



Universidad Autónoma de San Luis Potosí
Facultad de Ciencias

Estudio teórico de propiedades magnéticas en [Pt,V] (Se,S)₂ y experimentación de efecto Kerr en CoFeB

Examen de defensa de tesis

Gabriel Adonaí Martínez Zepeda
Asesor: Dr. Raúl Balderas Navarro

3 de septiembre de 2021

Contenidos I

1 Introducción

2 Estudio teórico de materiales Bidimensionales

- Teoría Funcional de la densidad
 - Teoremas de Hohenberg-Kohn
 - Ecuaciones de Kohn-Sham
- Métodos computacionales
 - Materiales
 - Creación del modelo de la vacancia de metal de transición
 - Deformaciones mecánicas
- Resultados de la simulaciones
 - Materiales sin defectos
 - Estudio de vacancia de metal de transición
 - Efectos de la deformación mecánica en la magnetización

3 Estudio experimental de efecto Kerr

- Efecto Kerr magneto-óptico
- Montaje Experimental

Contenidos II

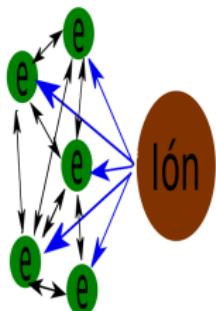
- Programas de control
- Análisis del espectro
 - Análisis de Jones
- mediciones

4 conclusiones

5 Bibliografía

Introducción

- Los procesos físicos basados en el spin representan una parte fundamental en el estudio de la materia condensada y, aunque existen todavía algunas cuestiones que no han sido explicadas satisfactoriamente, como el acople spin-órbita, la interacción fotón-spin, el ordenamiento de spines en bajas dimensiones.
- Se busca el estudio de propiedades magnéticas en materiales bidimensionales, además de estudiar la variación de ésta si se le aplica una deformación mecánica.
- se implementó un sistema de espectroscopía Kerr para el estudio de materiales magnéticos.



Perspectiva
de muchos
cuerpos

Perspectiva
de DFT

Figura 1: Idea de la Teoría Funcional de la Densidad.

Ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos

La ecuación fundamental para cálculos *ab initio* es la de Schrödinger cuyo Hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \\ - \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} \quad (1)$$

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Teoría Funcional de la densidad

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{int} + E_{II} \quad (2)$$

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Teoría Funcional de la densidad

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{int} + E_{II} \quad (2)$$

$$\hat{T} = \sum_i -\frac{1}{2} \nabla_i^2, \quad (3)$$

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Teoría Funcional de la densidad

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{int} + E_{II} \quad (2)$$

$$\hat{T} = \sum_i -\frac{1}{2} \nabla_i^2, \quad (3)$$

$$\hat{V}_{ext} = \sum_{i,I} V_I(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|), \quad (4)$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{int} + E_{II} \quad (2)$$

$$\hat{T} = \sum_i -\frac{1}{2} \nabla_i^2, \quad (3)$$

$$\hat{V}_{ext} = \sum_{i,I} V_I(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|), \quad (4)$$

$$\hat{V}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (5)$$

Definiciones de la densidad y magnetización

- Densidad de electrones:

$$n_{s',s}(\mathbf{r}) = \delta_{s',s} \sum_i \psi_{i,s'}^*(\mathbf{r}) n_{i,s} \psi_{i,s}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Definiciones de la densidad y magnetización

- Densidad de electrones:

$$n_{s',s}(\mathbf{r}) = \delta_{s',s} \sum_i \psi_{i,s'}^*(\mathbf{r}) n_{i,s} \psi_{i,s}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

- Magnetización:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = -\mu_B \sum_{s,s'} \sigma_{s,s'} n_{s',s}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

Primer teorema de Hohenberg-Kohn

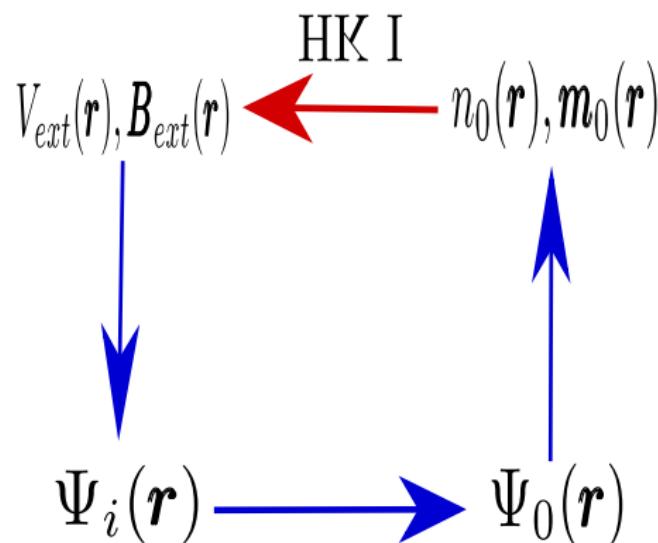


Figura 2: Representación esquemática del primer teorema de Hohenberg-Kohn

Segundo teorema de Hohenberg-Kohn

$$E_0 = \min_{n \rightarrow n_0, m \rightarrow m_0} E_{V_{ext}, \mathbf{B}_{ext}}[n, m]. \quad (8)$$

Segundo teorema de Hohenberg-Kohn

$$E_0 = \min_{n \rightarrow n_0, \mathbf{m} \rightarrow \mathbf{m}_0} E_{V_{ext}, \mathbf{B}_{ext}}[n, \mathbf{m}]. \quad (8)$$

$$E_{V_{ext}, \mathbf{B}_{ext}}[n, \mathbf{m}] = F[n, \mathbf{m}] + \int d\mathbf{r} \{ V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) \} + E_{II}, \quad (9)$$

Segundo teorema de Hohenberg-Kohn

$$E_0 = \min_{n \rightarrow n_0, \mathbf{m} \rightarrow \mathbf{m}_0} E_{V_{ext}, \mathbf{B}_{ext}}[n, \mathbf{m}]. \quad (8)$$

$$E_{V_{ext}, \mathbf{B}_{ext}}[n, \mathbf{m}] = F[n, \mathbf{m}] + \int d\mathbf{r} \{ V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) \} + E_{II}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} F[n, \mathbf{m}] &= \langle \Psi_0[n, \mathbf{m}] | \hat{T} + \hat{V}_{int} | \Psi_0[n, \mathbf{m}] \rangle \\ &= T[n, \mathbf{m}] + V_{int}[n, \mathbf{m}]. \end{aligned} \quad (10)$$

Ecuaciones de Kohn-Sham

$$(H_{KS}^s - \epsilon_{i,s}) \psi_{i,s}(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

Ecuaciones de Kohn-Sham

$$(H_{KS}^s - \epsilon_{i,s}) \psi_{i,s}(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

$$H_{KS}^s = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS}^s(\mathbf{r}), \quad (12)$$

Ecuaciones de Kohn-Sham

$$(H_{KS}^s - \epsilon_{i,s}) \psi_{i,s}(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

$$H_{KS}^s = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS}^s(\mathbf{r}), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} V_{KS}^s(\mathbf{r}) &= V_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{Hartree}}{\delta n_s(\mathbf{r})} + \frac{\delta E_{XC}^s}{\delta n_s(\mathbf{r})} \\ &= V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{Hartree}(\mathbf{r}) + V_{XC}^s(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (13)$$

$$E_{Hartree} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (14)$$

$$E_{XC}^s[n] = \langle \hat{T} \rangle - T_{sp}[n] + \langle \hat{V}_{int} \rangle - E_{Hartree}[n], \quad (15)$$

Ecuaciones de kohn-Sham para el caso no colineal

$$\sum_s \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{Hartree}(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \right] \delta_{s',s} \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s) - \mu_B \sum_s [\mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_{XC}(\mathbf{r})] \sigma_{s,s'} \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s) = \varepsilon_\Lambda \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s), \quad (16)$$

Ecuaciones de kohn-Sham para el caso no colineal

$$\sum_s \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{Hartree}(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \right] \delta_{s',s} \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s) - \mu_B \sum_s [\mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_{XC}(\mathbf{r})] \sigma_{s,s'} \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s) = \varepsilon_\Lambda \phi_\Lambda(\mathbf{r}, s), \quad (16)$$

$$B_{XCj}(\mathbf{r}) = -\frac{\delta E_{XC}[n, \mathbf{m}]}{\delta m_j(\mathbf{r})},$$

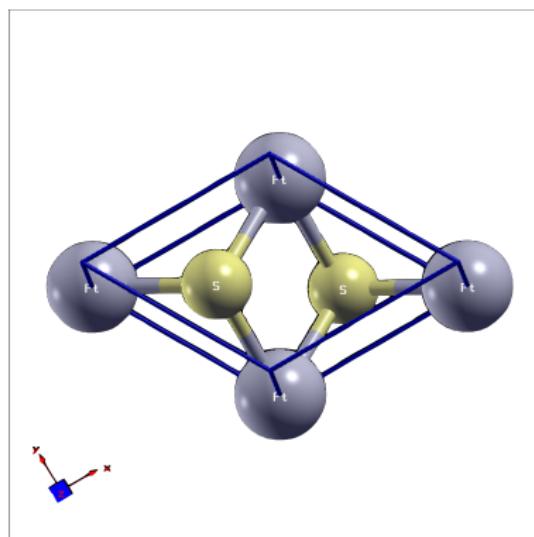
Métodos computacionales

- Se Utiliza el software Quantum-Espresso para realizar los cálculos de primeros principios.

Métodos computacionales

- Se Utiliza el software Quantum-Espresso para realizar los cálculos de primeros principios.
- Se utilizan dos computadoras que se encuentran equipadas con un procesador con 8 núcleos y 32 GB de memoria RAM.

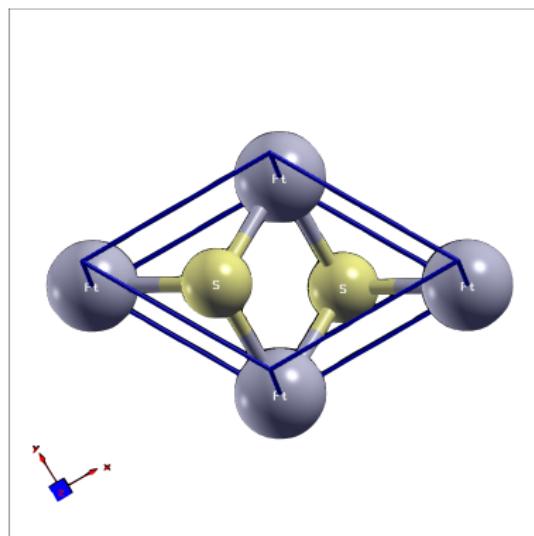
Materiales



- Estructura 1T.

Figura 3: Supercelda para cálculos sin defectos.

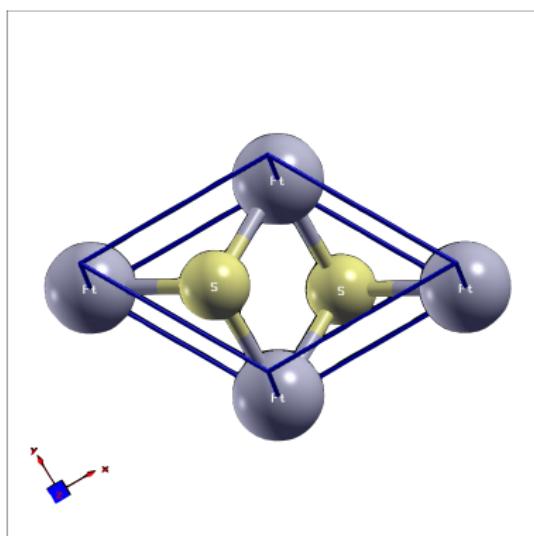
Materiales



- Estructura 1T.
- PtSe₂, PtS₂, VSe₂ y VS₂

Figura 3: Supercelda para cálculos sin defectos.

Materiales



- Estructura 1T.
- PtSe₂, PtS₂, VSe₂ y VS₂
- Modelos de materiales creados en VESTA a partir de estructuras disponibles en una base de datos en donde se le agrega una capa de vacío.

Figura 3: Supercelda para cálculos sin defectos.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Métodos computacionales

Tabla periódica

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

The table includes a central box for Hydrogen with its atomic mass (1.00794), ionization energy (1312.0), oxidation states (-1 to +1), name, and electron configuration (1s¹). A legend on the right identifies element groups: Alkal metals (purple), Alkaline metals (light purple), Transition metals (yellow), Other metals (green), Lanthanoids (orange), Actinoids (dark orange), Metalloids (light green), Nonmetals (green), Halogens (blue), Noble gases (cyan), and Unknown elements (grey).

Period	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H																		
2	Li	Be																	
3	Na	Mg																	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uut	Uuo	Uup	Uuh	Uus	Po	At	Rn

Period	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	La	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb					
2	Ac	Th	Pa	U	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No					

Orbitales de los átomos utilizados

- Metales de transición:

Orbitales de los átomos utilizados

- Metales de transición:
 - Pt $\leftarrow 5d^9 6s^1\right.$

Orbitales de los átomos utilizados

- Metales de transición:
 - Pt \leftarrow 5d⁹ 6s¹
 - V \leftarrow 3d³ 4s²

Orbitales de los átomos utilizados

- Metales de transición:
 - Pt \leftarrow 5d⁹ 6s¹
 - V \leftarrow 3d³ 4s²
- Calcógenos:
 - S \leftarrow 3s² 3p⁴

Orbitales de los átomos utilizados

- Metales de transición:

- Pt \leftarrow 5d⁹ 6s¹
- V \leftarrow 3d³ 4s²

- Calcógenos:

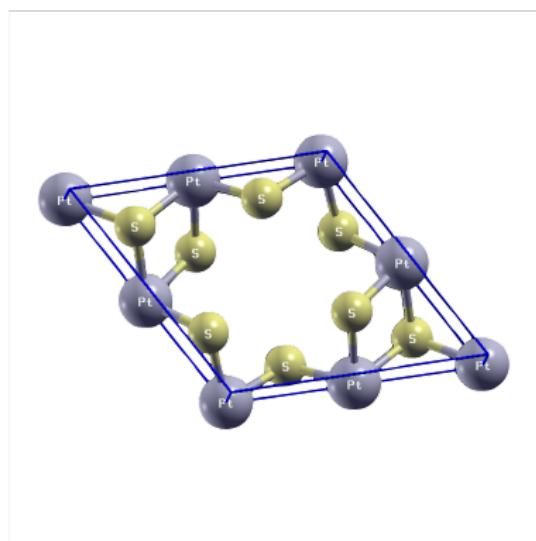
- S \leftarrow 3s² 3p⁴
- Se \leftarrow 4s² 4p⁴

Valores para la energía de corte y mapeo de Monkhorst y Pack

Tabla 1: Muestra los valores para la energía de corte y el mapeo en el espacio recíproco (mapeo de Monkhorst y Pack) para las estructuras utilizadas en este trabajo.

Material	E_{corte} (Ry)	mapeo de Monkhorst y Pack ($k \times k \times 1$)
PtS_2	60	$11 \times 11 \times 1$
$PtSe_2$	63	$11 \times 11 \times 1$
VS_2	80	$21 \times 21 \times 1$
VSe_2	84	$21 \times 21 \times 1$

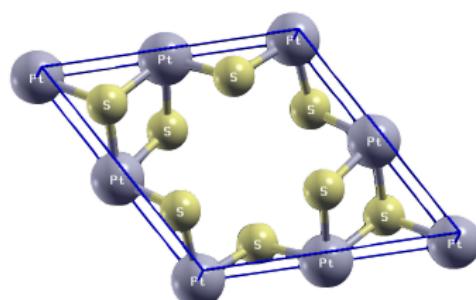
Creación del modelo de la vacancia de metal de transición



- Se crean con VESTA repitiendo dos veces la celda unitaria en las direcciones a y b

Figura 4: Supercelda para cálculos con vacancia del metal de transición.

Creación del modelo de la vacancia de metal de transición



- Se crean con VESTA repitiendo dos veces la celda unitaria en las direcciones a y b
- Es necesario realizar una optimización geométrica.

Figura 4: Supercelda para cálculos con vacancia del metal de transición.

Deformaciones mecánicas

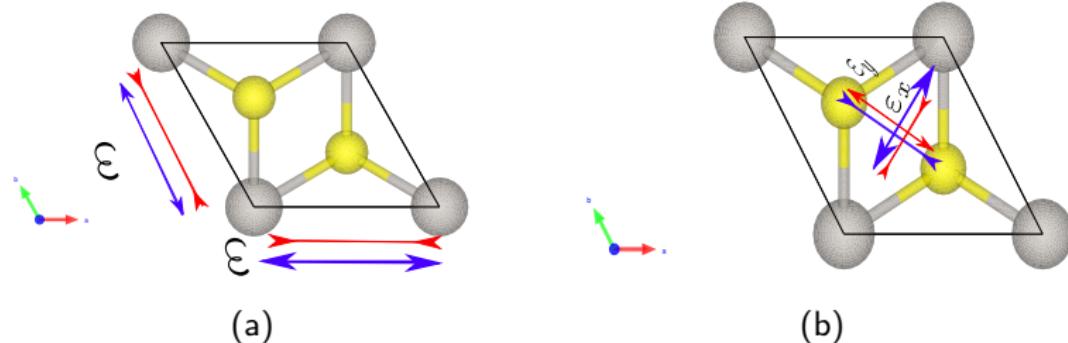


Figura 5: Deformaciones estudiadas en este trabajo. 5(a) Muestra la aplicación de una deformación isotrópica en dirección de los ejes cristalinos y 5(b) una deformación dirigida en la dirección de los ejes cartesianos.

- Para el cálculo de la deformación se utiliza la siguiente expresión:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0}. \quad (17)$$

- Para el cálculo de la deformación se utiliza la siguiente expresión:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0}. \quad (17)$$

- Después de aplicar esta deformación es necesario realizar una optimización geométrica para que los átomos se coloquen en su nueva posición de equilibrio.

Parámetros de los cálculos auto consistentes

- Se utiliza la aproximación de PBE para la funcional E_{XC} .

Parámetros de los cálculos auto consistentes

- Se utiliza la aproximación de PBE para la funcional E_{XC} .
- Se emplea el pseudo potencial PAW con correcciones relativistas (para cálculos de magnetización no colineal) y sin estas (para el caso colineal).

Parámetros de los cálculos auto consistentes

- Se utiliza la aproximación de PBE para la funcional E_{XC} .
- Se emplea el pseudo potencial PAW con correcciones relativistas (para cálculos de magnetización no colineal) y sin estas (para el caso colineal).
- Para el cálculo de optimización geométrica se utiliza el algoritmo BFGS.

Puntos en la primera zona de Brillouin

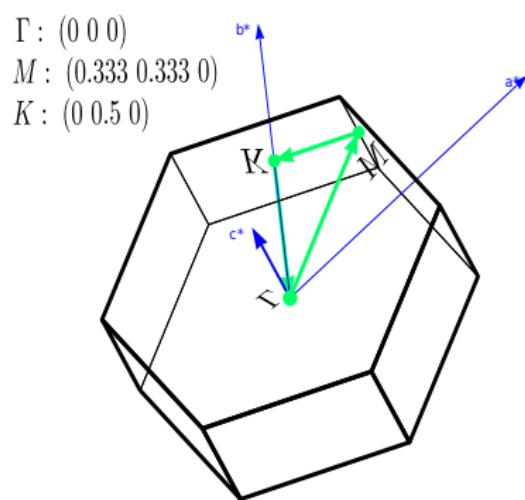
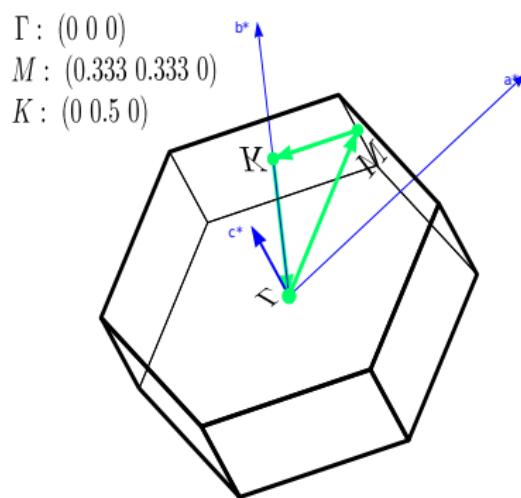


Figura 6: Primera zona de Brillouin con sus puntos especiales.

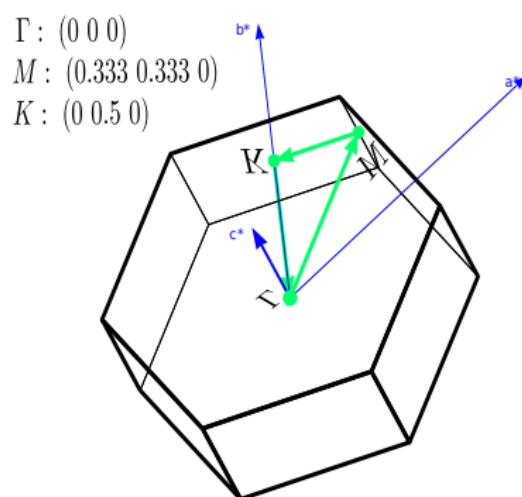
Puntos en la primera zona de Brillouin



- $K - \Gamma - M - K$ para el PtSe₂ y PtS₂

Figura 6: Primera zona de Brillouin con sus puntos especiales.

Puntos en la primera zona de Brillouin

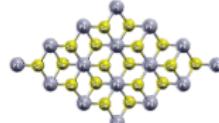
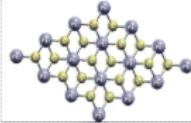


- $K - \Gamma - M - K$ para el PtSe₂ y PtS₂
- $\Gamma - M - K - \Gamma$ para el VSe₂ y VS₂

Figura 6: Primera zona de Brillouin con sus puntos especiales.

Materiales sin defectos

PtSe₂ y PtS₂

Material	Celda	Constante de Red (Å)	Magnetización
PtSe ₂		3.7610	0 $\mu_B/celda$
PtS ₂		3.5785	0 $\mu_B/celda$

Materiales sin defectos

VSe₂ y VS₂

Material	Celda	Constante de Red (Å)	Magnetización
VSe ₂		3.3403	$0.62\mu_B/celda$
VS ₂		3.1939	$0.55\mu_B/celda$

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

VSe₂

Diagrama de Bandas y Densidad de estados

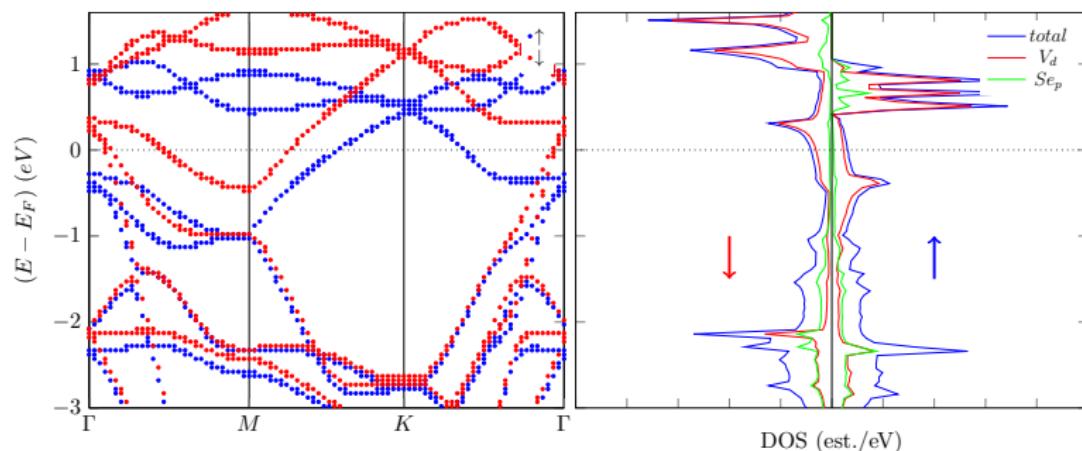


Figura 7: Diagrama de bandas y densidad de estados del VSe₂ sin efecto spin-órbita.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

 VS_2

Diagrama de Bandas y Densidad de estados

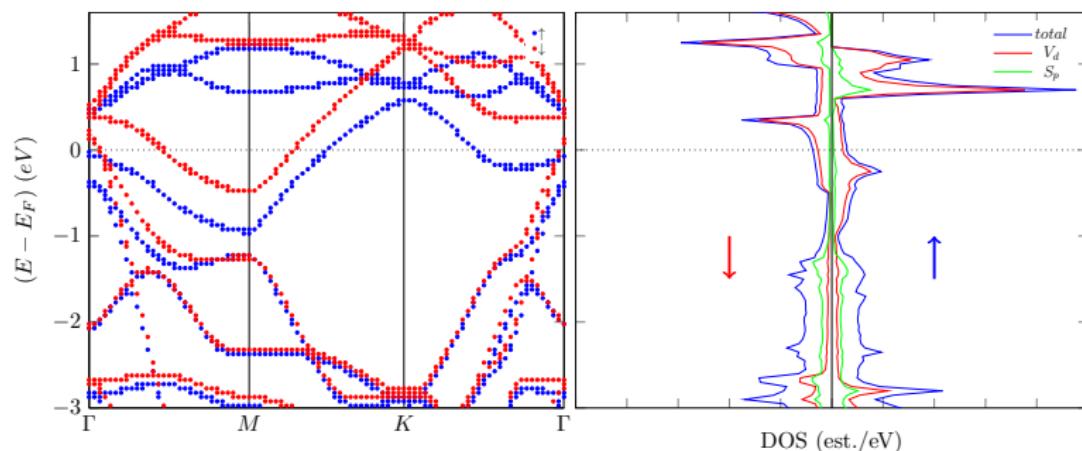


Figura 8: Diagrama de bandas y densidad de estados del VS_2 sin efecto spin-órbita.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

VSe₂

Densidad de spin

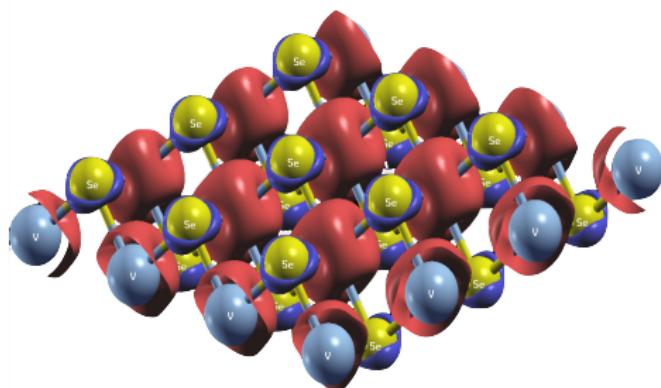


Figura 9: Distribución de spin en el VSe₂.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

VS₂

Densidad de spin

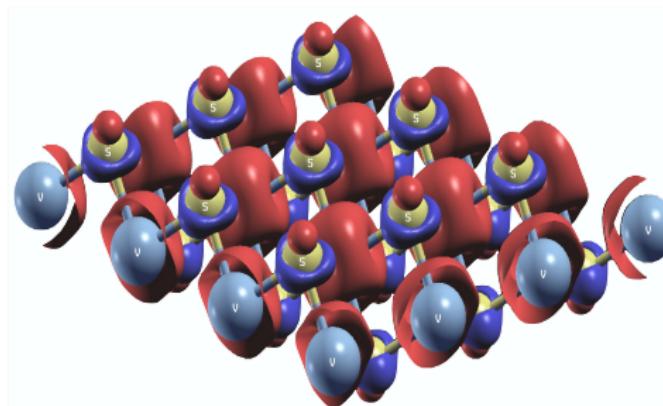
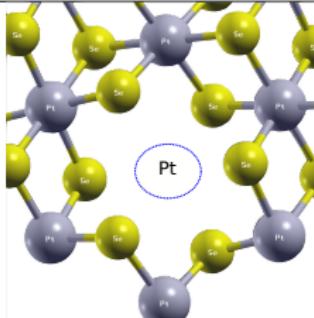
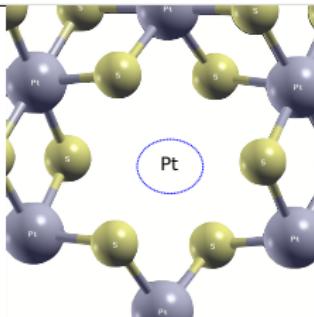


Figura 10: Distribución de spin en el VS₂.

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Material	Celda	Momento magnético
PtSe ₂		$2.37\mu_B/celda$
PtS ₂		$2.63\mu_B/celda$

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Densidad de carga

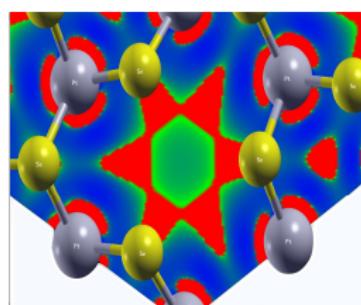
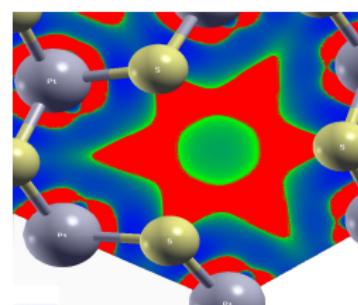
(a) PtSe₂(b) PtS₂

Figura 11: Distribución de carga alrededor de la vacancia de platino en PtSe₂ (11(a)), y en PtS₂ (11(a)).

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Diagrama de bandas y densidad de estados del PtSe₂

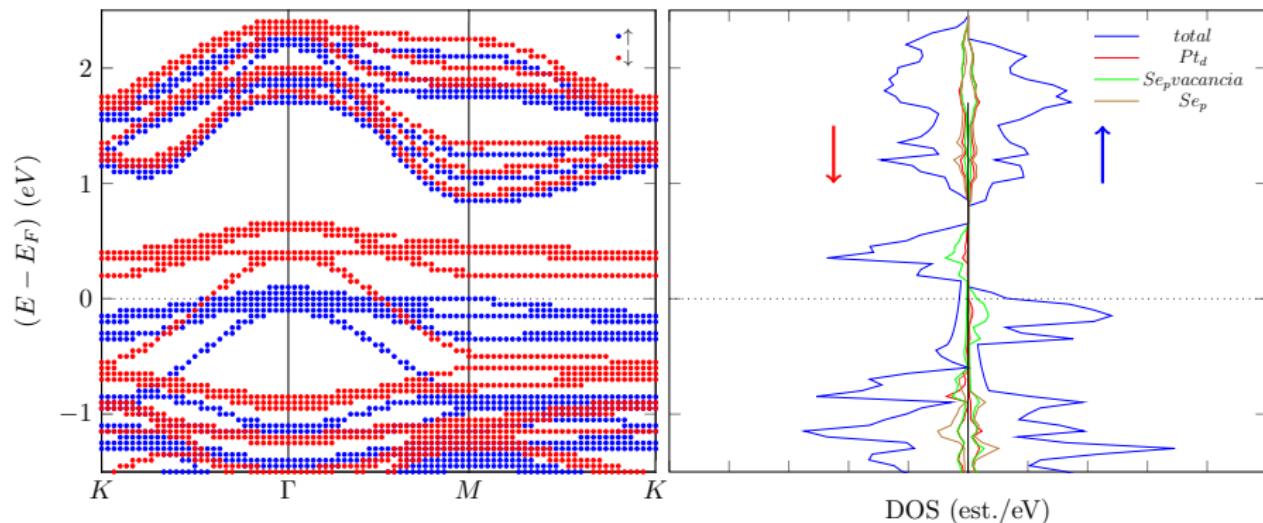


Figura 12: Diagrama de bandas y densidad de estados sin incluir el efecto de spin órbita en el PtSe₂.

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Diagrama de bandas y densidad de estados del PtS₂

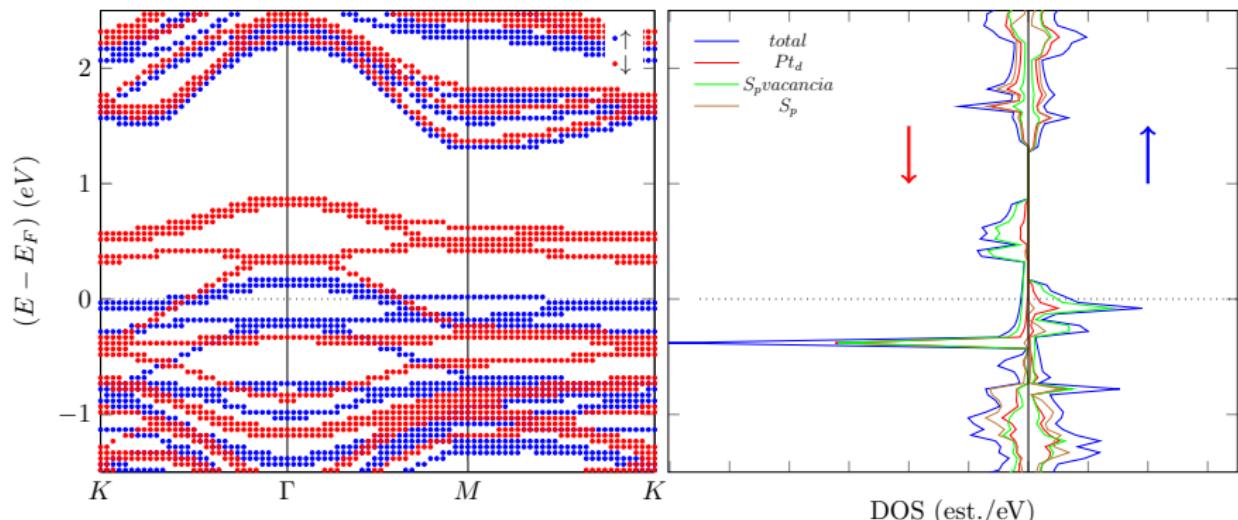
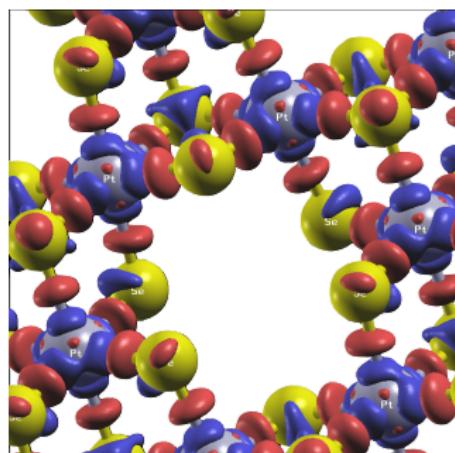


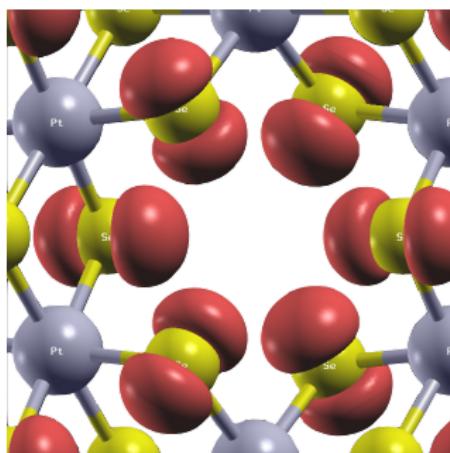
Figura 13: Diagrama de bandas y densidad de estados del PtS₂.

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Densidad de carga y de spin en PtSe₂



(a) densidad de carga

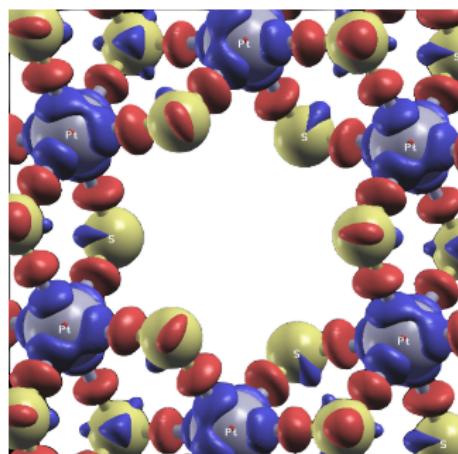


(b) densidad de spines

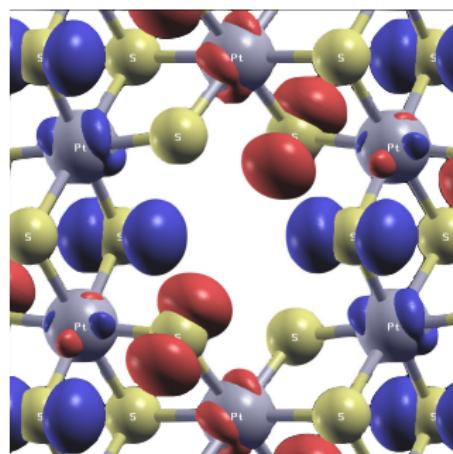
Figura 14: Isosuperficies de la densidad de carga (14(a)) y la densidad de spines (14(b)) del PtSe₂ con un valor de $0.001e/Å^3$.

Vacancia de Platino en PtSe₂ y PtS₂

Densidad de carga y de spin en PtS₂



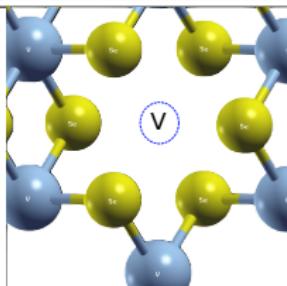
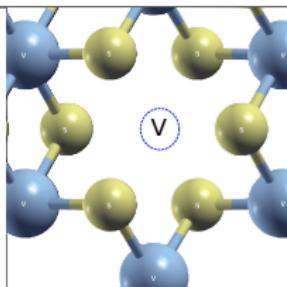
(a) densidad de carga



(b) densidad de spines

Figura 15: Isosuperficies de la densidad de carga (15(a)) y la densidad de spines (15(b)) del PtS₂ con un valor de 0.001e/³.

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂

Material	Celda	Momento magnético
VSe ₂		$0.48\mu_B/celda$
VS ₂		$0.76\mu_B/celda$

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂

Densidad de carga

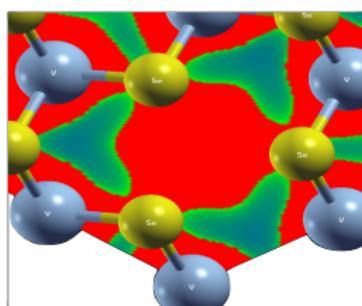
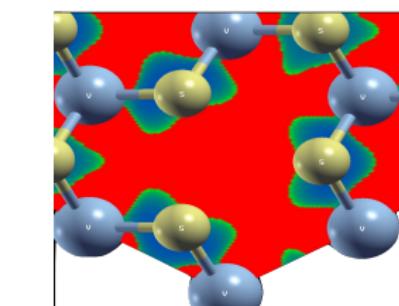
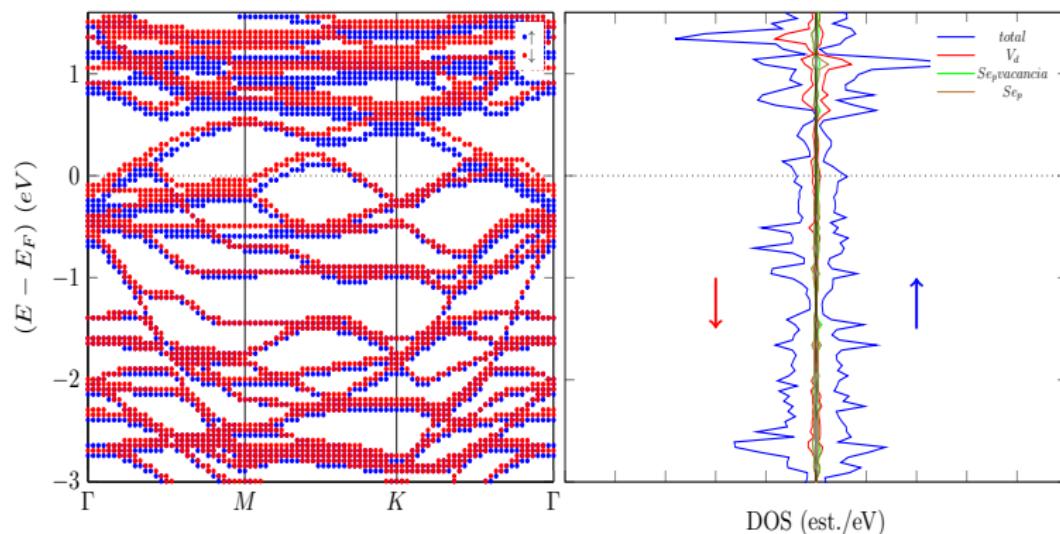
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 16: densidad de carga en la región de la vacancia en el VSe₂ y VS₂ visualizada con XcrySDen

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂Diagrama de bandas y densidad de estados del VSe₂Figura 17: Diagrama de bandas y la densidad de estados para el VSe₂.

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂

Diagrama de bandas y densidad de estados del VS₂

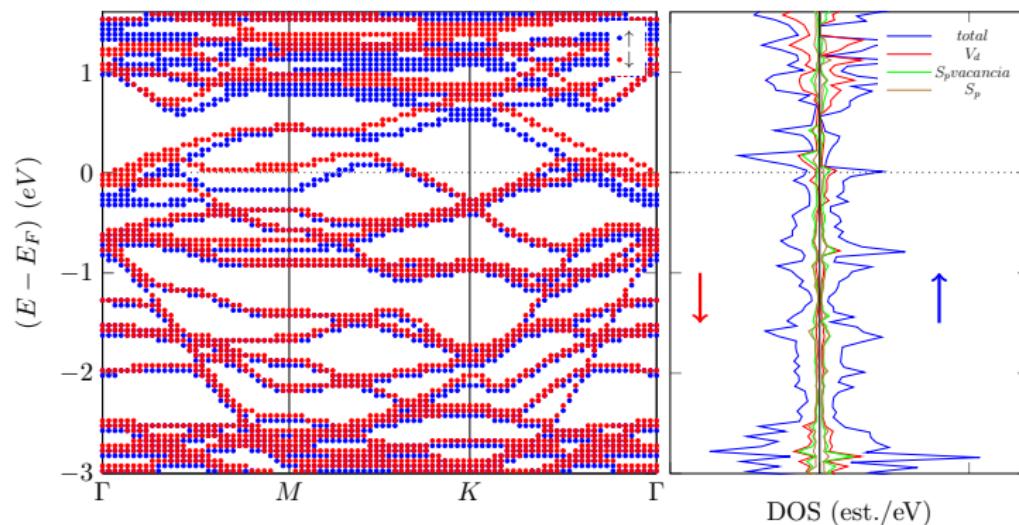
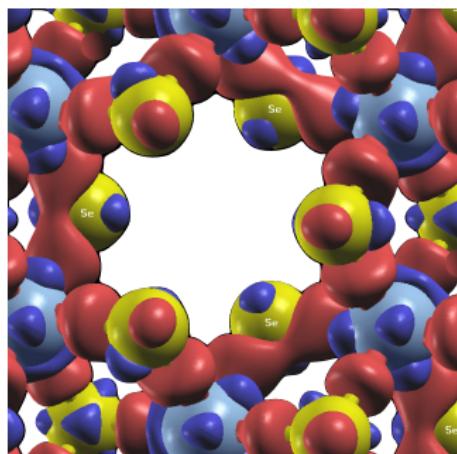


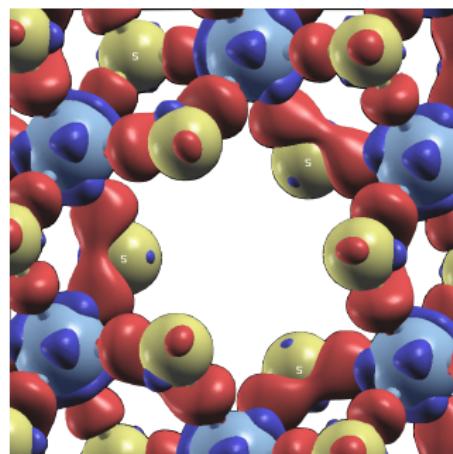
Figura 18: Diagrama de bandas y Densidad de Estados del VS₂.

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂

Densidad de carga en VSe₂ y VS₂



(a) VSe₂



(b) VS₂

Figura 19: Iso superficies de la densidad de carga con un valor de $\pm 0.001e/3$

Vacancia de Vanadio en VSe₂ y VS₂

Densidad de spin en VSe₂ y VS₂

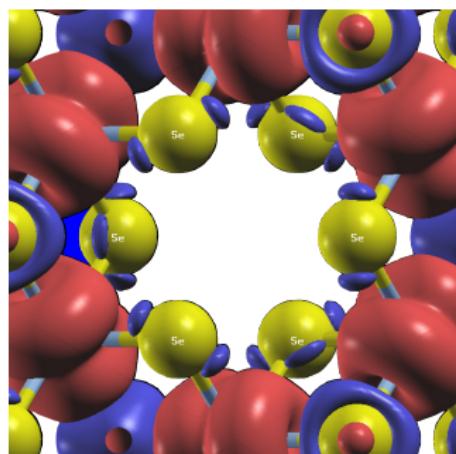
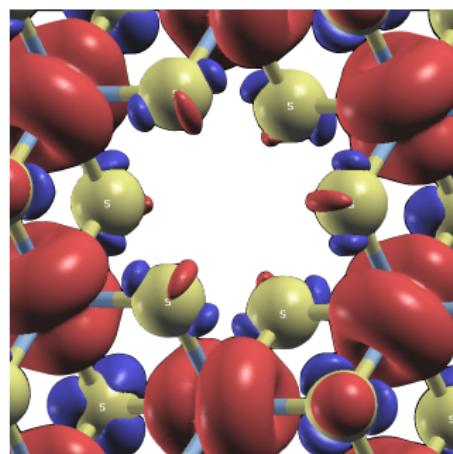
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 20: Iso superficies de la densidad de spines con un valor de $\pm 0.0002e/3$

Deformación isotrópica en VSe₂ y VS₂

Magnetización

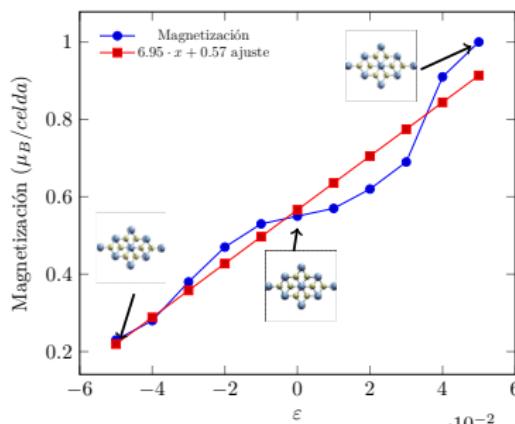
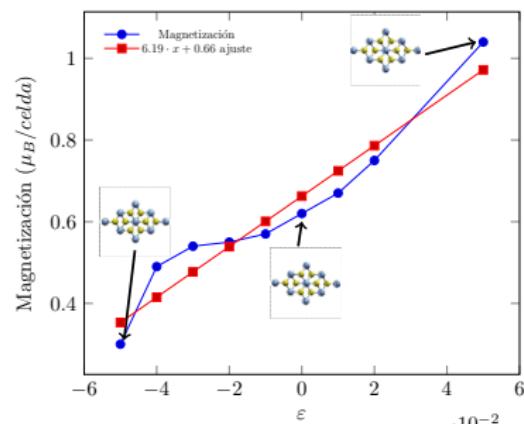
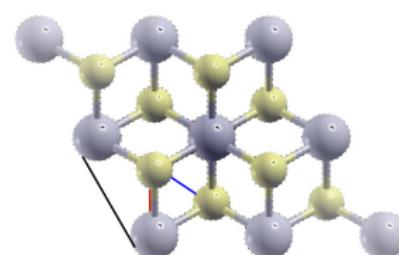


Figura 21: Gráficas de la magnetización en función de la deformación isotrópica en VSe₂ y VS₂ mostrando el ajuste lineal de los datos.

Deformación isotrópica en VSe₂ y VS₂

Análisis de distancias



- V – V
- V-Se,S
- Se,S-Se,S

Figura 22: Distancias entre átomos en el VSe₂ y VS₂ en donde las esferas grises representan el vanadio y las amarillas El Azufre o Selenio.

Deformación isotrópica en VSe₂ y VS₂

Cambio en distancia entre átomo de Azufre o Selenio y Vanadio

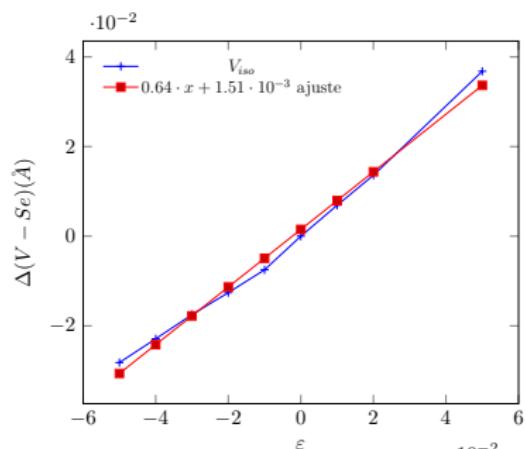
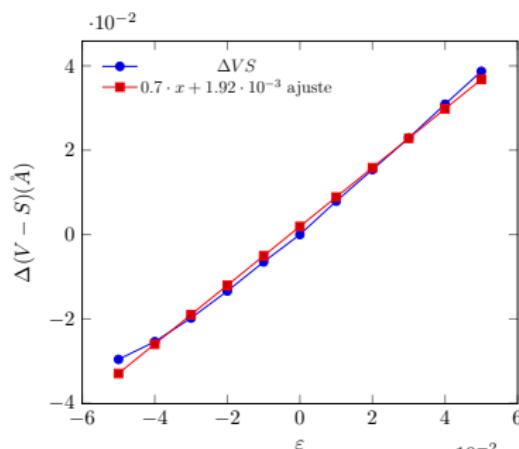
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 23: Cambio en la distancia entre dos átomos de Selenio en VSe₂ y Azufre en VS₂.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Deformación isotrópica en VSe₂ y VS₂

magnetización de cada átomo

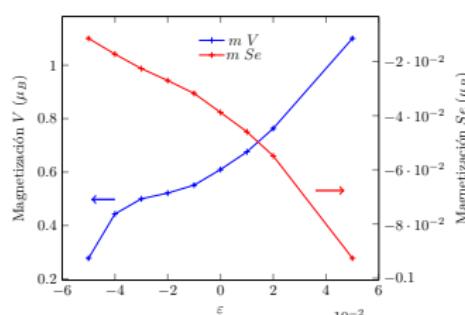
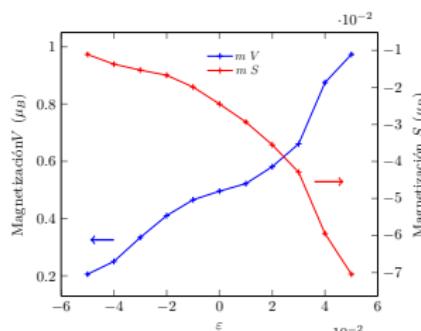
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 24: magnetización del átomo de vanadio y selenio o Azufre en el VSe₂ (24(a)) y VS₂ (24(b)) bajo una deformación isotrópica.

Deformación anisotrópica en VSe₂ y VS₂

Magnetización

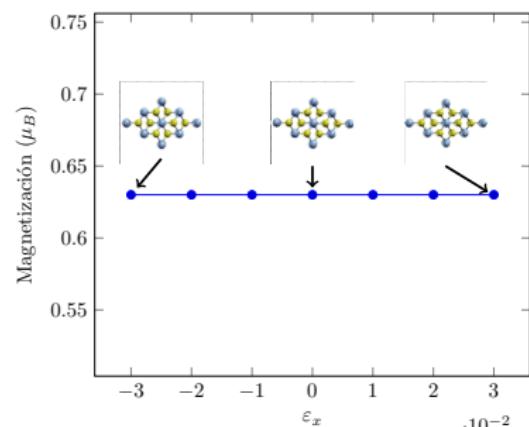
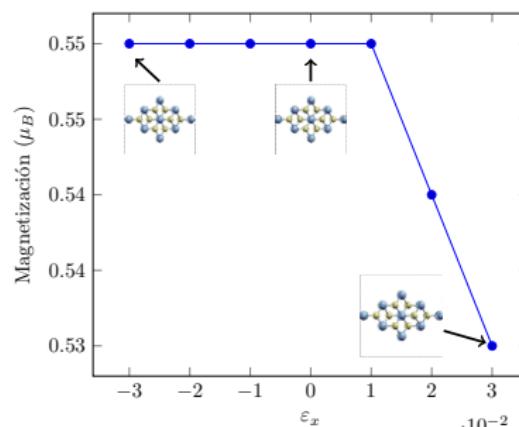
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 25: Gráficas de la magnetización en función de la deformación anisotrópica en VSe₂ y VS₂.

Deformación anisotrópica en VSe₂ y VS₂

Análisis de distancias

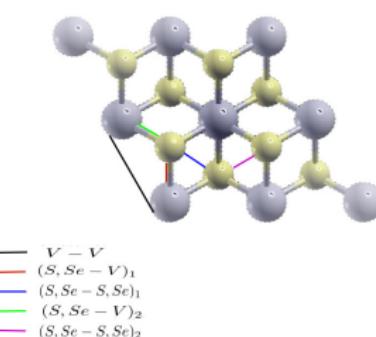


Figura 26: Distancias entre átomos en el VSe₂ y VS₂ en la deformación anisotrópica, las esferas grises representan el vanadio y las amarillas El Azufre o Selenio.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Deformación anisotrópica en VSe₂ y VS₂

Cambio en distancia entre átomo de Azufre o Selenio y Vanadio

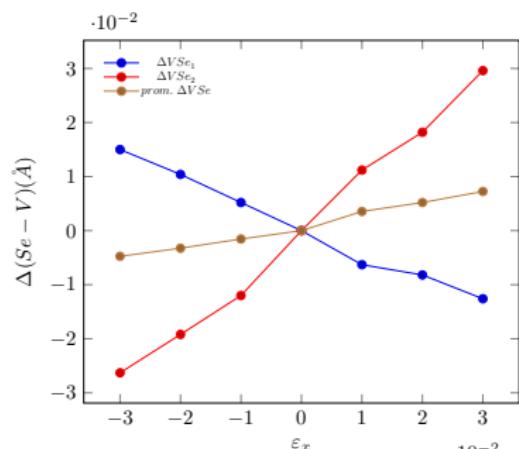
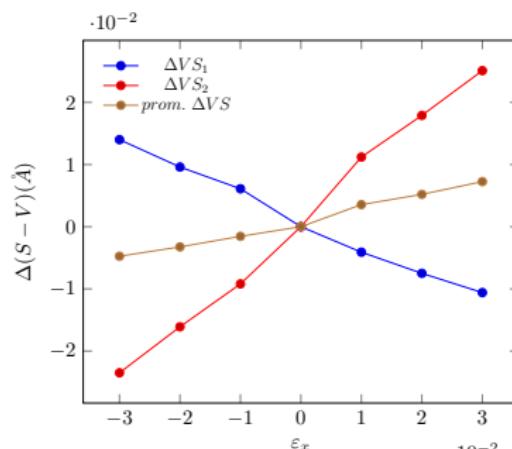
(a) VSe₂(b) VS₂

Figura 27: variación de las distancias entre átomos de Selenio en el VSe₂ y de Azufre en VS₂.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Deformación anisotrópica en VSe₂ y VS₂

magnetización de cada átomo

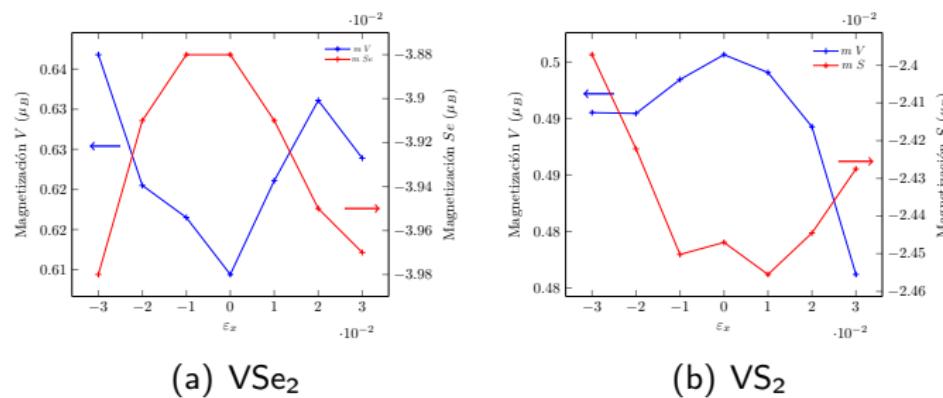


Figura 28: magnetización del átomo de vanadio y selenio o Azufre en el Vse2 (28(a)) y VS₂ (28(b)) bajo una deformación anisotrópica.

Deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Magnetización

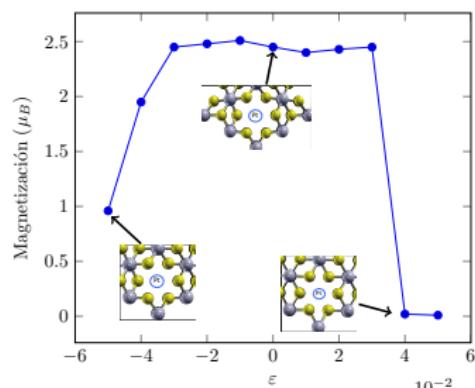
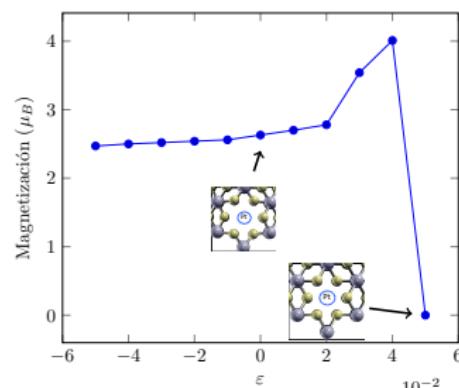
(a) PtSe₂(b) PtS₂

Figura 29: Magnetización en función de una deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂ con una vacancia de Platino

Deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Análisis de distancias

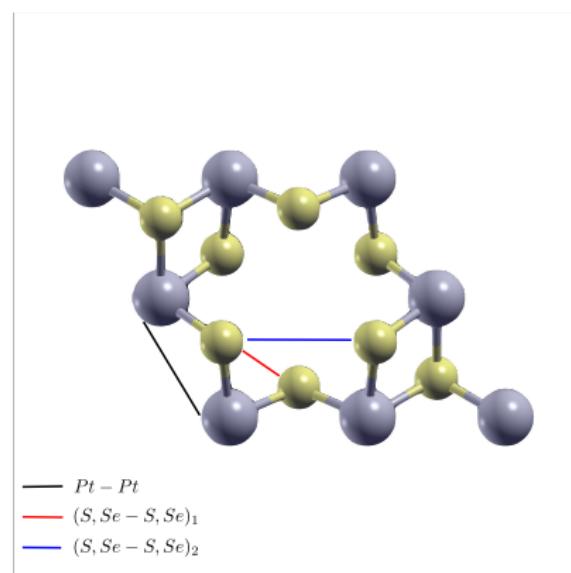
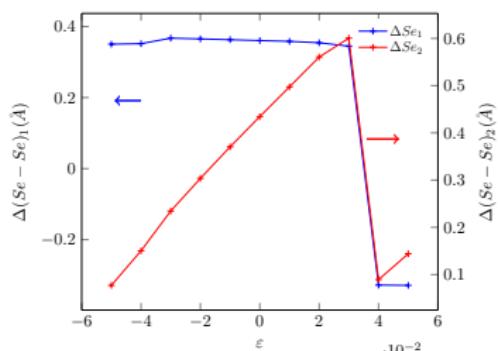


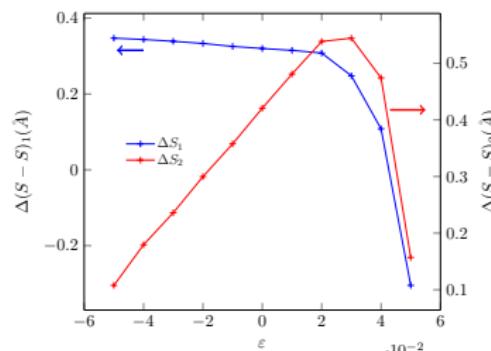
Figura 30: Distancias entre átomos que se utilizan para estudiar una desinformación isotrópica, las esferas grises representan los átomos de Platino y las amarillas a átomos de Selenio o azufre.

Deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Cambio en distancia entre átomos de Azufre o Selenio



(a) PtSe_2



(b) PtS_2

Figura 31: Comparación del cambio entre átomos de Selenio en el PtSe_2 (31(a)) y de Azufre en PtS_2 (31(b).)

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂

magnetización de cada átomo

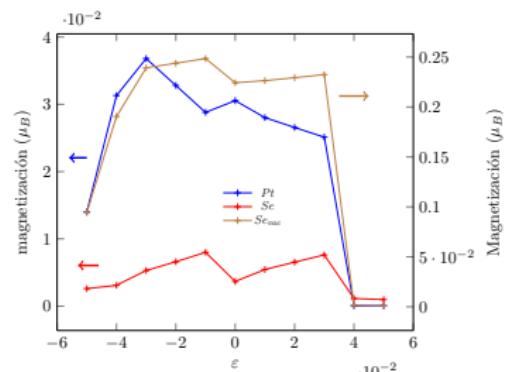
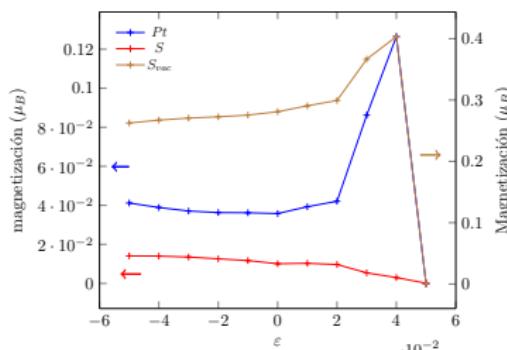
(a) PtSe_2 (b) PtS_2

Figura 32: magnetización correspondiente a cada átomo de PtSe_2 y PtS_2 sujetos a una deformación isotrópica

Deformación anisotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Magnetización

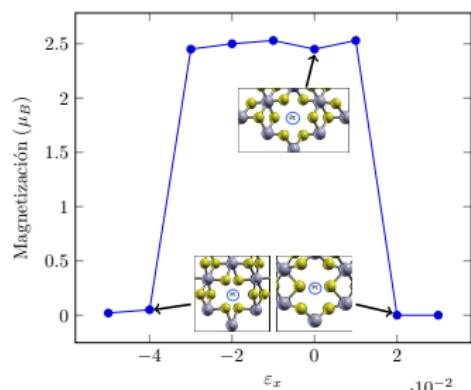
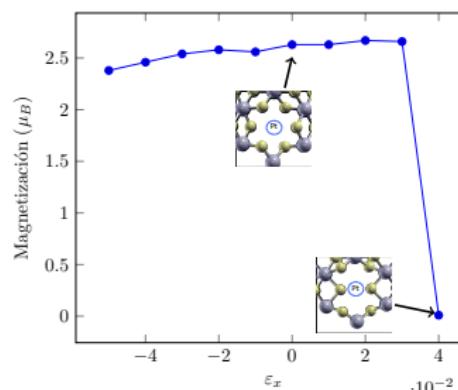
(a) PtSe₂(b) PtS₂

Figura 33: Magnetización en función de una deformación isotrópica en PtSe₂ y PtS₂ con una vacancia de Platino

Deformación anisotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Análisis de distancias

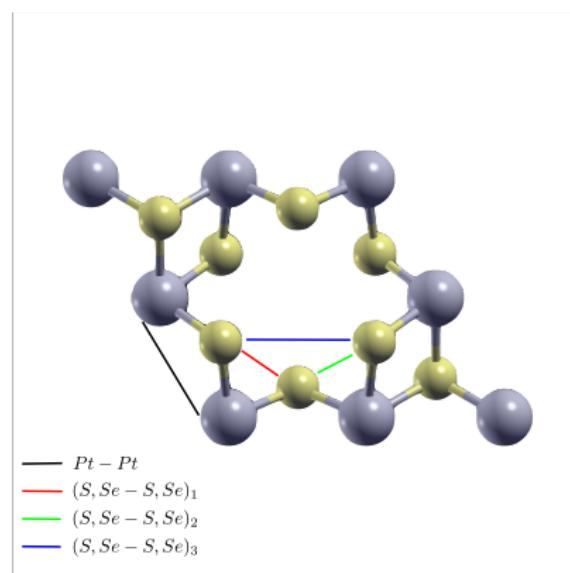


Figura 34: Distancias entre átomos que se utilizan para estudiar una desinformación anisotrópica, las esferas grises representan los átomos de Platino y las amarillas a átomos de Selenio o azufre.

Deformación anisotrópica en PtSe₂ y PtS₂

Cambio en distancia entre átomos de Azufre o Selenio

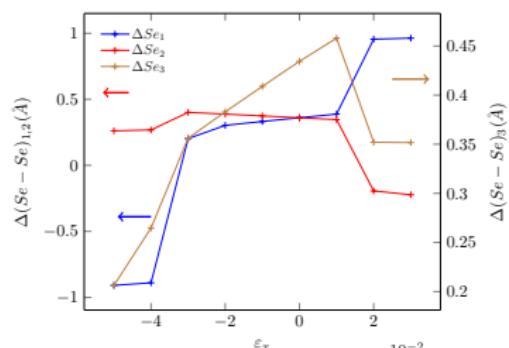
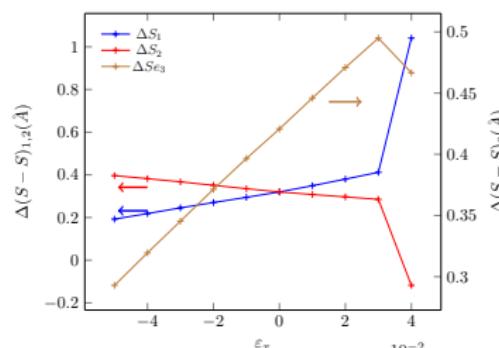
(a) PtSe₂(b) PtS₂

Figura 35: Comparación del cambio entre átomos de Selenio en el PtSe₂ (35(a)) y de Azufre en PtS₂ (35(b)) en una deformación anisotrópica.

Estudio teórico de materiales Bidimensionales

Resultados de la simulaciones

Deformación anisotrópica en PtSe₂ y PtS₂

magnetización de cada átomo

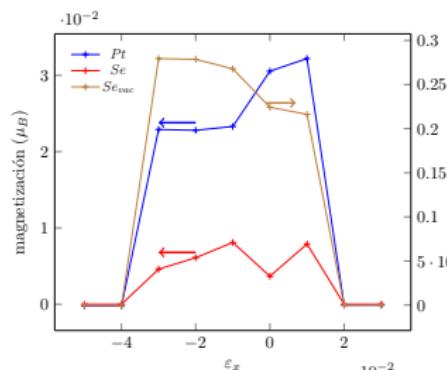
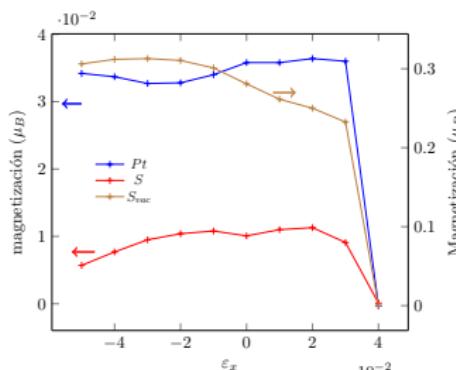
(a) PtSe₂(b) PtS₂

Figura 36: magnetización correspondiente a cada átomo de PtSe₂ y PtS₂ de una deformación anisotrópica

Tipos de efecto Kerr

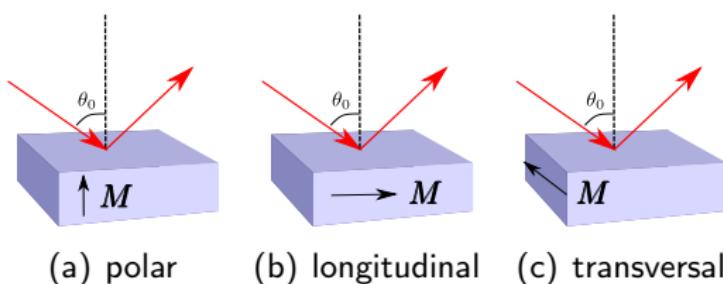


Figura 37: Diferentes configuraciones del efecto Kerr magneto-óptico

Montaje experimental

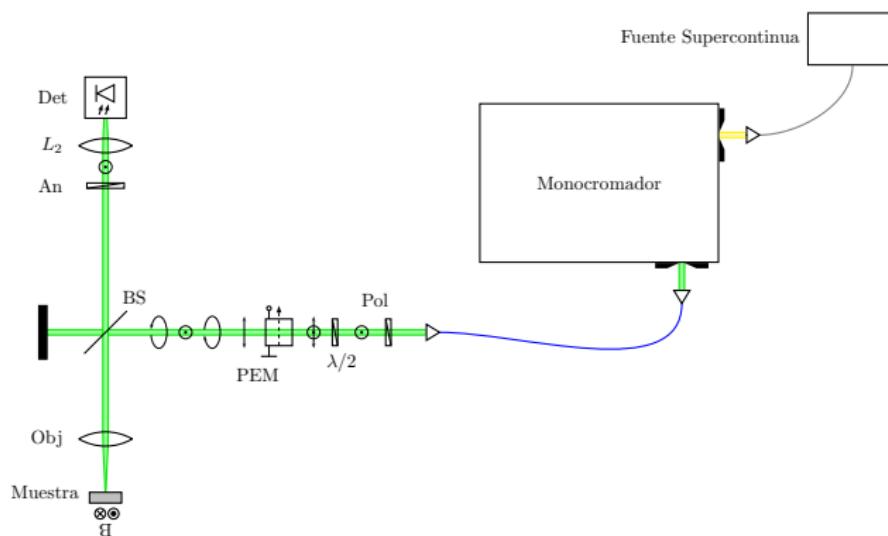


Figura 38: Montaje Experimental

Estudio experimental de efecto Kerr

Montaje Experimental

Programa para adquirir la histéresis

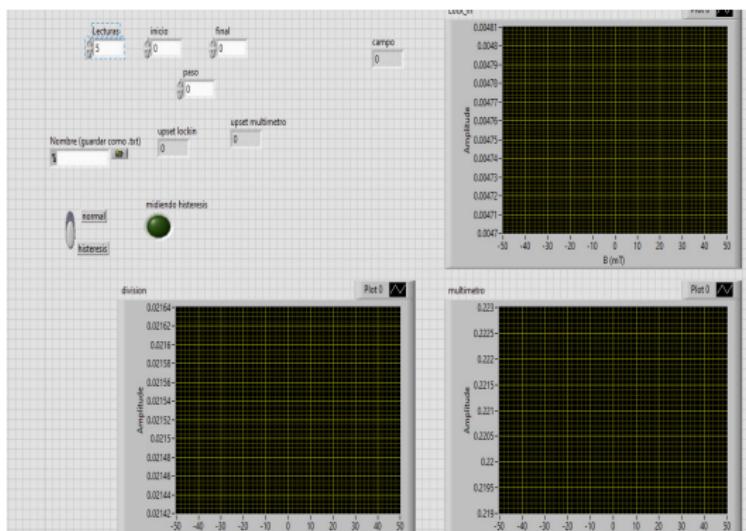
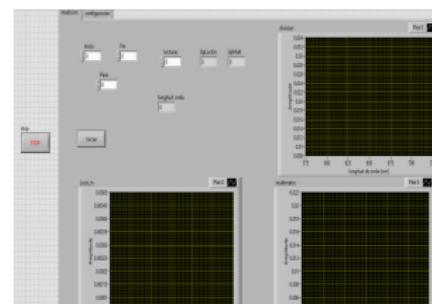


Figura 39: Software para obtener la histéresis.

Programa para adquirir espectro



(a) Configuración



(b) Medición

Figura 40: Software para obtener el espectro de efecto Kerr.

Intensidad de la luz después del análisis óptico con matrices de Jones

Si $r_{ss} \gg r_{sp}$ y $\Psi_0 = 2.405$, además de utilizar

$$\tilde{r}_{ps}/\tilde{r}_{ss} = -\tilde{r}_{sp}/\tilde{r}_{ss} = (-\theta_k + \eta_k) \text{ y } \tan(\Psi) = r_p/r_s:$$

Estudio experimental de efecto Kerr

Análisis del espectro

Intensidad de la luz después del análisis óptico con matrices de Jones

Si $r_{ss} \gg r_{sp}$ y $\Psi_0 = 2.405$, además de utilizar

$\tilde{r}_{ps}/\tilde{r}_{ss} = -\tilde{r}_{sp}/\tilde{r}_{ss} = (-\theta_k + \eta_k)$ y $\tan(\Psi) = r_p/r_s$:

$$I_{1f}/I_{dc} = 4J_1(\Psi_0) \tan(\Psi) (\theta_k \sin(\Delta) - \eta_k \cos(\Delta)) \quad (18)$$

$$I_{2f}/I_{dc} = -4J_2(\Psi_0) \tan(\Psi) (\theta_k \cos(\Delta) + \eta_k \sin(\Delta)) \quad (19)$$

Medición del divisor de haz

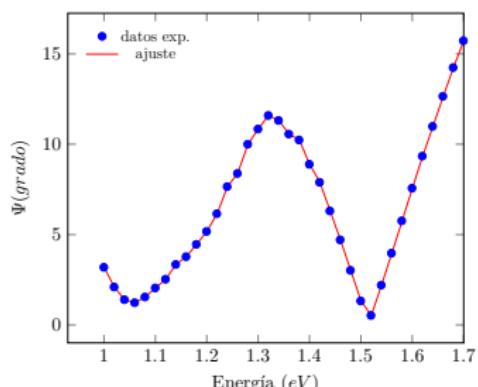
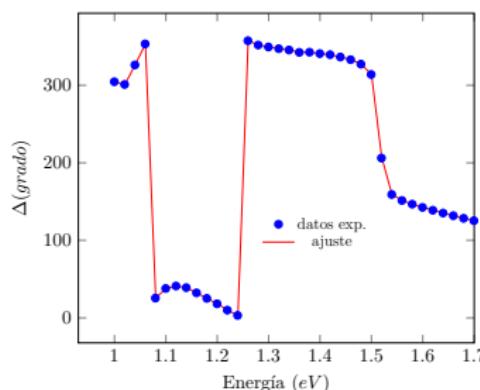
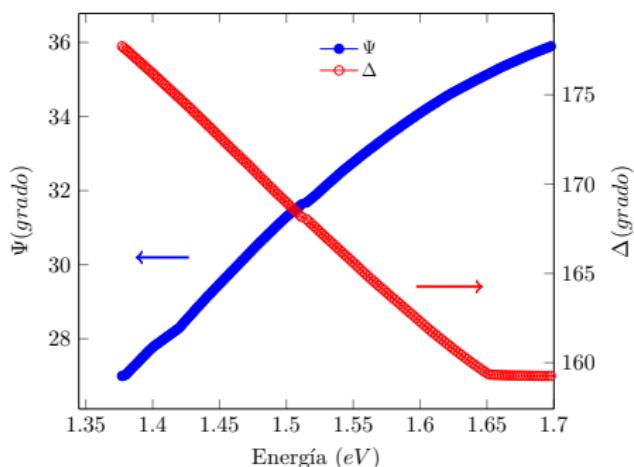
(a) valores de Ψ (b) valores de Δ

Figura 41: valores experimentales a 70° para Ψ y Δ del beamsplitter en función de la energía del fotón con su ajuste.

Estudio experimental de efecto Kerr

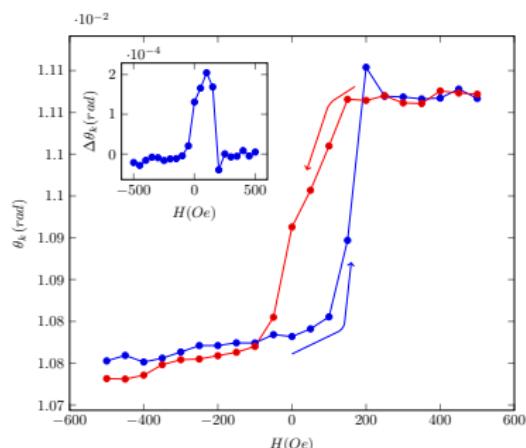
Análisis del espectro

Ajuste a 45 °

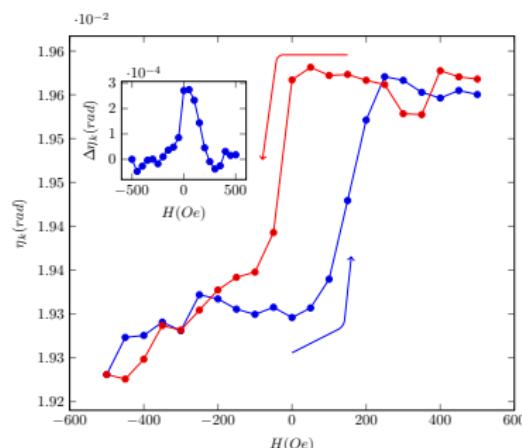
Figura 42: valores calculados a 45° para Ψ y Δ del beamsplitter.

Mediciones de histéresis

- Medidas con un diodo láser con $\lambda = 660 \text{ nm}$.



(a) Rotación Kerr



(b) Elipticidad Kerr

Figura 43: Medición de rotación (43(a)) y elipticidad (43(b)) Kerr en una muestra de CoFeB. Dentro de cada figura se muestra en cambio de la señal medida con cada dirección de campo magnético.

Mediciones de espectro

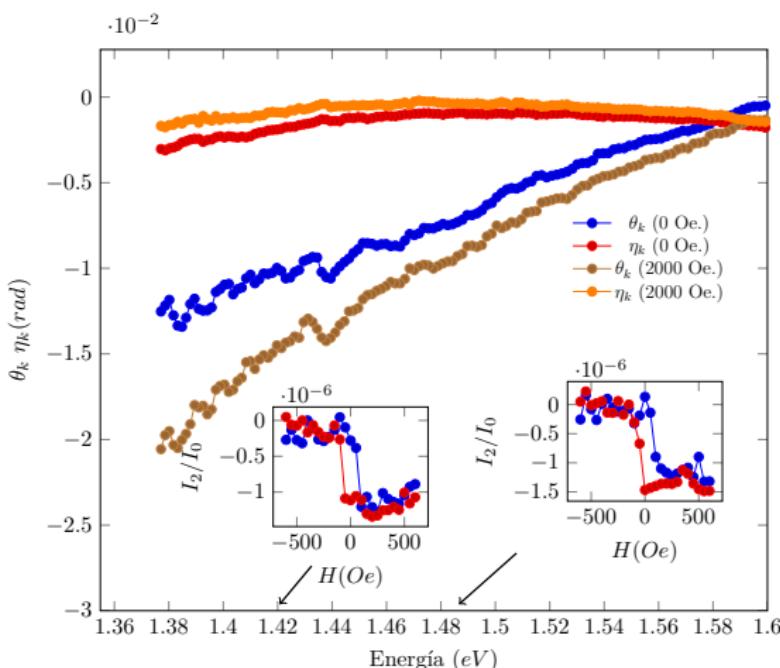


Figura 44: Espectros del ángulo y elipticidad Kerr en función de la energía del fotón en donde se induce un campo de 2000 Oe.

Conclusiones

- Se comenzó con el estudio de materiales bidimensionales llamados metales de dicalcogenuros de transición basados en Platino y Vanadio y utilizando el Azufre y Selenio como calcógenos.
- Al momento de estudiar estos materiales sin defectos, se observó en el PtSe₂ y PtS₂ que no existe una magnetización neta a pesar de que se observa un efecto spin-órbita considerable asociado principalmente al átomo Platino. En el caso contrario, para VSe₂ y VS₂ si existe una magnetización distinta de cero. Observando el comportamiento de la magnetización en estos materiales se pudo notar que el cambio de Selenio o Azufre no afecta considerablemente a las propiedades magnéticas y por lo tanto el cambio recae en el metal de transición (Pt y V).

- se estudió el efecto de introducir una vacancia del metal de transición y se observó que en el caso de los materiales con Platino, aparece una magnetización que ronda en el valor de $2.5\mu_B/celda$
- Para el caso de los materiales con vanadio se pudo observar que la magnetización se reduce considerablemente a pesar de que la deformación del sistema es muy pequeña.
- se pudo investigar el efecto que tiene una deformación mecánica isotrópica y anisotrópica en VSe₂ y VS₂ sin defectos; así como en PtSe₂ y PtS₂ con una vacancia de Platino.

Conclusiones

- Se logró desarrollar un sistema de espectroscopia de Efecto Kerr magneto-óptico partiendo de un montaje ya diseñado anteriormente y se desarrolló la instrumentación virtual para su control.
- fue necesario medir elipsometría a 70 ° a dicho beamsplitter y se escribió un código en Python para poder adquirir la rotación (θ_k) y la elipticidad (η_k) Kerr tanto de las mediciones de histéresis como del espectro a incidencia casi normal con el beamsplitter a 45 °.
- se midió la histéresis y espectro Kerr de una muestra de CoFeB depositada sobre SiO₂

Bibliografía I

Victor Antonov, Bruce Harmon y Alexander Yaresko.
Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Solids. Springer Netherlands, 2004.

Friedhelm Bechstedt. *Many-Body Approach to Electronic Excitations, concepts and applications.* Vol. 181. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2015.

P. E. Blöchl. "Projector augmented-wave method". En: *Phys. Rev. B* 50 (24 1994), págs. 17953-17979. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.17953. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.17953>.

B. D. Cullity y C. D. Graham. *Introduction to Magnetic Materials.* Wiley, 2008.

Bibliografía II

Hiroyuki Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry, principles and applications*. Wiley, 2007.

P Giannozzi y col. "Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.46 (2017), pág. 465901. DOI: 10.1088/1361-648x/aa8f79. URL: <https://doi.org/10.1088/1361-648x/aa8f79>.

Paolo Giannozzi y col. "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 21.39 (2009), pág. 395502. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502. URL: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.

Bibliografía III

Maria A Hoffmann y col. "Spectroscopic ellipsometry and magneto-optical Kerr effect spectroscopy study of thermally treated Co₆₀Fe₂₀B₂₀ thin films". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 32.5 (2019), pág. 055702. DOI: 10.1088/1361-648x/ab4d2f. URL: <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ab4d2f>.

John Kerr. "XLIII. On rotation of the plane of polarization by reflection from the pole of a magnet". En: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 3.19 (1877), págs. 321-343. DOI: 10.1080/14786447708639245.

Bibliografía IV

G. Kresse y D. Joubert. "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method". En: *Phys. Rev. B* 59 (3 1999), págs. 1758-1775. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.1758>.

Richard Martin. *Electronic Structure, Basic methods and practical applications*. Cambridge University Press, 2004.

John P. Perdew, Kieron Burke y Matthias Ernzerhof. "Generalized Gradient Approximation Made Simple". En: *Phys. Rev. Lett.* 77 (18 1996), págs. 3865-3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.

Bibliografía V

A.K Zvezdin y V.A Kotov. *Modern Magnetooptics and Magnetooptical Materials*. CRC Press, 1997.

¡Gracias por su atención !