Különböző tú-modellek hatását vizsgáltuk az alagútspektrumra és az ún. mágneses aszimmetriára. Ezen kívül bemutattunk egy módszert a dl/dV és az effektív spin polarizáció konstans áram kontúron történő szimulációjára, mely direkt összehasonlítást tesz lehetővé a kísérletekkel [20]. STM elméletünket kiterjesztettük pályafüggő alagutazás figyelembevételével és egy W(110) felület konstans áramú STM képét analizáltuk, különös tekintettel a korrugációinverzió jelenségére. Az új modellel kapott STM képek jó egyezést mutatnak Tersoff-Hamann és Bardeen módszerekkel meghatározott képekkel. Korábbi munkákkal összhangban azt találtuk, hogy a kontraszt inverziója függ az alagútfeszültségtől és a minta-tú távolságtól is. Megfigyeltük, hogy a fenti jelenség érzékeny a tú elektronállapotainak pályakarakterére is [19, 26]. A spin-polarizált STM-mel konstans áram kontúron mérhető alagútfeszültség-függő mágneses kontraszt kvantitatív becslésére tettünk elméleti és kísérleti javaslatot, valamint numerikus számításokkal a tú elektronszerkezetének hatását vizsgáltuk a mágneses kontrasztra [27]. A [33] cikkben megmutattuk, hogy Fe(110) felületen az SP-STM kontraszt inverzió a mágneses tú pályakarakterének és spin-polarizációjának komplex függvénye. A 3D-WKB-STM kód lehetőségeit és az elért eredményeket a [28] összefoglaló cikkben ismertettük.

Összegzés néhány adat tükrében

Pályázatunk eredményeképpen összesen 36 cikket publikáltunk, melyek közül 3 a Physical Review Letters, 20 a Physical Review B, 1 pedig az Applied Physics Letters folyóiratokban jelent meg. A publikációk kumulatív impakt faktora 119.66 és azokra eddig közel száz független hivatkozást kaptunk (l.<http://www.phy.bme.hu/~szunyogh/pub2.html>). Eredményeinket számos nemzetközi és hazai konferencián, valamint szemináriumon népszerűsítettük (összesen 114 szóbeli és poszter előadás, l. 1. sz. Melléklet). Fontos megemlíteni az öt svéd-magyar-finn (MAGFUM) konferenciát, melyet a nemzetközi kiegészítő OTKA támogatás segítségével szerveztünk, több esetben nemzetközi szaktekintélyek meghívásával.

Kiemelkedően fontosnak tartom OTKA pályázatunk tehetséggondozásban betöltött szerepét. Ennek adatait a 2. sz. pályázatban foglaltam össze. Kutatásainkhoz kapcsolódóan 5 tudományos diákköri munka született, melyek közül 1-1 országos első ill. harmadik helyezést kapott. Hallgatóink 4 BSc és 5 MSc diplomát szereztek, egy MSc diplomamunka folyamatban van. Két sikeres PhD fokozatszerzés történt és további 4 PhD hallgató témavezetését irányítjuk.

Az OTKA támogatás jelentős mértékben hozzájárult ahhoz, hogy a BME Elméleti Fizika Tanszékén, az MTA WFK SZFI-vel együttműködésben, életre hívtuk a Számítógépes Mágnesség Kutatócsoportot, mely jelenleg három szenior kutató, négy posztdoktori kutató, hat PhD hallgató és két MSc hallgató (összesen tizenöt fő) tevékenységét koordinálja. A kutatócsoport ideiglenesen két EU FP7 pályázat keretében működik tovább, de reméljük, hogy a közeljövőben újabb OTKA pályázati támogatást tudunk elnyerni.

Melléklet 1.

Konferencia előadások, szemináriumok

2009

- 1) L. Szunyogh: Spin-orbit induced phenomena in nanomagnetism. Psik-Workshop on Magnetism in Complex Systems, 2009. ápr. 16-18. Bécs, Ausztria. (invited)
- 2) L. Szunyogh: Spin-Hamiltonian Based on the Relativistic Disordered Local Moment Scheme. KKR Workshop: Methodology and Applications, Budapest, Hungary, June 12-14, 2009. (talk)
- 3) L. Udvardi: Direct Monte-Carlo method for deposited magnetic nanostructures. KKR Workshop: Methodology and Applications, Budapest, Hungary, June 12-14, 2009. (talk)
- 4) E. Simon: Anisotropic Rashba splitting and consequences on impurity interactions. KKR Workshop: Methodology and Applications, Budapest, Hungary, June 12-14, 2009. (poster)
- 5) M. dos Santos Dias, A. Deák, L. Szunyogh, J.B. Staunton: Anisotropic Magnetic Correlations at Finite Temperature in RDLM. KKR Workshop: Methodology and Applications, Budapest, Hungary, June 12-14, 2009. (poster)
- 6) K. Palotás: Detection of giant magnetic contrast with spin-polarized STM on cobalt nanoislands: the role of tip chemical structure. Seminar at the Research Institute for Technical Physics and Materials Science of the Hungarian Academy of Sciences, July 1, 2009, Budapest, Hungary. (invited)
- 7) E. Simon: Exchange interaction between magnetic impurities on non-magnetic surfaces. International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Berlin, Germany, July 20-24, 2009. (poster)
- 8) L. Balogh: Novel Monte Carlo study of deposited magnetic nanoparticles. International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Berlin, Germany, July 20-24, 2009. (poster)
- 9) L. Udvardi: Monte Carlo study on magnetic nanoparticles from first principle. International Conference on Magnetism (ICM 2009), 2009.07.26-.31. Karlsruhe, Németország (poster)
- 10) B. Újfalussy: Anisotropy of exchange interactions between impurities on Cu(110) surface. International Conference on Magnetism (ICM 2009), 2009.07.26-.31. Karlsruhe, Németország (poster)
- 11) L. Szunyogh, L. Udvardi: Domain wall formation and spin-wave spectra in Fe/W(110). International Conference on Magnetism (ICM 2009), 2009.07.26-.31. Karlsruhe, Németország (poster)
- 12) L. Szunyogh: Exchange coupling and magnetic anisotropy in bulk IrMn and at IrMn/Co interface. International Conference on Magnetism (ICM 2009), 2009.07.26-.31. Karlsruhe, Németország (poster)
- 13) K. Palotás: Ab initio simulation of STM: Application to molecular and magnetic surface structures. Materials Science Autumn School of the Loránd Eötvös Physical Society, September 30 - October 2, 2009, Gyöngyöstarján, Hungary. (talk)
- 14) L. Szunyogh: Atomistic spin-model for magnetic nanostructures: spin-cluster expansion. Workshop of the COST Action P19: Multiscale Modelling of Materials, 2009. dec. 7. Konstanz, Németország (talk)
- 15) L. Udvardi: Direct Monte-Carlo method for deposited magnetic nanostructures. Workshop of the COST Action P19: Multiscale Modelling of Materials, 2009. dec. 7. Konstanz, Németország (talk)
- 16) L. Szunyogh: Chiral asymmetry of the spin-wave spectra in ultrathin magnetic films. Condensed Matter and Materials Physics Conference, 2009. dec. 15 – 17., Warwick, Anglia. (talk)

2010

- 1) J. Kollár: Surface energy and stress for magnetic transition metals. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 2) B. Lazarovits: Ab initio vs. spin-model spin-dynamics: a case study. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 3) B. Újfalussy: Canted magnetic ground states from ab initio spin-dynamics. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 4) K. Palotás: Enhanced magnetic contrast in spin-polarized STM caused by hydrogen. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 5) A. Szilva: Magnetic anisotropy of localized impurities near surfaces. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)

- 6) L. Szunyogh: Classical Spin Hamiltonian based on Relativistic DLM. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 7) L. Udvardi: Relativistic exchange interactions - Theory. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 8) E. Simon: Asymptotics of impurity-impurity interaction at surfaces. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 9) L. Balogh: Monte Carlo methods applied to magnetic nanoclusters. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 10) A. Deák: Dzyaloshinsky-Moriya interaction in metals. 1st MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", February 10-12, 2010, Uppsala, Sweden. (talk)
- 11) L. Szunyogh: Relativistic corrections to spin-spin interactions at the nanoscale. Nano-CMT seminar, University of York, Anglia, 2010. júl. 26. (invited)
- 12) L. Szunyogh: Mágneses nanovilág - a spin-pálya kölcsönhatás kedvelt játéktere. Fizikus Vándorgyűlés, Pécsi Tudományegyetem, 2010. aug. 27. (szóbeli)
- 13) K. Palotás: Spin-polarized STM simulations on magnetic nanostructures. Seminar at the Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool, September 8, 2010, Liverpool, UK. (invited)
- 14) L. Udvardi: Atomistic magnetic simulations from first principle. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (invited)
- 15) L. Szunyogh: Theory of anisotropic Rashba splitting of surface states. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (talk)
- 16) K. Palotás: Spin-polarized STM simulations on magnetic nanostructures. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (poster)
- 17) B. Újfalussy, E. Simon: Anisotropic magnetic interactions in heterostructures: a first-principles approach. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (poster)
- 18) L. Udvardi, L. Szunyogh: Spin-model from relativistic first principles calculations applied to bulk IrMn compounds and IrMn₃/Co interface. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (poster)
- 19) B. Újfalussy, E. Simon: Interaction between magnetic impurities on Cu and Au surfaces. PSI-K 2010 Conference, September 12-16, 2010, Berlin, Germany. (poster)
- 20) K. Palotás: Spin-polarized STM simulations on magnetic nanostructures. 4th European School on Multiferroics, September 26-October 1, 2010, L'Aquila, Italy. (poster)
- 21) L. Szunyogh: Anisotropic Bychkov-Rashba splitting of surface states. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 22) L. Udvardi: Magnetic structure of thin films and finite nanoparticles from first principles. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 23) A. Szilva: Study of spectral statistics in gold nanoparticles. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 24) K. Palotás: Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic nanostructures. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 25) E. Simon: From exchange interactions to spin-dynamics. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 26) L. Balogh: Study of a cobalt nanocontact. 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)
- 27) A. Deák: Ground-state magnetic structure of Mn/X(111) monolayers (X=Ag,Au,Pt,Pd). 2nd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", November 11-12, 2010, Budapest, Hungary.(talk)

- 1) K. Palotás: Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic nanostructures. 75th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 13-18, 2011, Dresden, Germany.(poster)
- 2) K. Palotás: Simulation of spin-polarized STM and STS on magnetic nanostructures. EuroNanoForum 2011 Conference, May 30-June 1, 2011, Budapest, Hungary.(poster)
- 3) L. Balogh: Theoretical study of a cobalt nano-contact. EuroNanoForum 2011 Conference, May 30-June 1, 2011, Budapest, Hungary.(poster)
- 4) A. Szilva: Surface-induced magnetic anisotropy of impurities and random magnetic anisotropy in mesoparticles. EuroNanoForum 2011 Conference, May 30-June 1, 2011, Budapest, Hungary.(poster)
- 5) K. Palotás: Bias-dependent magnetic contrast on complex magnetic surfaces. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 6) L. Szunyogh: Constrained local moment calculations. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 7) L. Udvardi: Simulation of ESR spectra from atomistic spin dynamics. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 8) E. Simon: From exchange interactions to spin-dynamics - test calculations. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 9) L. Balogh: Theoretical study of a cobalt nano-contact. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 10) A. Szilva: Magnetic anisotropy of impurities in Au nanograins. 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 11) A. Deák: Multiscale study of complex magnetism in Fe/Ir(001). 3rd MAGFUM Swedish-Hungarian STINT Workshop "Magneto-mechanical properties of complex functional materials", June 1-4, 2011, Sovata, Romania.(talk)
- 12) L. Szunyogh: Multiscale study of complex magnetism in Fe/Ir(001). SFB 767 Colloquium, Universität Konstanz, Németország, 2011. jún. 24. (invited)
- 13) L. Szunyogh: Generalized description of Bychkov-Rashba effect on metal surfaces. Psi-k Workshop on KKR and Related Greens Function Methods, Halle, Germany, July 8-11, 2011. (invited)
- 14) A. Deák: Complex magnetic structure of ultrathin Fe/Ir(001) films: a multiscale study. Psi-k Workshop on KKR and Related Greens Function Methods, Halle, Germany, July 8-11, 2011. (poster)
- 15) K. Palotás: Theoretical study of tip effects on spin-polarized STM/STS on magnetic surfaces. 28th European Conference on Surface Science (ECOSS 28), August 28-September 2, 2011, Wrocław, Poland. (talk)
- 16) K. Palotás: Theoretical study of tip effects on spin-polarized STM/STS on magnetic surfaces. Seminar at the Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool, September 5, 2011, Liverpool, UK. (invited)
- 17) L. Udvardi: Ab-initio calculations of magnetic nanostructures. QSCP-XVI Conference, 2011.09.11, Kanazawa, Japan, (invited)
- 18) L. Szunyogh: Multiscale study of complex magnetic structure of ultrathin Fe/Ir(001) films. Quantum Simulations and Design, International Focus Workshop, Dresden, Németország, 2011. szept. 27-29. (talk)
- 19) L. Szunyogh: Multiscale study of magnetism at the nanoscale: highlighting spin-orbit induced phenomena. Seminar at Department of Condensed Matter Theory, Institute of Physics, Academy of Science of Czech Republic, Prága, Csehország, 2011. szept. 30. (invited)
- 20) L. Szunyogh: Mágneses nanoszerkezetek elméleti vizsgálata többszintű modellezéssel. ELFT Anyagtudományi Iskola, Visegrád, 2011. okt. 5. (szóbeli)

2012

- 1) K. Palotás: Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic surfaces. ViCoM-Seminar at the Vienna University of Technology, January 16, 2012, Vienna, Austria. (invited)
- 2) K. Palotás: Tip effects on spin-polarized STM/STS on complex magnetic surfaces from first principles. 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.(talk)
- 3) E. Simon: Ground state and magnetic anisotropy of magnetic structures. 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.(talk)

- 4) L. Balogh: Magnetic anisotropy in deposited Cr clusters. 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.(talk)
- 5) A.Deák: Spin Cluster Expansion and Relativistic Disordered Local Moment Scheme: Extension to finite temperatures. 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.(talk).
- 6) L. Rózsa: Simulation of the ferromagnetic resonance by means of atomistic spin dynamics. 4th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", February 15-17, 2012, Turku, Finland.(talk)
- 7) L. Szunyogh: Generalized theory of Bychkov-Rashba effect of surfaces states. Theoretical Physics Seminar, Universität Konstanz, Németország, 2012. ápr. 23. (invited)
- 8) K. Palotás: Simulation of spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy on magnetic surfaces. Seminar at the Christian Albrechts University of Kiel, June 11, 2012, Kiel, Germany.(invited)
- 9) A. Deák: Fe/Ir(001) vékonyrétegek mágneses szerkezetének elméleti vizsgálata. Fizikus Doktoranduszok Konferenciája, Balatonfenyves, 2012. június 15-17. (szóbeli)
- 10) L. Szunyogh: Generalized theory of Bychkov-Rashba splitting of surface states. Seminar talk, LMU Department Chemie, München, Németország, 2012. jún. 20. (talk)
- 11) L. Szunyogh: Magnetic structure of thin films and finite nanoparticles from first principles. SFB 767 Mini-Symposium Spin-Density-Functional-Theory in modern magnetism, Universität Konstanz, Németország, 2012. jún. 25. (invited)
- 12) L. Szunyogh: Theoretical study of magnetic domain walls through a cobalt nanocontact. Seminar talk, FZ Jülich Peter Grünberg Institute, Jülich, Németország, 2012. júl. 7. (talk)
- 13) K. Palotás: Bias dependent magnetic contrast on complex magnetic surfaces. International Conference on Nanoscience and Technology (ICN+T 2012), July 23-27, 2012, Paris, France. (talk)
- 14) L. Balogh: First principles study of domain walls through a Co nanocontact. Joint European Magnetism Symposia 2012, Parma, Italy, 2012. 09. 09--14. (poster)
- 15) C. Aas, L. Szunyogh: The Effect of Platinum Impurities and Stacking Faults on the Magnetocrystalline Anisotropy Energy of Cobalt. Joint European Magnetism Symposia 2012, Parma, Italy, 2012. 09. 09--14. (poster)

2013

- 1) L. Udvardi: Vékonyrétegek és hordozóra helyezett atomfürtök mágneses szerkezetének ab-initio vizsgálata. Ortvay kollokvium, ELTE TTK, 2013.03.07
- 2) L. Udvardi: Ab initio spin-dynamics for nanostructures with application to domain walls through a Co nanocontact. 77th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 10-15, 2013, Regensburg, Germany. (talk)
- 3) K. Palotás: Constant current contrast in spin-polarized STM. 77th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 10-15, 2013, Regensburg, Germany. (talk)
- 4) G. Mándi: Efficient orbital dependent STM simulation model. 77th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 10-15, 2013, Regensburg, Germany. (talk)
- 5) K. Palotás: Quantitative prediction of the bias voltage dependent magnetic contrast in spin-polarized STM. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 6) G. Mándi: Efficient orbital dependent STM simulation model. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 7) L. Oroszlány: Gaping the surface of 3D topological insulators with magnetic structures. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 8) L. Balogh: Magnetic anisotropy in frustrated clusters and monolayers: Cr on triangular Au(111) surface. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 9) A. Deák: Multiscale study of complex magnetism in Fe₁/Rh(001). 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 10) L. Rózsa: Ab initio spin dynamics: application to a linear ferromagnetic chain. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)

- 11) G. Csire: Multiple scattering in superconductors. 5th MAGFUM Swedish-Hungarian-Finnish STINT Workshop "Magnetomechanical properties of complex functional materials", April 8-9, 2013, Balatonfüred, Hungary.(talk)
- 12) K. Palotás: Enhancing the magnetic contrast in spin-polarized scanning tunneling microscopy. New results in condensed matter physics Workshop, Hungarian Academy of Sciences, May 9, 2013, Budapest, Hungary. (invited)
- 13) K. Palotás: Structure and magnetism of atomic-sized Ir contacts. Workshop on relativistic effects in solids, May 21-23, 2013, Brno, Czech Republic. (talk)
- 14) L. Udvardi: Fully ab initio spin-dynamics within KKR. Workshop on relativistic effects in solids, May 21-23, 2013, Brno, Czech Republic. (talk)
- 15) A. Deák: Magnetic correlations in an Fe monolayer on Rh(001). BME TTK Fizikai Tudományok doktori iskolájának konferenciája, Budapest, 2013. május 17. (talk)
- 16) L. Rózsa: Ab initio spin dynamics: application to a linear ferromagnetic chain. BME TTK Fizikai Tudományok doktori iskolájának konferenciája, Budapest, 2013. május 17. (talk)
- 17) L. Szunyogh: First principles theory of finite temperature magnetism. JSPS York-Tohoku Symposium on Magnetic Materials and Spintronic Devices, York University, Anglia, 2013. jún. 10-12. (invited)
- 18) A. Deák: Temperature-dependent spin model parameters from first principles. Conference "Computation meets Experiment: KKR Green's functions for calculations of spectroscopic, transport and magnetic properties" Warwick, United Kingdom, July 13-15, 2013. (poster)
- 19) L. Rózsa: Ab initio spin dynamics: application to a linear ferromagnetic chain. Conference "Computation meets Experiment: KKR Green's functions for calculations of spectroscopic, transport and magnetic properties" Warwick, United Kingdom, July 13-15, 2013. (poster)
- 20) L. Szunyogh: Relativistic Disordered Local Moment scheme for itinerant magnetism at finite temperatures. Research Conference „Computation meets Experiment (KKR Greens functions for calculations of spectroscopic, transport and magnetic properties”, Warwick University, UK, July 13-15, 2013 (invited)
- 21) L. Szunyogh: Finite temperature magnetism from first principles. Joint European Magnetic Symposia 2013, Rhodes, Greece, Aug. 25-30, 2013 (talk)
- 22) K. Palotás: STM contrast inversion of the Fe(110) surface. 6th International Workshop on Surface Physics (IWSP 2013), September 1-6, 2013, Niemcza, Poland. (talk)
- 23) K. Palotás: STM contrast inversion on flat metal surfaces W(110), Fe(110), Cr/Ag(111). Seminar at the CNR-SPIN L'Aquila, October 16, 2013, Chieti, Italy. (invited)
- 24) L. Szunyogh: Chiral asymmetry in nanomagnetism. Wigner-111 Scientific Symposium, 11-13 November 2013, Budapest, Hungary (invited)
- 25) L. Szunyogh: Mágneses anizotrópia és királis kölcsönhatás nanoszerkezetekben. Szeminárium, Debreceni Egyetem Szilárdtest Fizika Tanszék, 2013. nov. 22. (meghívott)

2014

- 1) K. Palotás: STM contrast: The role of the tip. Seminar at the Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool, March 18, 2014, Liverpool, UK. (invited)
- 2) K. Palotás: Interplay of orbital-dependent tunneling and spin-polarization in STM/STS. 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany. (talk)
- 3) L. Udvardi: Ab-initio spin dynamics for clusters. 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany. (talk)
- 4) G. Mándi: STM imaging of HOPG: Tip geometry effects. 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany. (talk)
- 5) A. Deák: Studying finite-temperature magnetism using relativistic disordered local moment theory. 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany. (talk)
- 6) A. Deák: Magnetic correlations in an Fe monolayer on Rh(001). 78th Spring Meeting of the German Physical Society (DPG Jahrestagung), March 30-April 4, 2014, Dresden, Germany. (poster)
- 7) L. Rózsa: Non-collinear Magnetic Configurations at Finite Temperature in Thin Films. IEEE International Magnetism Conference, Dresden, Germany, May 2014 (talk)
- 8) E. Simon: Magnetic structure of a Fe monolayer on 5d HCP transition metal surfaces. IEEE International Magnetism Conference, Dresden, Germany, May 2014 (poster)
- 9) A. Deák, E. Simon, L. Balogh, L. Szunyogh, M. dos Santos Dias, J. B. Staunton: Metallic magnetism at finite temperatures: a relativistic disordered local moment description. IEEE International Magnetism Conference, Dresden, Germany, May 2014 (poster)
- 10) K. Palotás: STM contrast: The role of the tip. Seminar at the Nanosurf Lab, Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, May 13, 2014, Prague, Czech Republic.(talk)

- 11) K. Palotás: STM contrast stability of HOPG: Role of the tip-orientation. Physics Boat 2014 Workshop: Atomic structure of nanosystems from first-principles simulations and microscopy experiments, June 3-5, 2014, Helsinki, Finland - Stockholm, Sweden. (talk)

Melléklet 2.

TDK munkák

Vajna Szabolcs: A Bychkov-Rashba effektus csoportelméleti vizsgálata (témavezető: Szunyogh László), 2010, BME TTK TDK 1. helyezés, valamint OTDK 2011 1. helyezés és különdíj

Rózsa Levente: Atomi spindinamika véges hőmérsékleten (témavezető: Udvardi László), 2011, BME TTK TDK 1. helyezés, Dékáni különdíj

Mándi Gábor: Orbital dependent vacuum decay in the simulation of scanning tunneling microscopy (témavezető: Palotás Krisztián), 2011, BME TTK TDK, Elméleti Fizika szekció, 3. helyezés

Vida György József: Effektív spin modellek ab initio számítások alapján (témavezető: Szunyogh László), 2012, BME TTK TDK 2. helyezés, és OTDK 2013 3. helyezés

Seress Máttyás: Simulation of differential conductance spectra on the Co/Ag(111) Moire-structured surface (témavezető: Palotás Krisztián), 2013, BME TTK TDK, Kísérleti Fizika szekció, dícséret

Diplomamunkák

Deák András: Dzsalsinszkij--Moriya-kölcsönhatás fémekben, BSc szakdolgozat 2009, témavezető Szunyogh László

Rózsa Levente: Spindinamika véges hőmérsékleten, BSc szakdolgozat 2010, témavezető: Udvardi László

Vida György József: Nem-egyensúlyi mágneses állapotok számítása szilárdtestekben, BSc szakdolgozat 2011, témavezető: Szunyogh László

Seress Máttyás: Simulation of electronic structure properties of metal-metal interfaces, BSc szakdolgozat 2014, témavezető: Palotás Krisztián

Deák András: Mágneses kölcsönhatások nanoszerkezetekben, MSc diploma 2011, témavezető: Szunyogh László

Rózsa Levente: Ab initio spindinamika, MSc diplomamunka 2012, témavezető: Udvardi László.

Mándi Gábor: Orbital dependent vacuum decay in the simulation of scanning tunneling microscopy, MSc diploma 2012, témavezető: Palotás Krisztián

Vida György József: First principles calculation of non-collinear magnetic states, MSc diploma 2013, témavezető: Szunyogh László

Nagyfalusi Balázs: Kisméretű kölcsönható rendszerek természetes pályáinak meghatározása, MSc diploma 2013, témavezető: Udvardi László

Lászlóffy András: Mágneses kölcsönhatások nanoszerkezetekben, MSc diplomamunka, folyamatban 2014 február óta, témavezetők: Szunyogh László, Udvardi László

Doktori munkák

Szilva Attila: Elektron korreláció és relativisztikus effektusok redukált dimenziójú rendszerekben, PhD értekezés, védés: BME TTK 2010, témavezető: Szunyogh László

Simon Eszter: Felületi mágneses szennyezők kölcsönhatásának elméleti vizsgálata, PhD értekezés, védés: ELTE TTK 2012.09.04, témavezető: Újfalu Balázs

Deák András: Mágneses heteroszerkezetek elméleti vizsgálata, folyamatban 2011. szept. 1-től, témavezető: Szunyogh László

Mándi Gábor: Simulation of scanning tunneling microscopy from first principles, PhD munka, folyamatban 2012. szept 1-től, témavezető: Palotás Krisztián

Vida György József: Kicserélődési kölcsönhatások és spin-dinamika mágneses ötvözetekben, PhD munka, folyamatban 2013. szept 1-től, témavezető: Szunyogh László

Nagyfalusi Balázs: Mágneses nanostruktúrák elméleti vizsgálata, PhD munka, folyamatban 2014. szept. 1-től, témavezető: Udvardi László