

Energimyndighetens titel på projektet – svenska Spinnkaloritronik för tillämpningar inom energiåtervinning och design av nanomaskiner	
Energimyndighetens titel på projektet – engelska Spin caloritronics for energy harvesting applications and nanomachine design	
Universitet/högskola/företag KTH	Avdelning/institution SCI, Tillämpad fysik
Adress Teknikringen 8, 114 28 Stockholm	
Namn på projektledare Anna Delin	
Namn på ev övriga projektdeltagare Se publikationslistan	
Nyckelord: 5-7 st Spindynamik, spinnkaloritronik, nanosystem, kvantmekanik, simuleringar	

Förord

Projektet har finansierats av Energimyndigheten.

Innehållsförteckning

Sammanfattning	1
Summary.....	2
Inledning/Bakgrund.....	2
Genomförande	3
Resultat	3
Diskussion	4
Publikationslista.....	4
Referenser, källor	6
Bilagor	6

Sammanfattning

Termisk spinntransport är en konceptuellt ny mekanism för omvandling av termisk energi till elektrisk utan rörliga delar. Inom spinnkaloritroniken utforskas relationen mellan spinn- och värmetransport i material. I detta projekt bidrar vi signifikant till teoretisk metodutveckling och grundläggande förståelse inom området. Projektet har genomförts i samarbete med nationella och internationella akademiska samarbetspartners, har pågått i fem år och har finansierats av Energimyndigheten. Inom projektet har vi utvecklat en effektiv och generell beräkningsmetod, baserad på kvantmekanik, för att kvantifiera och förstå de mikroskopiska mekanismer som ger upphov till spinn-Seebeck-effekten. Med vår metod blir det alltså möjligt att på ett systematiskt sätt undersöka vilka material

och materialkombinationer som är optimala och användbara för att kunna implementera komponenter drivna med spinn-Seebeck-effekten i energisystemet. Inom projektet har samspelet mellan temperaturgradienter och spinnströmmar även studerats med hjälp av empiriska mikromagnetiska simuleringar och makrospinnmodeller. Specifikt har vi studerat nätverk av kopplade icke-linjära spinnvågsoscillatorer i nanoskala. Inom projektet har ett enkelt och generellt recept utvecklats för att beräkna termodynamiska strömmar i denna typ av system och vi har även analyserat hur termodynamiska strömmar i nätverk av kopplade icke-linjära spinnvågsoscillatorer kan koda och processa information via "reservoir computing".

Summary

Thermal spin transport is a conceptually new mechanism for converting thermal energy into electric without moving parts. In spin caloritronics, the relationship between spin and heat transport in materials is explored. In this project we contribute significantly to theoretical method development and basic understanding in the field. The project has been carried out in collaboration with national and international academic partners, has been going on for five years and has been financed by the Swedish Energy Agency. Within the project, we have developed an efficient and general computational method, based on quantum mechanics, to quantify and understand the microscopic mechanisms that give rise to the spin-Seebeck effect. Our method thus makes it possible to systematically investigate which materials and material combinations are optimal and useful for implementing components driven by the spin-Seebeck effect in the energy system. Within the project, the interplay between temperature gradients and spin currents has also been studied with help of empirical micro-magnetic simulations and macrospin models. Specifically, we have studied networks of coupled non-linear nanoscale spin wave oscillators. Within the project, a simple and general recipe has been developed for calculating thermodynamic currents in this type of system and we have also analyzed how thermodynamic currents in networks of connected nonlinear spin wave oscillators can encode and process information via "reservoir computing".

Inledning/Bakgrund

Termisk spinntransport är en konceptuellt ny mekanism för omvandling av termisk energi till elektrisk utan rörliga delar. Inom spinnkaloritroniken utforskas relationen mellan spinn- och värmetransport i material [1]. Med spinn-Seebeck-effekten (SSE) kan man kringgå flera av de kritiska begränsningar som försvårar utvecklingen av konventionella termoelektriska material. Något som hittills hindrat framsteg inom spinnkaloritronik är att det har saknats förståelse av och möjlighet att kvantifiera det mikroskopiska ursprunget till spinn-Seebeck-effekten. För att lösa detta problem krävs ansenlig metodutveckling av kvantmekaniska simuleringar. Termisk spinntransport kan även studeras på nanoskala med empiriska modeller baserade på kopplade spinnvågsoscillatorer.

Icke-linjäriteterna i dessa system skapar rika möjligheter till oväntade spinnkaloriska effekter. I detta projekt bidrar vi signifikant till metodutveckling och grundläggande förståelse inom området. Projektet har finansierats av Energimyndigheten och pågått i fem år.

Genomförande

Delmomenten i projektet har varit (1) explorativ design av spinnkaloritroniska komponenter, (2) förstå och beräkna det mikroskopiska ursprunget till spinn-Seebeckeffekten, (3) undersöka spinnkaloritroniska fenomen i magnetiska och icke-magnetiska material, (4) utbilda och utveckla nya specialister inom fältet. I projektet har vi använt oss av teoretiska metoder och datorsimuleringar, specifikt densitetsfunktionalsteori, spindynamik, mikromagnetiska simuleringar, och teorin för diskreta icke-linjära Schrödingerekvationen. Metodutveckling samt grundvetenskaplig förståelse har varit fokus i projektet. Projektet har genomförts i samarbete med nationella och internationella akademiska samarbetspartners, se publikationslistan för namn och affilieringar.

Resultat

Inom projektet har vi utvecklat en effektiv och generell beräkningsmetod, baserad på kvantmekanik, för att kvantifiera och förstå spinn-gitterkopplingen i material. Spinn-gitterkopplingen är den mekanism som möjliggör att en temperaturgradient kan ge upphov till spinnströmmar, dvs spinn-Seebeck-effekten. Denna metod är den första i sitt slag.

Inom projektet har samspelet mellan temperaturgradienter och spinnströmmar även studerats med hjälp av empiriska mikromagnetiska simuleringar och makrospinnmodeller. Specifikt har vi studerat nätverk av kopplade icke-linjära spinnvågsoscillatorer i nanoskala. Vi har funnit att excitation av utvalda spinnvågsmoder kan leda till (partiell eller fullständig) faslösning mellan de magnetiska oscillatorerna. Dessa excitationer kan skapas med hjälp av en ström av spinnpolariserade elektroner, men även med hjälp av en temperaturgradient. Nära parallellt kan alltså dras mellan dessa två olika sätt att manipulera spinnoscillatorer. Genom att studera längre kedjor av magnetiska oscillatorer kopplade via magnetisk dipol-dipolväxelverkan har vi funnit att spinnströmmen och energiströmmen genom kedjan kan kontrolleras oberoende av varandra via en kombination av en temperaturskillnad mellan de båda ändarna av kedjan och signaler från en antenn som avger ett radiofrekvensfält.

Inom projektet har ett enkelt och generellt recept utvecklats för att beräkna termodynamiska strömmar i denna typ av system och vi har även analyserat hur termodynamiska strömmar i nätverk av kopplade icke-linjära spinnvågsoscillatorer kan koda och processa information via ”reservoir computing”.

Många magnetiska egenskaper ändras med temperaturen och detta är viktigt att ta hänsyn till för att förstå hur spinnströmmar påverkas och samverkar med temperaturgradienter. Inom projektet har vi därför studerat hur temperaturen

påverkar materials magnetiska egenskaper och magnetiska texturer som skyrmioner. Våra kvantmekaniska simuleringar av magnetiska material indikerar att de magnetodynamiska egenskaperna hos permalloy (Py) som funktion av temperatur kan styras genom dopning med övergångsmetaller. Vi har även utvecklat en metod för att beräkna stabiliteten hos skyrmioner som funktion av temperatur och magnetiskt fält.

Vad gäller spinntransport i polymerer har vi funnit att polaroner får en mer lokaliserad struktur vid högre temperaturer där polymererna är mer oordnade. Vi har också jämfört olika beräkningsmetoder för polaronlokalisering och beskrivning av den elektroniska strukturen hos polymererna och funnit att den metod som vanligtvis används inte beskriver polaroner väl, men att metoder som ger bra resultat är tillgängliga. Vi har också funnit att polaronerna är mer känsliga för elektriska fält än vad som vanligtvis antas i litteraturen.

Diskussion

Projektets resultat, i form av en effektiv beräkningsmetod för spinn-gitterkoppling, har öppnat dörren för förståelse av spinn-Seebeck-effektens ursprung på mikroskopisk nivå. Med vår metod blir det alltså möjligt att på ett systematiskt sätt undersöka vilka material och materialkombinationer som är optimala och användbara för att kunna implementera komponenter drivna med spinn-Seebeck-effekten i energisystemet. Projektet har också visat på och analyserat komplexa och kontraintuitiva samband mellan temperaturgradienter och spinnströmmar i nätverk av ickelinjära spinnvågsoscillatorer. Detta har stor betydelse för design av spinnkaloritroniska nanomaskiner.

Publikationslista

General method for atomistic spin-lattice dynamics with first-principles accuracy
J Hellsvik, D Thonig, K Modin, D Iuşan, A Bergman, O Eriksson, L Bergqvist, A Delin

Physical Review B 99 (10), 104302 (2019)

Skyrmion lifetime in ultrathin films

S von Malottki, PF Bessarab, S Haldar, A Delin, S Heinze

Physical Review B 99 (6), 060409 (2019)

Stochastic Thermodynamics of Oscillators' Networks

S Borlenghi, A Delin

Entropy 20 (12), 992 (2018)

Lifetime of racetrack skyrmions

PF Bessarab, GP Müller, IS Lobanov, FN Rybakov, NS Kiselev, H Jónsson, VM Uzdin, S Blügel, L

- Bergqvist, A Delin
Scientific Reports 8, 3233 (2018)
- Modeling reservoir computing with the discrete nonlinear Schrödinger equation
S Borlenghi, M Boman, A Delin
Physical Review E 98 (5), 052101 (2018)
- Enhanced skyrmion stability due to exchange frustration
S von Malottki, S, B Dupe, PF Bessarab, A Delin, S Heinze
Scientific Reports 7, 12299 (2017)
- Micromagnetic simulations of spin-torque driven magnetization dynamics with spatially resolved spin transport and magnetization texture
S Borlenghi, MR Mahani, H Fangohr, M Franchin, A Delin, J Fransson
Physical Review B 96, 094428 (2017)
- Breakdown of Polarons in Conducting Polymers at Device Field Strengths
R Mahani, A Mirsakiyeva, A Delin
The Journal of Physical Chemistry C 121, 10317(2017)
- Extended spin model in atomistic simulations of alloys
F Pan, J Chico, A Delin, A Bergman, L Bergqvist
Phys. Rev. B 95, 184432 (2017)
- Temperature dependence of band gaps and conformational disorder in PEDOT and its selenium and tellurium derivatives: density functional calculations
A Mirsakiyeva, HW Hugosson, M Linares, A Delin
Journal of Chemical Physics, accepted (2017)
- Quantum Molecular Dynamical Calculations of PEDOT 12-Oligomer and its Selenium and Tellurium Derivatives
A Mirsakiyeva, HW Hugosson, X Crispin, A Delin
Journal of Electronic Materials 46, 3071 (2017)
- Systematic study of magnetodynamic properties at finite temperatures in doped permalloy from first-principles calculations
F Pan, J Chico, J Hellsvik, A Delin, A Bergman, L Bergqvist
Physical Review B 94, 214410 (2016)
- Spin relaxation signature of colossal magnetic anisotropy in platinum atomic chains
A Bergman, J Hellsvik, PF Bessarab, A Delin
Scientific Reports 6, 36872 (2016)
- Nanoscale control of heat and spin conductance in artificial spin chains
S Borlenghi, MR Mahani, A Delin, J Fransson
Physical Review B 94, 134419 (2016)

Tunable damping, saturation magnetization, and exchange stiffness of half-Heusler NiMnSb thin films

P Dürrenfeld, F Gerhard, J Chico, RK Dumas, M Ranjbar, A Bergman, L Bergqvist, A Delin, C Gould, LW Molenkamp, J Åkerman
Physical Review B 92, 214424 (2015)

Tunable permalloy-based films for magnonic devices

Y Yin, F Pan, M Ahlberg, M Ranjbar, P Dürrenfeld, A Houshang, M Haidar, L Bergqvist, Y Zhai, RK Dumas, A Delin, J Åkerman
Physical Review B 92, 024427 (2015)

Energy and magnetization transport in nonequilibrium macrospin systems

S Borlenghi, S Iubini, S Lepri, J Chico, L Bergqvist, A Delin, J Fransson
Physical Review E 92, 012116 (2015)

Referenser, källor

[1] Spin caloritronics, GEW Bauer et al., Nature Materials 11, 391 (2012).

Bilagor

Administrativ bilaga