

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

**«ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО-  
МОРИЯ НА ВРЕМЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ  
ЦЕПОЧЕК»**

Выполнила студентка группы 205м

Сапронова Екатерина Сергеевна

---

подпись студента

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук

Колесников Сергей Владимирович

---

подпись научного руководителя

Допущена к защите

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
подпись зав. кафедрой

МОСКВА

2024

## Оглавление

Введение.....	3
Глава 1. Обзор литературы.....	4
1.1 Теоретические работы .....	4
1.2 Экспериментальные работы.....	7
Постановка задачи.....	9
Глава 2. Теоретическая модель и методы расчета .....	9
2.1 Гамильтониан и параметры исследуемых систем .....	9
2.2 Непрерывная XY-модель .....	13
2.3 Геодезический метод упругой ленты.....	16
2.4 Гармоническое приближение теории переходного состояния .....	17
Глава 3. Результаты.....	18
3.1 Цепочки Co на поверхности Pt(664) .....	18
3.1.1 Без внешнего магнитного поля.....	18
3.1.2 С внешним магнитным полем .....	32
3.2 Цепочки Fe на поверхности Pt(664) .....	36
3.3 Цепочки Mn на поверхности Pt(664).....	43
Выводы .....	46
Список литературы .....	47
Список опубликованных работ.....	52
Статьи.....	52
Тезисы конференций.....	53

## Введение

Изучение магнитных свойств ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек – перспективная и многообещающая задача. Атомные цепочки могут найти применение в спинтронике [1], запоминающих устройствах [2], квантовых вычислениях и квантовых коммуникациях [3,4]. В частности, одноатомные магнитные цепочки конечной длины открывают перспективы в нанoeлектронике [5,6]. Кроме того, в современном мире есть запрос на создание и совершенствование квантовых компьютеров, в чем атомные цепочки также могут оказаться полезными. Теоретическое исследование цепочки атомов на поверхности переходного металла представляет собой весьма сложную задачу. Обычно магнитные свойства атомной цепочки конечной длины могут быть удовлетворительно описаны в рамках какой-либо эффективной теории, включающей обменное взаимодействие, энергию магнитной анизотропии и взаимодействие с внешним магнитным полем [5,6]. Параметры эффективного гамильтониана можно рассчитать из первых принципов с помощью теории функционала плотности [7] или метода функций Корринги–Кона–Ростокера–Грина [8]. К сожалению, методы *ab initio* могут быть применены только в двух предельных случаях: либо очень коротких [9,10], либо бесконечно длинных атомных цепочек [11,12]. Для исследования магнитных свойств цепочек, состоящих из десятков или сотен атомов, можно использовать либо решение уравнения Ландау–Лифшица–Гилберта [13], либо моделирование методом Монте-Карло (МК) [14,15]. При низких температурах трудоемкое МК-моделирование можно заменить аналитическим расчетом [16–18], основанным на идее о том, что перемагничивание атомной цепочки происходит за счет образования доменной стенки. Такой подход позволяет сделать грубую оценку времени перемагничивания широкого класса атомных цепочек [19,20]. Для расчета времен перемагничивания необходимо знать не только энергии основных состояний, но и энергии возбужденных состояний атомной цепочки.

## Глава 1. Обзор литературы

В 1958 году И.Е. Дзялошинский предложил новый тип взаимодействия между магнитными атомами для объяснения слабого ферромагнетизма антиферромагнитных кристаллов  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MnCO}_3$  и  $\text{CoCO}_3$  [21]. Позже Мория интерпретировал это взаимодействие как анизотропное сверхобменное взаимодействие [22]. Сейчас это взаимодействие называется взаимодействием Дзялошинского-Мория. Интерес к этому взаимодействию резко возрос после его обнаружения в пленках переходных металлов [23,24]. Сильное взаимодействие Дзялошинского-Мория в атомных цепочках также может привести к некоторым интересным явлениям. Например, двухатомные цепочки Fe на поверхности  $\text{Ir}(001)(5 \times 1)$  вследствие наличия этого взаимодействия имеют неколлинеарное магнитное основное состояние [25–27]. Также взаимодействие Дзялошинского-Мория может существенно изменять энергии возбужденных состояний, даже если основное состояние атомной цепочки коллинеарно [28,11,29,30]. В некоторых случаях энергия магнитной анизотропии и взаимодействие Дзялошинского-Мория может привести к образованию необычных доменных стенок, которые являются промежуточными конфигурациями между стенками Блоха и Нееля [31,32]. В случае атомных цепочек конечного размера взаимодействие Дзялошинского-Мория приводит к неколлинеарности основного состояния на концах [33,34].

### 1.1 Теоретические работы

Все рассматриваемые нами системы исследовались ранее как экспериментально, так и теоретически. Параметры этих систем были взяты из литературы [11]. В работе [11] рассматривалось возникновение хирального магнетизма в одноатомных бесконечных цепочках Mn, Fe и Co, осажденных на краю ступени поверхности Pt (664). Проводилось *ab initio* исследование, основанное на теории функционала плотности (ТФП). Из-за ступенчатой

геометрии направление вектора Дзялошинского не predeterminedено симметрией поверхности. Для цепочки Mn было предсказано длиннопериодическое основное состояние циклоидальной спиновой спирали. Спины вращаются в плоскости, наклоненной относительно поверхности Pt на угол  $62^\circ$ .

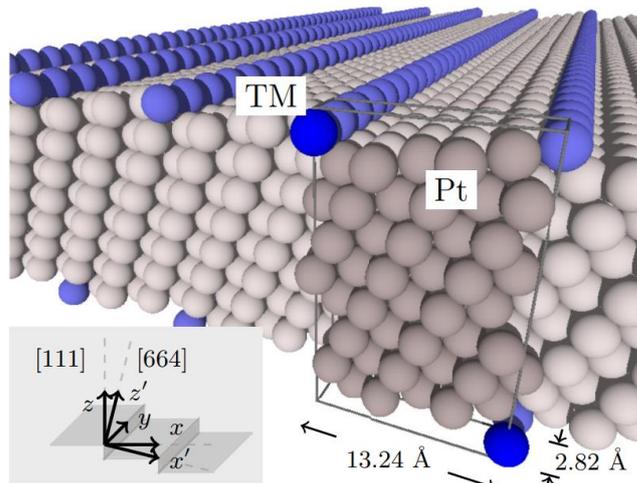


Рис.1. Изображение элементарной ячейки поверхности Pt(664) с одноатомными цепочками по краю, и ее повторение в плоскости  $xu$ . Темно-синие сферы соответствуют переходным металлам (Co, Fe, Mn), а ярко-серые сферы представляют атомы подложки (Pt).

Основным состоянием цепочек из атомов Fe и Co является ферромагнитное состояние, поскольку взаимодействие Дзялошинского-Мория слишком слабо, чтобы преодолеть энергетические барьеры, связанные с магнитной анизотропией поверхности, и сформировать спиральную структуру. Анализ возбужденных состояний в последних двух системах показал, что в цепочке Fe

энергетически выгодно образование стенки Блоха, а в цепочке Co – стенки Нееля в плоскости, наклоненной на некоторый угол  $29^\circ$ .

Кроме того, методом ТФП проводились исследования магнитных состояний и обменного взаимодействия в цепочках атомов Mn, Fe и Co, осажденных на поверхность  $\text{Cu}_3\text{N-Cu}(110)$  [35]. Путем расчета магнитных конфигураций основного состояния было показано, что обменное взаимодействие, магнитный порядок и анизотропия в атомных цепочках сильно зависят от их химического состава и мест адсорбции на поверхности. Было обнаружено, что обменное взаимодействие в атомных цепочках может приводить к ферромагнитной или антиферромагнитной связи атомных магнитных моментов в зависимости от положения цепочки на поверхности. Моделирование спиновой динамики, основанное на классическом и квантовом

подходах, показало, что обменное взаимодействие значительно больше величины энергии магнитной анизотропии и является причиной появления кривых намагничивания ферромагнитных цепочек и возможного существования квантовой запутанности в антиферромагнитных системах.

Также были исследованы двухатомные зигзагообразные цепочки Co, выращенные на поверхности Ir(001)(5 × 1), с использованием расчетов в рамках ТФП и экспериментов по спин-поляризованной сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [36]. С помощью СТМ обнаружено, что двухатомные цепочки Co растут в трех различных структурных

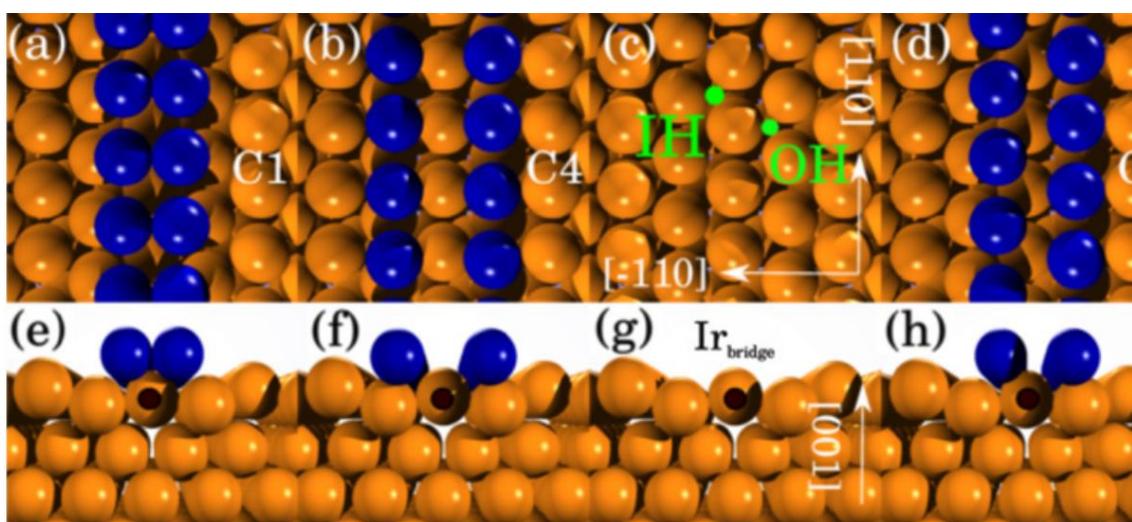


Рис. 2. (a)–(d) Вид сверху и (e)–(h) вид сбоку на три различные конфигурации цепочек и поверхность Ir(001) (5 × 1).

конфигурациях. Расчеты с помощью ТФП показали, что все они находятся в ферромагнитном состоянии. Два типа структур, состоящих из эквивалентных атомных цепочек, обладают высокой симметрией. При этом, ось легкого намагничивания направлена вдоль одной из главных кристаллографических осей. Ось легкого намагничивания зигзагообразных цепочек Co отклонена от нормали к поверхности на угол 33°. Этот эффект вызван нарушенной симметрией цепочек на подложке в сочетании с сильной спин-орбитальной связью Ir.

## 1.2 Экспериментальные работы

Интенсивное изучение магнитных свойств цепочек началось после открытия «гигантской» энергии магнитной анизотропии атомов Co на поверхности Pt(997), сделанного с использованием рентгеновского магнитного циркулярного дихроизма и сканирующего туннельного микроскопа [37]. Было показано, что путем выращивания Co на

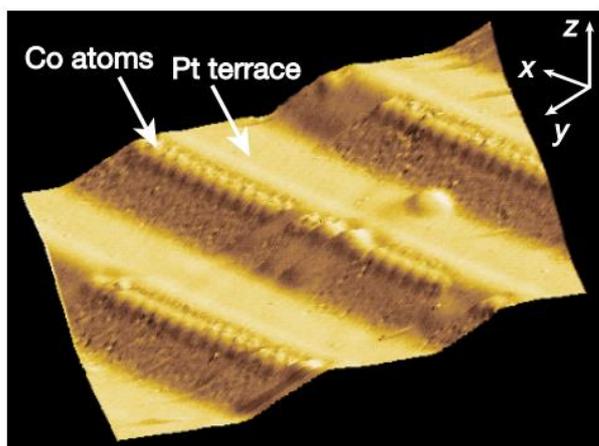


Рис. 3. Одноатомные цепочки Co на краях ступеней Pt (вертикальный размер увеличен для лучшего контраста).

высококачественной ступенчатой поверхности Pt в узком температурном диапазоне можно получить массивы параллельных одноатомных цепочек высокой плотности с хорошей однородностью и равномерным расстоянием между ними.

Показано, что размерность атомных цепочек Co, нанесенных на

немагнитную подложку Pt, оказывает нетривиальное влияние на направление оси легкого намагничивания. Одномерная геометрия атомных цепочек и взаимодействие с подложкой приводят к сильной одноосной магнитной анизотропии.

Также был изучен перенос информации в магнитных атомных цепочках конечной длины [27]. Используя спин-поляризованный СТМ, авторы продемонстрировали возникновение спиновой спирали атомного масштаба в конечных двухатомных цепочках Fe на поверхности Ir(001)(5×1). Было обнаружено нарушение инверсионной симметрии на поверхности, что приводит к одинаковому направлению вращения магнитных моментов во всех цепочках. Соответственно, изменяя направление вращения магнитных моментов на одном конце цепочки, можно изменять состояние других частей цепочки на расстоянии десятков нанометров. Таким образом, был предложен

новый способ передачи информации о состоянии магнитных объектов. Также сравнивались изолированная цепочка Fe и цепочка Fe, связанная с ферромагнитной цепочкой Co. Изолированная цепочка не демонстрировала периодичности, указывающей на спиральный порядок магнитных моментов, а цепочка Fe, присоединенная к цепочке Co, демонстрировала отчетливую магнитную упорядоченность. Такая стабилизация магнитной упорядоченности происходила за счет сильного обменного взаимодействия магнитных моментов на конце цепочки Fe с цепочкой Co, фиксирующего их направление в пространстве. При фиксированной в пространстве намагниченности одного конца цепочки взаимодействие внутри неё приводило к стабилизации всей цепочки Fe. Соответственно, измеряя направление любого спина Fe, даже на расстоянии нанометра, можно

Кроме того, экспериментально изучались атомные цепочки Mn на поверхности CuN [38]. С помощью СТМ исследовано взаимодействие между спинами в магнитных структурах атомного масштаба. Линейные цепочки из 1–10 атомов марганца собирались по одному атому на тонком слое CuN, и спектры спинового возбуждения этих структур измерялись методом туннельной спектроскопии неупругих электронов. Наблюдались возбуждения связанных атомных спинов, которые могут изменить как полный магнитный момент цепочки, так и его ориентацию.

Как видно из представленного выше обзора литературы, теоретически изучены либо бесконечно длинные цепочки, либо очень короткие цепочки, состоящие из нескольких атомов. В то же время, с экспериментальной точки зрения представляют интерес атомные цепочки, состоящие из нескольких

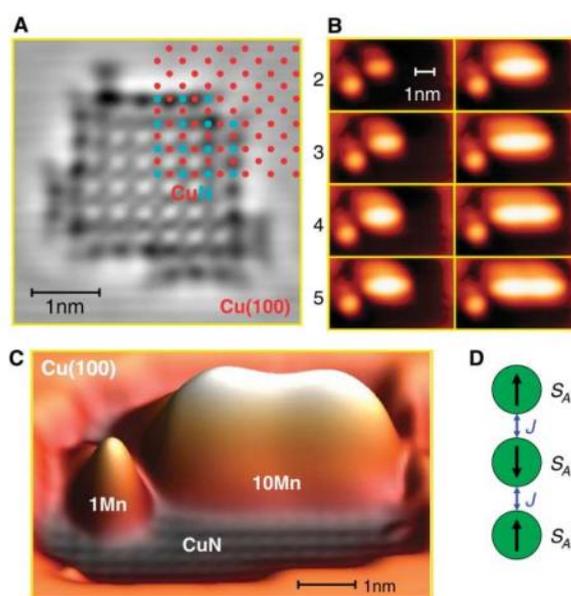


Рис. 4. Цепочки Mn на поверхности CuN.

десятков (до сотни) атомов. На сегодняшний день в научной литературе существует существенный пробел в теоретическом исследовании таких атомных цепочек.

## Постановка задачи

Целью дипломной работы является теоретическое исследование спонтанного и индуцированного перемагничивания ферромагнитных атомных цепочек конечной длины, а также изучение влияния диполь-дипольного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория на механизмы перемагничивания и на время перемагничивания одноатомных цепочек. В частности, были поставлены следующие задачи:

- 1) Исследовать систему Co/Pt(664) в отсутствие внешнего магнитного поля и при его наличии;
- 2) Исследовать энергетические барьеры и частотные префакторы для системы Co/Pt(664);
- 3) Исследовать энергетические барьеры и механизмы перемагничивания системы Fe/Pt(664) в отсутствие внешнего магнитного поля;
- 4) Исследовать систему Mn/Pt(664) в отсутствие внешнего магнитного поля.

## Глава 2. Теоретическая модель и методы расчета

### 2.1 Гамильтониан и параметры исследуемых систем

Магнитные свойства атомных цепочек конечной длины изучаются в рамках модели Гейзенберга. Для описания взаимодействия атомов в цепочке используется эффективный гамильтониан, включающий в себя обменное взаимодействие, энергию магнитной анизотропии, диполь-дипольное взаимодействие, взаимодействие Дзялошинского-Мория и взаимодействие с внешним магнитным полем:

$$H = H_{exch} + H_{DMI} + H_{MAE} + H_{dip} + H_{int}, \quad (1)$$

где

$$H_{exch} = -J \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}), \quad (2)$$

$$H_{DMI} = -\mathbf{D} \sum_i [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_{i+1}], \quad (3)$$

$$H_{MAE} = \sum_i [-K(s_i^y)^2 + E((s_i^z)^2 - (s_i^x)^2)], \quad (4)$$

$$H_{dip} = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \sum_{i>j} \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) r_{ij}^2 - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}, \quad (5)$$

$$H_{int} = -\mu \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}), \quad (6)$$

где  $J$  — обменная энергия,  $\mathbf{D}$  — вектор Дзялошинского,  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  — радиус-вектор между  $i$ -м и  $j$ -м атомами,  $\mu$  — магнитный момент атома,  $\frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7}$  Гн/м.  $K$  и  $E$  — константы магнитной анизотропии, причем  $K > E$ . В данной модели учитывается только обменное взаимодействие между ближайшими атомами. Кроме того, значения параметров  $J, K, E, \mu, \mathbf{D}$  для крайних и центральных атомов одинаковы.

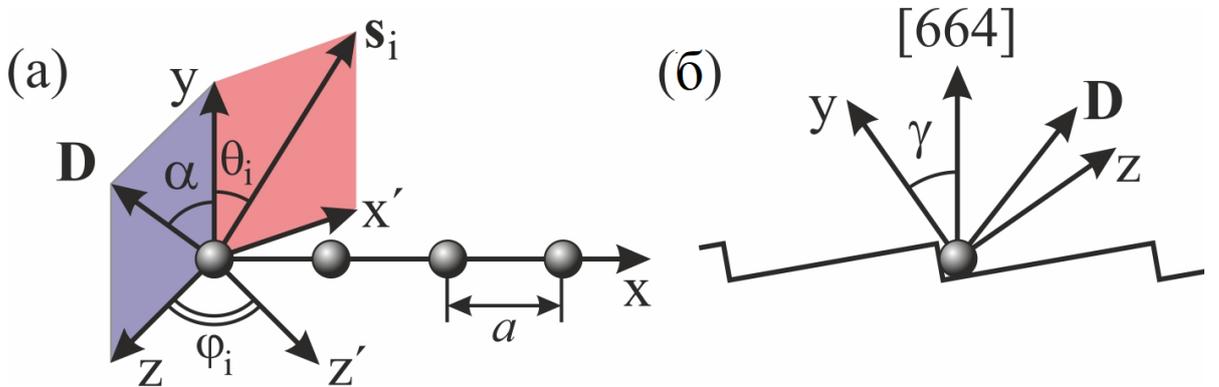


Рис. 5. а) Схематичное изображение атомной цепочки с указанием направления вектора Дзялошинского  $\mathbf{D}$  и единичных векторов  $\mathbf{s}_i$  магнитных моментов, б) Взаимная ориентация оси легкого намагничивания и осей координат относительно поверхности Pt(664).

	$J$ , мэВ	$K$ , мэВ	$E$ , мэВ	$D$ , мэВ	$\mu$	$\alpha$	$a$ , Å
Co/Pt(664)	61,8	1,31	0,34	1,92	$2,39 \mu_B$	$131^\circ$	2,82
Fe/Pt(664)	45,87	1,73	-0,89	1,98	$3,41 \mu_B$	$74^\circ$	2,82
Mn/Pt(664)	33,15	0,44	0,25	3,96	$4,04 \mu_B$	$124^\circ$	2,82

Табл. 1 . Параметры систем Co, Fe и Mn на поверхности Pt(664) [11].

На рис. 5а представлено схематичное изображение атомной цепочки с указанием направления вектора Дзялошинского  $\mathbf{D}$  и единичных векторов  $\mathbf{s}_i$  магнитных моментов. Взаимная ориентация осей  $y, z$ , вектора Дзялошинского  $\mathbf{D}$  и поверхности Pt(664) показана на рис. 5б. Параметры для соответствующих атомных цепочек приведены в таблице 1. Они были взяты из литературы, где получены с помощью ТФП [11].

Одним из механизмов перемагничивания является движение доменной стенки от одного края цепочки к другому. В случае ферромагнитной цепочки доменной стенкой является граница между атомами, магнитные моменты которых направлены противоположно. Ширина доменной стенки может быть значительно больше расстояния между соседними атомами. Её можно оценить по формуле  $\delta N = \sqrt{\frac{J}{2(K-E)}}$ . Мы рассматриваем цепочки от 5 до 100 атомов, так как образование более длинных цепочек в результате самоорганизации крайне маловероятно.

Магнитные свойства атомных цепочек исследуются в диапазоне температур от 5 К до критической температуры. Это позволяет нам пренебречь квантовым туннельным эффектом, который существенен лишь при температурах ниже 1 К [39]. Верхняя граница в виде критической температуры необходима для существования упорядоченного (ферромагнитного в случае Fe и Co, или спирального в случае Mn) состояния рассматриваемых систем.

Обсудим вопрос определения этой температуры. В качестве параметра порядка выберем средний модуль проекции намагниченности на ось легкого намагничивания  $|M_y|$ . Для атомной цепочки конечной длины  $|M_y|$  не обращается в нуль ни при какой температуре, однако критическую температуру можно оценить по максимуму величины  $-d|M_y|/dT$ . На рис. 6 показаны зависимости величин  $|M_y|$  и  $-d|M_y|/dT$  от температуры. Моделирование методом Монте-Карло (МК) проводилось в температурном

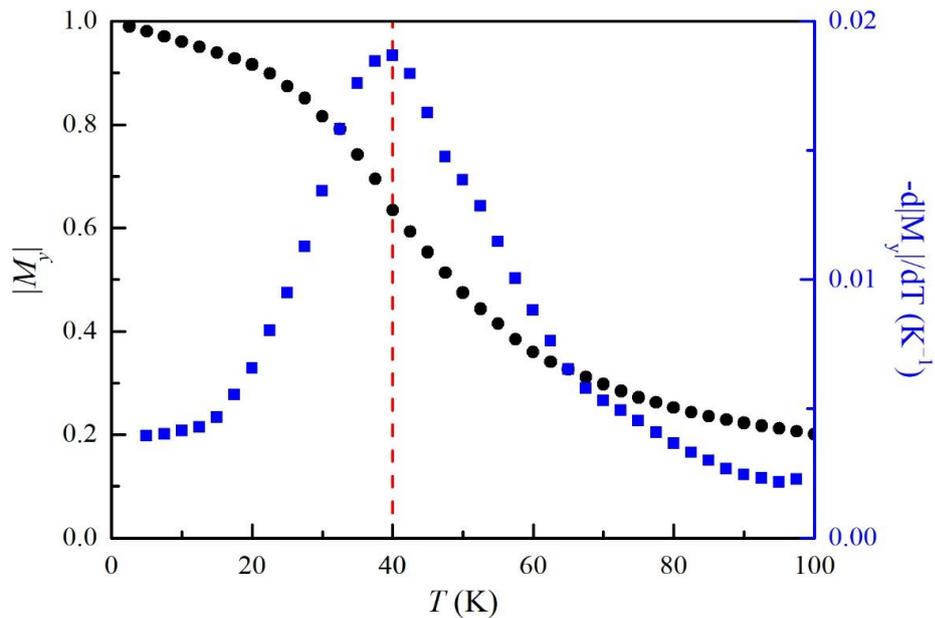


Рис.6. Зависимость среднего модуля проекции намагниченности на ось легкого намагничивания  $|M_y|$  и производной  $-d|M_y|/dT$  от температуры  $T$ .

интервале от 2.5 до 100 К с шагом 2.5 К. Для достижения статистической независимости точек моделирование при каждой температуре начиналось со случайной ориентации магнитных моментов. Затем выполнялось  $10^7$  МК-шагов для достижения термодинамического равновесия и ещё  $5 \cdot 10^9$  МК-шагов для вычисления среднего значения  $|M_y|$ . Из рис.6 видно, что критическую температуру цепочки из 100 атомов Со можно оценить как  $(40 \pm 2.5)$  К.

## 2.2 Непрерывная XY-модель

Рассмотрим непрерывную XY-модель, которая несмотря на свою простоту, позволяет качественно объяснить результаты численного моделирования и сравнить теоретические оценки с расчётными значениями. Мы использовали эту модель для изучения систем Co/Pt(664) и Fe/Pt(664). В отсутствие внешнего магнитного поля энергия цепочки может быть записана как

$$E = -J \sum_i \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) - \sum_i \sin^2 \theta_i + D_z \sum_i \sin(\theta_{i+1} - \theta_i) \quad (7)$$

где  $\tilde{K} = K - |E| \cos 2\beta$ ,  $D_z = D \sin \alpha \cos \beta$ ,  $\beta$  – угол, на который отклоняется доменная стенка от плоскости XY (для таких систем модель называется непрерывной). Для системы Co/Pt(664)  $\beta = 0$ , для Fe/Pt(664)  $\beta \approx 11^\circ$ . Ввиду малых значений разностей  $(\theta_{i+1} - \theta_i)$  заменим индекс  $i$  непрерывной переменной  $x = ia$ , где  $a$  — расстояние между соседними атомами. Для бесконечной цепочки получаем следующий функционал [30]

$$E[\theta] = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{Ja^2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} \right)^2 + D_z a \frac{d\theta}{dx} + \tilde{K} \sin^2 \theta \right] dx. \quad (8)$$

Варьируя этот функционал, получаем уравнение

$$\frac{d^2 \theta}{dx^2} - \frac{2\tilde{K}}{Ja^2} \sin \theta \cos \theta = 0. \quad (9)$$

Решение уравнения (9) зависит от граничных условий. Если  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $\theta = \pi$  при  $x \rightarrow +\infty$ , то [40]

$$\theta(x) = \arccos \left( -\tanh \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x}{a} \right) \right) \quad (10)$$

Если  $\theta = \pi$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow +\infty$ , то

$$\theta(x) = \arccos \left( \tanh \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}x}{J}} \frac{x}{a} \right) \right) \quad (11)$$

Данные решения соответствуют доменным стенкам, отличающимся направлением вращения магнитных моментов. При вращении по часовой стрелке будем называть такую стенку доменной (ДС) (решение (10)), а при вращении против часовой стрелки – антидоменной стенкой (АДС) (решение (11)).

Пусть  $t = \cos \beta$ . Энергии образования ДС и АДС зависят от значения  $t$ :

$$E_{\text{ДС}}(t) = \sqrt{8J(K - |E|(2t^2 - 1))} + \pi D_z t, \quad (12.1)$$

$$E_{\text{АДС}}(t) = \sqrt{8J(K - |E|(2t^2 - 1))} - \pi D_z t, \quad (12.2)$$

В случае цепочки  $S_0$  при  $t = 1$ :

$$E_{\text{ДС}} = \sqrt{8\tilde{K}J} + \pi D_z, \quad (13.1)$$

$$E_{\text{АДС}} = \sqrt{8\tilde{K}J} - \pi D_z \quad (13.2)$$

Если считать, что  $D_z > 0$ , то антидоменная стенка является возбужденным состоянием с наименьшей энергией в бесконечной атомной цепочке. Значение  $t$ , при котором функция (12.2) минимальна, найдем из уравнения  $dE/dt = 0$ . Отсюда

$$t = \cos \beta = \sqrt{\frac{K + |E|}{2|E| \left( 1 + \frac{16J|E|}{\pi^2 D_z^2} \right)}} \quad (14)$$

Подставляя (14) в выражение (12.2), получим энергию доменной стенки в бесконечной цепочке для системы Fe/Pt(664)

$$E_{\text{дс}} = \sqrt{8J(K + |E|) \left(1 + \frac{\pi^2 D_z^2}{16J|E|}\right)} \quad (15)$$

Теперь рассмотрим энергию полубесконечной атомной цепочки со свободным концом при  $x = 0$

$$E[\theta] = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{Ja^2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} \right)^2 + D^z a \frac{d\theta}{dx} + \tilde{K} \sin^2 \theta \right] dx. \quad (16)$$

Функцию, минимизирующую данный функционал при граничном условии  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow -\infty$ , можно записать в виде

$$\theta(x) = \arccos \left( \tanh \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x - x_0}{a} \right) \right) - \pi. \quad (17)$$

где параметр  $x_0 > 0$  соответствует минимуму энергии (16). Но проще найти значение параметра  $\theta_0 = \theta(x = 0)$ . Таким образом, можно получить энергию атомной цепочки как функцию углов  $\theta_0$  и  $\beta$

$$E(\theta_0, t) = \sqrt{2J(K - |E|(2t^2 - 1))(1 - \cos \theta_0) - D_z t \theta_0}, \quad (18)$$

где  $t \in [-1, 1]$ . При  $\theta_0 \rightarrow -\pi$  функция (18) совпадает с функцией (13.2). При используемых параметрах функция (18) достигает минимума при  $t = \pm 1$ . Если  $t = 1$ , то значение  $\theta_0$  можно найти из уравнения  $\frac{dE(\theta_0, 1)}{d\theta_0} = 0$ . Уравнение даёт следующее значение  $\theta_0$ , соответствующее левому концу цепочки

$$\theta_0 = \arcsin \left( \frac{D^z}{\sqrt{2J(K - |E|)}} \right). \quad (19)$$

Если  $t = -1$ , то полученное значение  $\theta_0$  имеет противоположный знак и соответствует правому концу цепочки. Оба случая соответствуют одной и той же энергии:

$$E_{min} = \sqrt{2(K - |E|)J} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{(D_z)^2}{2J(K - |E|)}} \right) - D_z \arcsin \left( \frac{D_z}{\sqrt{2J(K - |E|)}} \right). \quad (20)$$

Значение  $E_{min}$  представляет собой разность энергий неколлинеарного и коллинеарного состояний полубесконечной атомной цепочки.

Аналогично, в случае полубесконечной атомной цепочки с граничным условием  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow +\infty$  можно получить следующее решение

$$\theta(x) = \arccos \left( \tanh \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x + x_0}{a} \right) \right) \quad (21)$$

где значения  $x_0$  и энергия состояния такие же, как и в предыдущем случае.

Выражения (19), (20), (21) справедливы как для системы Co/Pt(664), так и для Fe/Pt(664).

### 2.3 Геодезический метод упругой ленты

Для расчета энергетических барьеров при перемагничивании использовался геодезический метод упругой ленты (ГМУЛ) [41]. Этот метод представляет собой способ нахождения оптимальной траектории магнитной системы между двумя заданными состояниями. Траектория оптимизируется относительно ориентации векторов магнитных моментов в то время, как их модули и не меняются. Состояние магнитной системы, состоящей из  $N$  магнитных моментов, полностью определяется  $3N$  параметрами — координатами векторов магнитных моментов в трехмерном пространстве. Фиксация модулей магнитных моментов приводит к появлению  $N$  связей. В методе ГМУЛ вместо  $3N$ -мерного евклидова пространства с  $N$  связями выбирается  $2N$ -мерное риманово многообразие  $R$ , соответствующее произведению  $N$  2-мерных сфер. В методе ГМУЛ непрерывная траектория между начальным и конечным состоянием заменяется на цепочку дискретных изображений системы. Соседние изображения соединяются фиктивными

пружинками, чтобы обеспечить равное расстояние между изображениями. ГМУЛ позволяет с высокой точностью определить единичные векторы магнитных моментов  $\mathbf{s}_i$  для седловых точек и локальных минимумов эффективного гамильтониана [42].

## 2.4 Гармоническое приближение теории переходного состояния

Частотные префакторы вычислялись в рамках гармонического приближения теории переходного состояния (ТПС) [42].

Частоту перехода из между локальными минимумами можно вычислить в рамках теории переходного состояния (ТПС) [42,43]

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (22)$$

где  $T$  – температура системы,  $k$  – постоянная Больцмана,  $v_0$  – частотный префактор. В гармоническом приближении ТПС частотный префактор вычисляется как [42,44,45,46]

$$v_0 = \frac{1}{2\pi} \left[ \left( \sum_{i=1}^{2N-1} \frac{(a_{sp}^i)^2}{\xi_{SP}^i} \right) \frac{\prod_{i=1}^{2N} \xi_{min}^i}{\prod_{i=1}^{2N-1} \xi_{SP}^i} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (23)$$

где  $\xi_{min}^i$  и  $\xi_{SP}^i$  – упорядоченные по убыванию собственные значения матрицы Гессе гамильтониана (1), вычисленные в локальном минимуме и в седловой точке, соответственно. Коэффициенты  $a_{sp}^i$  вычисляются по формуле [41]

$$a_{sp}^i = \frac{\gamma}{\mu} \xi_{SP}^i (e_{SP}^{2N} \cdot [S^{SP} \times e_{SP}^i]), \quad (24)$$

где  $e_{SP}^i$  – нормированные собственные векторы гессиана, соответствующие собственным значениям  $\xi_{SP}^i$  ( $\xi_{SP}^{2N} < 0$ ),  $S^{SP}$  –  $3N$ -мерный вектор, составленный из векторов  $\mathbf{s}_i$  в седловой точке,  $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar}$  – гиромагнитное отношение. Найденные по формуле (22) частоты перемагничивания цепочки используются далее для вычисления кривых намагничивания.

Важно отметить, что мы рассматривались атомные цепочки конечной длины (от 5 до 100 атомов) при наличии двухосной магнитокристаллической анизотропии. Такая система не инвариантна ни относительно сдвигов, ни относительно вращений. Поэтому все собственные значения гессиана ( $\xi_{min}^i$  и  $\xi_{SP}^i$ ) не равны нулю.

## Глава 3. Результаты

### 3.1 Цепочки Co на поверхности Pt(664)

#### 3.1.1 Без внешнего магнитного поля

На рис. 7(а) представлены направления осей координат относительно атомной цепочки, направление вектора Дзялошинского и вектора индукции внешнего магнитного поля. На рисунках (б)-(г) изображены механизмы перемагничивания атомных цепочек различных длин.

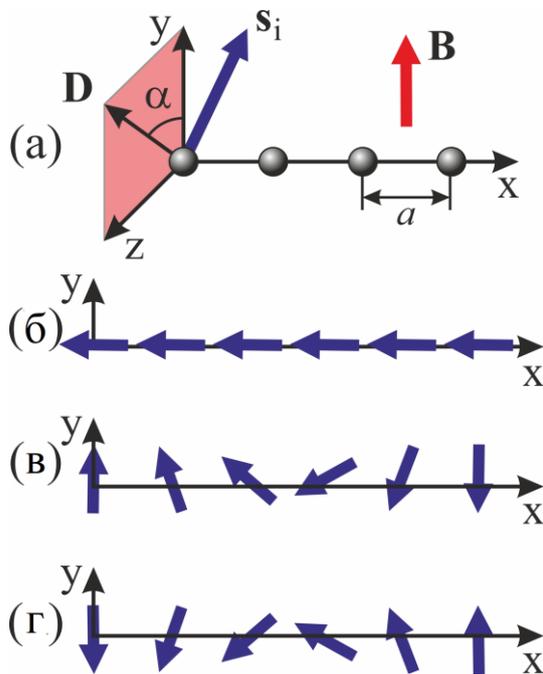


Рис.7. (а) Схематичное изображение атомной цепочки и осей координат.

(б-г) Схематичные изображения различных механизмов перемагничивания

Бесконечная цепочка Co/Pt(664) имеет два основных вырожденных коллинеарных состояния, в которых все атомы направлены вдоль оси легкого намагничивания [34]. В случае конечной цепочки основные состояния (ОС1 и ОС2) не являются коллинеарными. Взаимодействие Дзялошинского-Мория подкручивает векторы магнитных моментов крайних атомов против часовой стрелки в плоскости XY на угол около  $7^\circ$ . Были построены графики проекций магнитных моментов атомов в цепочке на оси координат в основных состояниях, метастабильном состоянии

и седловых точках. Переход между состояниями ОС1 и ОС2 зависит от длины цепочки  $S_0$  (рис. 8).

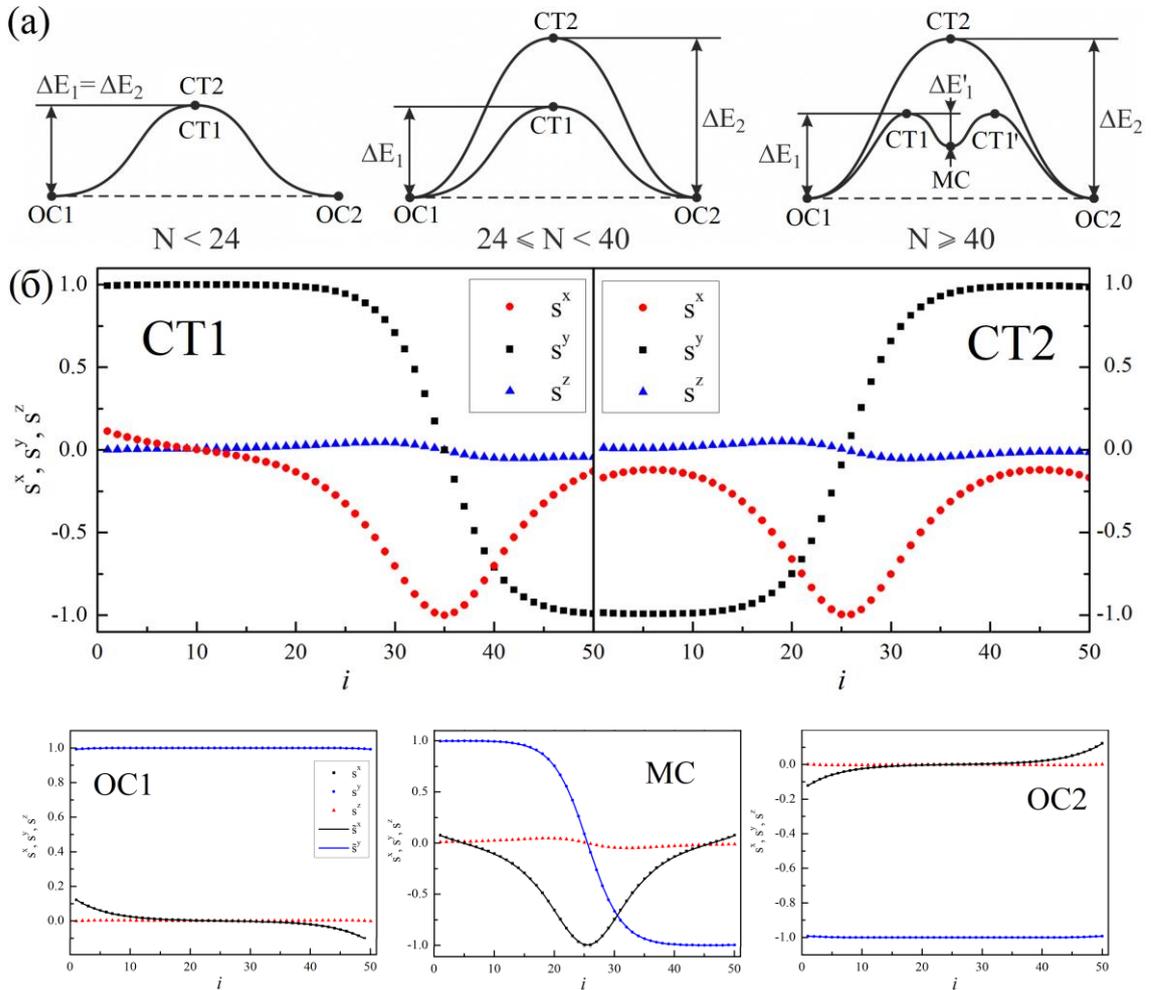


Рис. 8. (а) Схематические энергетические диаграммы для коротких цепочек  $S_0$  ( $N < 24$ ), средних цепочек  $S_0$  ( $24 \leq N < 40$ ) и длинных цепочек  $S_0$  ( $N \geq 40$ ) (б) Основные состояния, метастабильное состояние и седловые точки цепочки

Обнаружены несколько характерных значений длин цепочки. Для коротких цепочек длиной меньше 24 атомов перемагничивание происходит путём одновременного переворота всех магнитных моментов. Доменная стенка при этом не образуется. Цепочка длиной от 24 до 40 атомов перемагничивается с образованием неелевской доменной стенки (ДС) или антидоменной (АДС) стенки. Формирование АДС является энергетически более выгодным. Этот эффект обусловлен наличием взаимодействия Дзялошинского-Мория. По формулам (12.1) и (12.2) можно оценить энергии образования этих стенок:

$$E_{\text{ДС}} = \sqrt{8(K - E)J} + \pi D \sin \alpha = 26,45 \text{ мэВ} \quad (25)$$

и

$$E_{\text{АДС}} = \sqrt{8(K - E)J} - \pi D \sin \alpha = 17,35 \text{ мэВ} \quad (26)$$

Таким образом, для цепочек таких длин существует два неэквивалентных пути перемагничивания. Отметим, что седловая точка СТ2 соответствует положению ДС в середине атомной цепочки. Но если АДС расположена в середине атомной цепочки, то это состояние является либо седловой точкой (СТ1) (если  $N_1 \leq N < N_2 = 40$ ), либо метастабильным состоянием (МС) (если  $N \geq N_2$ ). Т.е. если длина цепочки превышает 40 атомов, то при перемагничивании образуется дополнительное метастабильное состояние.

Обсудим подробнее энергетические барьеры и магнитные конфигурации цепочки Со из  $N = 50$  атомов. При рассмотрении основных состояний с увеличением порядкового номера атома наблюдается вращение магнитных моментов против часовой стрелки в плоскости XY. Этот эффект легко объяснить в рамках непрерывной XY-модели, поскольку отклонение магнитных моментов от плоскости XY очень мало ( $|s_i^z| < 0.004$ ). Согласно выражению (20) при вращении магнитных моментов на конце цепочки происходит изменение энергии на величину:

$$E_{\text{min}} \approx -\frac{(D \sin \alpha)^2}{2\sqrt{2(K - E)J}}, \quad (27)$$

т.к. для системы Со/Pt(664)  $D \sin \alpha \ll \sqrt{2(K - E)J}$ . Подставив в (27) параметры гамильтониана, получим оценку разности энергий коллинеарного и неколлинеарного состояний  $2|E_{\text{min}}| \approx 0,192 \text{ мэВ}$ . Оценить угол отклонения магнитных моментов на краю цепочки в основном состоянии можно с помощью формулы (15):

$$\theta_0 \approx \pm D \sin \alpha \sqrt{2(K - E)J} = \pm 0,132 \quad (28)$$

Численный результат  $\theta_0 = \pm 0,123$  хорошо согласуется с этой теоретической оценкой. Сделаем численные оценки энергий образования доменной и

антидоменной стенок. Более высокий энергетический барьер соответствует разности  $E_{СТ2} - E_{OC}$ , равной 26,168 мэВ, а более низкий энергетический барьер – разности  $E_{МС} - E_{OC}$ , которая составляет 17,363 мэВ. Эти значения находятся в хорошем согласии с результатом, полученным в рамках непрерывной ХУ-модели по формулам (25) и (26).

Из рис. (8б) видно, что седловая точка СТ1 соответствует ситуации, когда АДС расположена вблизи правого конца атомной цепочки. Направления магнитных моментов на концах цепочки практически противоположны. Энергетический барьер перехода из основного состояния в метастабильное составляет  $\Delta E_1 = E_{СТ1} - E_{OC} = 17,441$  мэВ. А энергетический барьер обратного перехода равен  $\Delta E'_1 = E_{СТ1} - E_{МС} = 0,078$  мэВ.

Непрерывная ХУ-модель позволяет понять, почему энергия увеличивается,

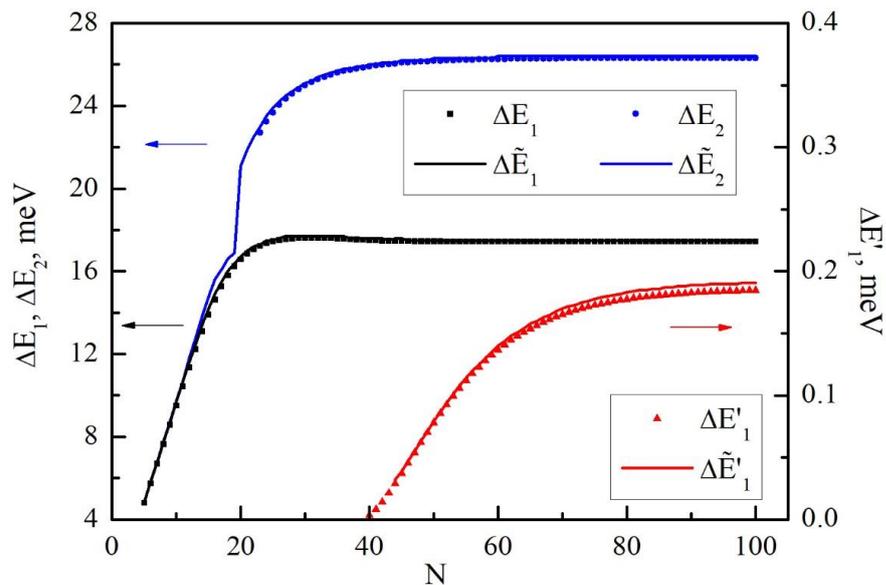


Рис. 9. Зависимости энергетических барьеров  $\Delta E_1$ ,  $\Delta E_2$  и  $\Delta E'_1$  от длины атомной цепочки когда антидоменная стенка находится ближе к краю цепочки. Действительно, в этом случае вклад (27) в энергию от правого конца цепочки исчезает, и энергия увеличивается примерно на  $\Delta E'_1 \approx |E_{min}| \approx 0,096$  мэВ.

Получены зависимости энергетических барьеров от длины атомной цепочки (рис.9). Барьер  $\Delta E_1$  соответствует образованию АДС, барьер  $\Delta E_2$  – образованию ДС, а барьер  $\Delta E'_1$  – переходу в метастабильное состояние через

одну из седловых точек. При длине цепочки меньше 24 атомов седловые точки соответствуют конфигурациям, в которых все магнитные моменты направлены практически вдоль цепочки. Энергии этих конфигураций одинаковы, следовательно,  $\Delta E_1 = \Delta E_2$ , что видно на графике. Зависимость  $\Delta E_1(N)$  линейно возрастает при малых  $N$ , достигает максимума при  $N = 31$  и далее стремится к постоянному значению. Линейную зависимость  $\Delta E_1(N) \approx (K - E)N$  при малых значениях  $N$  можно легко объяснить. Для простоты рассмотрим случай  $D_z = 0$ . Перемагничивание короткой атомной цепочки может происходить двумя разными способами. Если длина цепочки  $N$  меньше  $N_0$ , то все магнитные моменты переворачиваются одновременно без образования доменной стенки. При этом во время перемагничивания углы  $\theta_i = \theta$  одинаковы для всех магнитных моментов. Согласно формуле (4), магнитная энергия цепочки может быть выражена как  $E = -N(K \cos^2 \theta + E \sin^2 \theta)$ . Минимальная энергия  $-KN$  соответствует углам  $\theta = 0, \pi$ , а максимальная энергия  $-EN$  соответствует углу  $\theta = \pi/2$ . Таким образом, энергетический барьер равен  $\Delta E = (K - E)N$ . Если  $N \geq N_0$ , то магнитные моменты переворачиваются один за другим с образованием доменной (или антидоменной) стенки. Чтобы оценить значение  $N_0$ , можно использовать непрерывную XY-модель. Как видно из (25), (26), энергия образования доменной стенки в бесконечной атомной цепочке равна  $\sqrt{8(K - E)J}$ . Приравнивая это значение к  $KN_0$ , получаем оценку

$$N_0 = \sqrt{\frac{8J}{K - E}} \approx 22.6 \quad (29)$$

Видно, что значения  $N_0$  близко к значению 23. В случае  $D_z \neq 0$  общая картина не меняется. Если  $N < 23$ , то перемагничивание происходит без образования доменной стенки. А если  $N \geq 23$ , то перемагничивание происходит с образованием доменной или антидоменной стенок.

Зависимость  $\Delta E_2(N)$  имеет разрыв при  $N = 40$ , а зависимость  $\Delta E'_1(N)$  имеет смысл лишь при  $N \geq 40$ . Точками на графике указаны значения, полученные с помощью ГМУЛ, а сплошной линией – результаты, полученные в рамках непрерывной ХУ-модели. Видно, что с хорошей точностью полученные двумя методами результаты совпадают.

Для количественного объяснения численных результатов воспользуемся результатами непрерывной ХУ-модели, из аналитических решений (10), (11), (17) и (21) можно построить следующие функции.

$$\theta_i^{OC}(i_{10}) = f_1(i - i_0 - i_{10}) + f_1(i - i_0 + i_{10}) - \pi, \quad (30)$$

$$\theta_i^{MC}(i_{11}) = f_1(i - i_0) + f_1(i - i_0 - i_{11}) + f_1(i - i_0 + i_{11}), \quad (31)$$

$$\theta_i^{SP1}(i_{12}, i_{22}) = f_1(i - i_{12}) + f_1(i + i_{12}) + \pi, \quad (32)$$

$$\theta_i^{CT2}(i_{13}) = f_2(i - i_0) + f_1(i - i_0 - i_{13}) + f_1(i - i_0 + i_{13}), \quad (33)$$

где  $i_0 = \frac{(N+1)}{2}$ ,  $i_{10}, i_{11}, i_{22}, i_{13} > 0$ , и  $i_{12} \in [i_0, N]$  действительные числа,

$$f_1(x) = \arccos \left( \text{th} \left( \sqrt{\frac{2(K-E)}{J}} x \right) \right), \quad (34)$$

$$f_2(x) = \arccos \left( -\text{th} \left( \sqrt{\frac{2(K-E)}{J}} x \right) \right). \quad (35)$$

Подставив (30), (31), (32) и (33) в гамильтониан (1), (2), (3), (4), получим энергию атомной цепочки как функцию одной или двух переменных:  $E_{OC}(i_{10})$ ,  $E_{MC}(i_{11})$ ,  $E_{СТ1}(i_{12}, i_{22})$  и  $E_{СТ2}(i_{13})$ . Теперь нетрудно численно найти минимумы функций  $\tilde{E}_{OC}$ ,  $\tilde{E}_{MC}$  и  $\tilde{E}_{СТ2}$  и соответствующие им значения  $\tilde{i}_{10}$ ,  $\tilde{i}_{11}$  и  $\tilde{i}_{13}$ . Аналогично можно численно найти седловую точку  $\tilde{E}_{СТ1}$  функции  $E_{СТ1}(i_{12}, i_{22})$  и соответствующие значения  $\tilde{i}_{12}$ ,  $\tilde{i}_{22}$ . Значения  $\tilde{i}_{10}$ ,  $\tilde{i}_{11}$ ,  $\tilde{i}_{12}$ ,  $\tilde{i}_{22}$  и  $\tilde{i}_{13}$  рассчитаны для атомных цепочек, состоящих из различного числа атомов (рис. 10).

Подставляя  $\tilde{l}_{10}$ ,  $\tilde{l}_{11}$ ,  $\tilde{l}_{12}$ ,  $\tilde{l}_{22}$  и  $\tilde{l}_{13}$  обратно в (30), (31), (32) и (33), находим проекции  $\tilde{s}_i^x = \sin \tilde{\theta}_i$  и  $\tilde{s}_i^y = \cos \tilde{\theta}_i$  ( $\tilde{s}_i^z = 0$  в XY-модели). Значения  $\tilde{s}_i^x$  и  $\tilde{s}_i^y$  для атомной цепочки, состоящей из  $N = 50$  атомов, показаны на рис. 8. Видно, что значения  $\tilde{s}_i^x$  и  $\tilde{s}_i^y$  хорошо согласуются со значениями  $s_i^x$  и  $s_i^y$ , полученными методом ГМУЛ. Значения  $\tilde{E}_{OC}$ ,  $\tilde{E}_{MC}$  и  $\tilde{E}_{CT1}$  и  $\tilde{E}_{CT2}$  позволяют рассчитать энергетические барьеры. В случае атомной цепочки, состоящей из  $N = 50$  атомов, эти барьеры следующие:  $\Delta\tilde{E}_1 = 17,535$  мэВ,  $\Delta\tilde{E}_2 = 26,258$  мэВ и  $\Delta\tilde{E}'_1 = 0,079$  мэВ. Полученные значения находятся в хорошем количественном согласии с результатами расчетов ГМУЛ, представленными выше.

Рассмотрим цепочку, состоящую из  $N \in [5, 100]$  атомов. Прежде всего, функция  $E_{CT1}(i_{12}, i_{22})$  имеет седловую точку только в том случае, если  $N \geq \tilde{N}'_{10} = 44$ . Видно, что значения  $\tilde{N}'_{10}$  и  $N'_{10}$  близки, но  $\tilde{N}'_{10} > N'_{10}$ . Зависимости значений  $\tilde{l}_{12}$  и  $\tilde{l}_{22}$  от длины атомной цепочки показаны на рис. 10. Видно, что значение  $\tilde{l}_{12}$  монотонно возрастает с увеличением  $N$ . Это означает, что доменная стенка в состоянии СТ1 расположена примерно на одинаковом расстоянии от конца цепочки при любом значении  $N$ . При этом значение  $\tilde{l}_{22}$  монотонно уменьшается, поскольку влияние доменной стенки, расположенной на правом конце цепочки, на левый конец цепочки уменьшается. Функция  $\Delta\tilde{E}'_1(N)$  показана на рис. 9. Как видно, значение  $\Delta\tilde{E}'_1(N)$

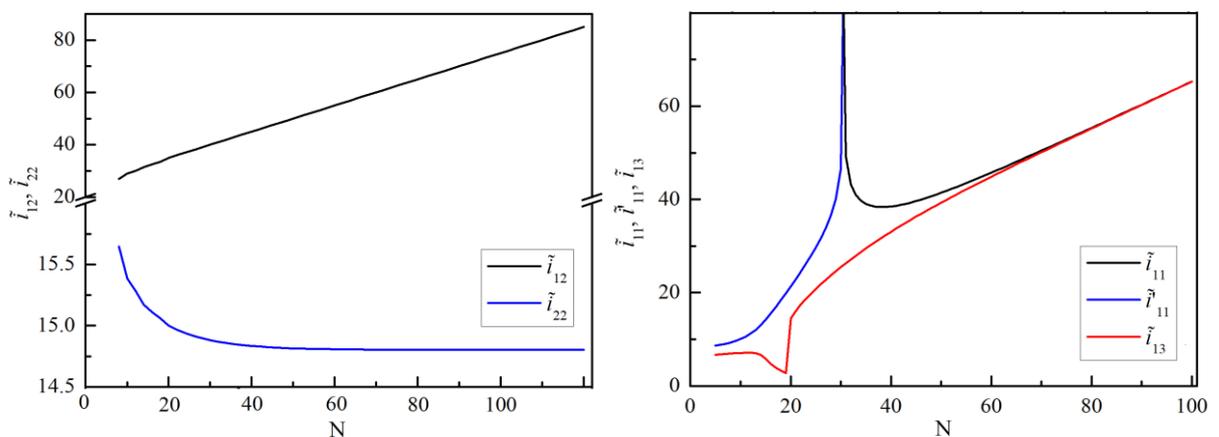


Рис. 10. Зависимости величин  $\tilde{l}_{11}$ ,  $\tilde{l}'_{11}$ ,  $\tilde{l}_{12}$ ,  $\tilde{l}_{22}$  и  $\tilde{l}_{13}$  от длины атомной цепочки

завышает значение  $\Delta E'_1(N)$  при всех значениях  $N$ , а  $|\Delta \tilde{E}'_1(N) - \Delta E'_1(N)| < 0,007$  мэВ.

Во-вторых, функция  $E_{\text{CT2}}(i_{13})$  описывает изменение режима перемагничивания, когда длина цепочки близка к критическому значению  $N_0$ . Из рис. 4 видно, что функция  $\tilde{i}_{13}(N)$  не является монотонной и имеет разрыв при  $\tilde{N}_{20} = 20$ . В результате функция  $\Delta \tilde{E}_2(N)$  также имеет разрыв. Сравнение функций  $\Delta \tilde{E}_2(N)$  и  $\Delta E_2(N)$  приведено на рис. 9. Видно, что эти функции находятся в хорошем качественном согласии, и  $\Delta \tilde{E}_2(N) > \Delta E_2(N)$  при всех значениях  $N$ . Заметим, что функция (26) хорошо аппроксимирует седловую точку как при  $N \gg N_{20}$ , так и при  $N \ll N_{20}$ . В этих диапазонах разница между функциями  $\Delta \tilde{E}_2(N)$  и  $\Delta E_2(N)$  весьма мала:  $|\Delta \tilde{E}_2(N) - \Delta E_2(N)| \approx 0,1$  мэВ. Однако эта разница может достигать 1 мэВ, если  $N \approx N_{20}$ . Более того, оценка  $\tilde{N}_{20}$  немного хуже простой оценки (29).

Наконец, функция (31) хорошо аппроксимирует состояния МС или СТ1'' только в том случае, если  $N \geq N_1^{\text{max}}$ . Если  $N < N_1^{\text{max}}$ , то можно использовать следующее приближение:

$$\theta_i^{\text{CT1''}}(i'_{11}) = f_1(i - i_0) + f_1(i - i_0 - i'_{11}) + f_1(i - i_0 + i'_{11}), \quad (36)$$

где  $i'_{11} > 0$  и имеет действительное значение. Значения  $\tilde{E}_{\text{CT1''}}$  и  $\tilde{i}'_{11}$  могут быть найдены численной минимизацией функции  $E_{\text{CT1''}}(i'_{11})$ . Тогда энергетический барьер  $\Delta \tilde{E}_1(N)$  можно вычислить как

$$\Delta \tilde{E}_1(N) = \min \left( \tilde{E}_{\text{CT1''}}(N), \tilde{E}_{\text{MC}}(N) \right) - \tilde{E}_{\text{OC}}(N) + \Delta \tilde{E}'_1(N) H(N - \tilde{N}'_{10}), \quad (37)$$

где функция  $\min \left( \tilde{E}_{\text{CT1''}}(N), \tilde{E}_{\text{MC}}(N) \right)$  определяет либо энергию в седловой точке СТ1'', если  $N < \tilde{N}'_{10}$ , либо энергию в локальном минимуме МС, если  $N \geq \tilde{N}'_{10}$ .  $H(x)$  — ступенчатая функция Хевисайда

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases} \quad (38)$$

Зависимость (37) показана на рис. 9. Видно, что значения  $\Delta\tilde{E}_1(N)$  и  $\Delta E_1(N)$  хорошо согласуются при всех значениях  $N$ . Функция  $\Delta\tilde{E}_1(N)$  имеет максимум при  $\tilde{N}_1^{max} = 31$ . Обратим внимание, что  $\tilde{N}_1^{max} = N_1^{max}$ .

Теперь появление этого максимума можно легко объяснить. Рассмотрим функции  $\tilde{i}_{11}(N)$  и  $\tilde{i}'_{11}(N)$ , представленные на рис. 10. Обе функции резко возрастают при  $N \rightarrow \tilde{N}_1^{max}$ . Это означает, что состояние СТ1" соответствует АДС, расположенной в середине цепочки. Никаких дополнительных «завихрений» на концах цепочки при  $N = \tilde{N}_1^{max}$  нет.

Рассмотрим, как значения  $\Delta E_1$ ,  $\Delta E'_1$  и  $\Delta E_2$  зависят от параметров гамильтониана. В случае  $D = 0$  и  $E = 0$  зависимости энергетического барьера от параметров  $J$  и  $K$  изучались ранее (см., например, [48,49]). Поэтому уделим особое внимание исследованию зависимости энергетических барьеров от параметров  $D$ ,  $\alpha$  и  $E$ .

Можно получить функции  $\Delta E_1(N)$ ,  $\Delta E'_1(N)$  и  $\Delta E_2(N)$  для каждого возможного набора параметров. Эти функции аналогичны представленным на рис. 9. Обсудим следующие характерные значения:  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $N_1^{max}$ ,  $N_{20}$  и  $N'_{10}$ , где  $\Delta E_1(N = 100)$  – энергетический барьер образования АДС,  $\Delta E'_1(N = 100)$  – энергетический барьер перехода в метастабильное состояние,  $\Delta E_2(N = 100)$  – энергетический барьер образования ДС,  $N_1^{max}$  – значение длины, при котором зависимость  $\Delta E_1(N)$  имеет максимум,  $N_{20}$  – длина, при которой меняется механизм перемагничивания с одновременного переворота магнитных моментов на образование доменной стенки,  $N'_{10}$  – минимальная длина цепочки, при которой появляется дополнительное метастабильное состояние.

Первым делом будем варьировать параметры  $D$  и  $\alpha$  при фиксированном  $E$ . Заметим, что в рамках непрерывной ХУ-модели энергетические барьеры могут зависеть только от значения  $D^z = D \sin \alpha$ . Для проверки ХУ-модели проведем две серии расчетов. В первой серии расчетов значение  $\alpha$  будем изменять в диапазоне от 0 до  $\pi$  с шагом  $5^\circ$  при фиксированном значении  $D =$

1,92 мэВ. Во второй серии расчетов значение  $D$  будем изменять в диапазоне от 0 до  $D_{max} = 5,7$  мэВ при фиксированном значении  $\alpha = 131^\circ$ . Зависимости  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $N_1^{max}$ ,  $N_{20}$  и  $N'_{10}$  от параметра  $D^z$  показаны на рис. 11. Видно, что, во-первых, точки, полученные вариацией  $\alpha$ , и точки, полученные вариацией  $D$ , очень близки. Этот факт показывает, что ХУ-модель является хорошим приближением в случае системы Со/Pt(664). Во-вторых, результаты, полученные методом ГМУЛ, качественно согласуются с результатами ХУ-модели. Видно, что значения  $\Delta \tilde{E}_1(N = 100)$ ,  $\Delta \tilde{E}_2(N = 100)$ ,  $\Delta \tilde{E}'_1(N = 100)$  и  $\tilde{N}'_{10}$  переоценивают соответствующие значения  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$  и  $N'_{10}$  при всех значениях  $D^z$ . В то же время значение  $\tilde{N}_{20}$  занижает значение  $N_{20}$ . В-третьих, линейные функции  $\Delta \tilde{E}_1(D^z)$  и  $\Delta \tilde{E}_2(D^z)$  находятся в хорошем согласии с формулами (18) и (19). А функция  $\Delta \tilde{E}'_1(D^z)$  хорошо согласуется с квадратичной функцией  $\Delta E'_1(D^z) \approx 2E_{min}$ , где  $E_{min}$  определяется выражением (20). Интересно отметить, что состояние СТ2 переходит в локальный максимум энергии при  $D^z > D_{max}^z \approx 4,3$  мэВ. Это означает, что перемагничивания за счет образования ДС в этом случае не происходит. Действительно, седловая точка СП2 и метастабильное состояние МС с неелевской доменной стенкой в середине атомной цепочки разделены в конфигурационном пространстве состоянием с блоховской доменной стенкой, лежащей в плоскости YZ. В рамках непрерывной ХУ-модели энергия образования блоховской доменной стенки в бесконечной атомной цепочке равна

$$E_{\text{Блох}} = \sqrt{8(K + E)J}. \quad (39)$$

Следовательно, между состояниями СТ2 и МС существует энергетический барьер  $\Delta E_3$ . Величину этого барьера невозможно вычислить в рамках ХУ-модели, но можно грубо оценить как  $\Delta E_3 \approx E_{\text{Блох}} - E_{\text{ДС}}$ .

Состояние СТ2 переходит в локальный максимум энергии, когда  $\Delta E_3 = 0$ .

На рис. 6 показаны зависимости значений  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $N_1^{max}$ ,  $N_{20}$  и  $N'_{10}$  от параметра  $E$ . Параметр  $E$  варьируется в диапазоне от 0 до 1,3 мэВ. Таким образом, рис. 12 аналогичен рис. 11. Однако, он имеет следующие интересные особенности. Во-первых, различия между значениями  $\Delta \tilde{E}_1(N = 100)$ ,  $\Delta \tilde{E}'_1(N = 100)$ ,  $\Delta \tilde{E}_2(N = 100)$  и соответствующими значениями  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$  уменьшаются с увеличением параметра  $E$ . Это связано с тем, что магнитная анизотропия в плоскости YZ увеличивается и XY-модель становится более точной. Во-вторых, ширина доменной стенки  $\delta N$  и критическая длина цепочки  $N_{20}$  увеличиваются с увеличением параметра  $E$  (см. формулы (11) и (29)). Таким образом, простые оценки (20), (21) и  $\Delta E'_1 \approx 2E_{min}$ , основанные на непрерывной XY-модели, дают правильные результаты только при не слишком больших значениях  $E$ , когда  $\delta N \ll 100$ . При  $E > 1,2$  мэВ значение  $N_{20}$  становится больше длины атомной цепочки  $N = 100$ . В этом случае перемагничивание происходит без образования доменной стенки. Как видно на рис. 12, этот эффект хорошо описывается в рамках XY-модели. Наконец, состояние СТ2 является седловой точкой только в том случае, если  $E > E_{min} \approx 0,12$  мэВ. Это связано с тем, что энергетический барьер между состояниями СТ2 и МС исчезает при  $E < E_{min}$ . Выражение (27) дает оценку  $\tilde{E}_{min} \approx 0,15$  мэВ, что хорошо согласуется со значением  $E_{min}$ .

Зная энергетические барьеры для перемагничивания цепочек, можно рассчитать время спонтанного перемагничивания атомной цепочки  $S_0$  [34]. Для изучения влияния взаимодействия Дзялошинского-Мория на время перемагничивания, а также для сопоставления степени вкладов диполь-дипольного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория были рассмотрены 3 случая: 1) время  $\tau_1$  спонтанного перемагничивания с учетом только обменного взаимодействия и энергии магнитной анизотропии; 2) время  $\tau_2$  спонтанного перемагничивания с учетом обменного взаимодействия, энергии магнитной анизотропии и взаимодействия Дзялошинского-Мория; 3)

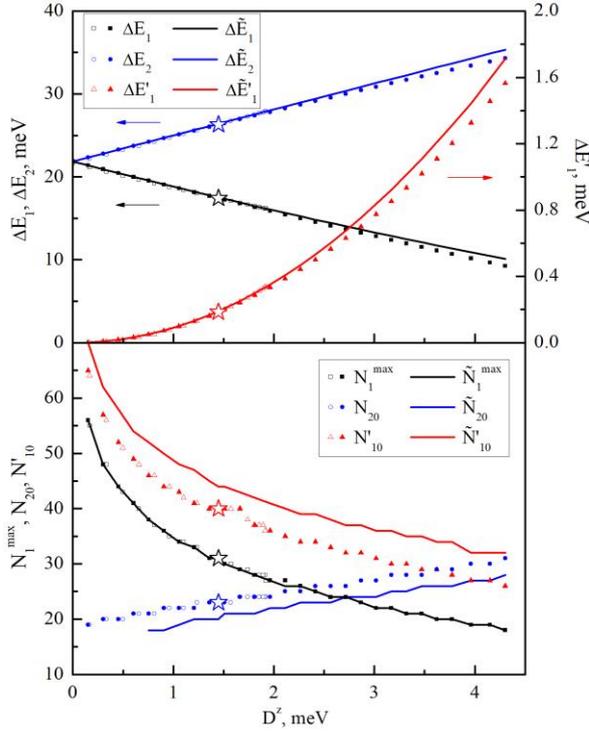


Рис. 11. Зависимости значений  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $N_1^{\max}$ ,  $N_{20}$  и  $N'_{10}$  от параметра  $Dz$ . Точки — результат вычислений ГМУЛ, а линии — результат ХУ-модели. Пустые точки получаются при фиксированном значении  $D = 1,92$  мэВ. Заполненные точки получаются при фиксированном значении  $\alpha = 131^\circ$ . Звезды соответствуют параметрам, взятым из [11].

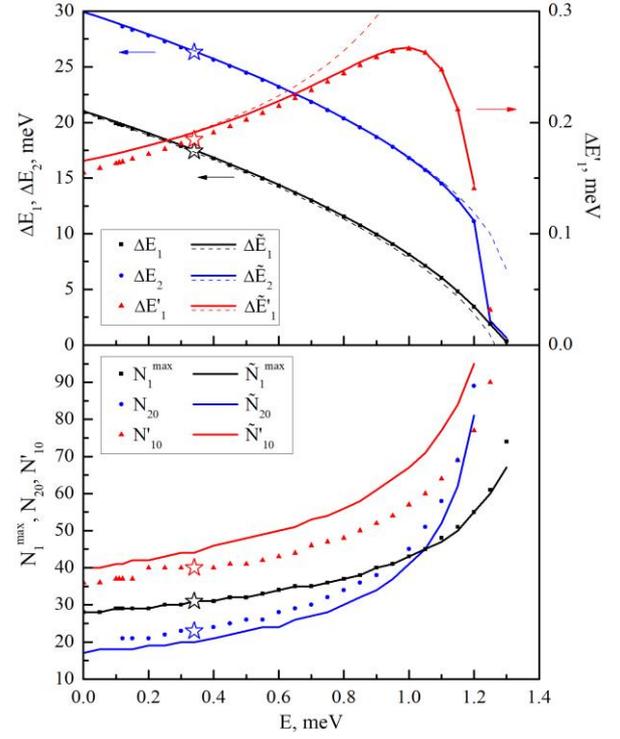


Рис. 12. Зависимости значений  $\Delta E_1(N = 100)$ ,  $\Delta E'_1(N = 100)$ ,  $\Delta E_2(N = 100)$ ,  $N_1^{\max}$ ,  $N_{20}$  и  $N'_{10}$  от параметра  $E$ . Точки — результат расчетов ГМУЛ, а сплошные линии — результат ХУ-модели. Пунктирные линии представляют собой простые оценки, основанные на непрерывной ХУ-модели. Звезды соответствуют параметрам, взятым из [11].

время  $\tau$  спонтанного перемагничивания с учетом обменного взаимодействия, энергии магнитной анизотропии, взаимодействия Дзялошинского-Мория и диполь-дипольного взаимодействия.

На рис. 9 видно, что  $\Delta E'_1 \ll \Delta E_1, \Delta E_2$ . Таким образом, мы можем пренебречь значениями  $\Delta E'_1$  и оценить время спонтанного перемагничивания как

$$\tau = \nu_0^{-1} \left[ \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (40)$$

где  $\nu_0 = 10^9$  Гц — частотный префактор [37].

На рис. 13(а) представлена зависимость десятичного логарифма времени спонтанного перемагничивания (измеренного в секундах)  $\lg(\tau/s)$  от длины

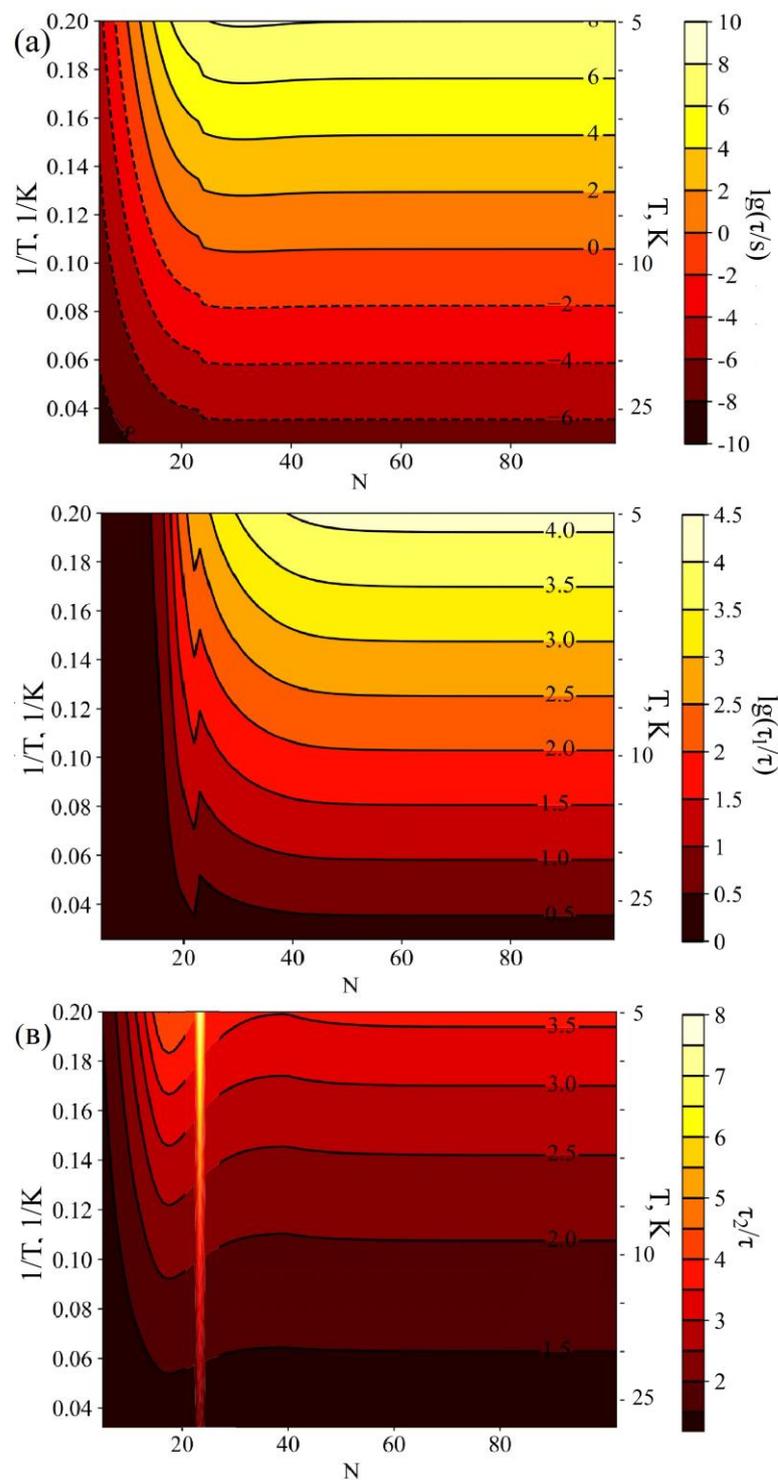


Рис. 13. (а) Десятичный логарифм  $\tau$  (измеряется в секундах). (б) Десятичный логарифм  $\tau_1/\tau$ . (в) Величина  $\tau_2/\tau$  в зависимости от длины атомной цепочки  $N$  и обратной температуры  $1/T$  системы Co/Pt(664), где  $\tau$ ,  $\tau_1$  и  $\tau_2$  — рассчитанные времена спонтанного перемагничивания в рамках различных теоретических моделей. При расчете  $\tau_1$  учитываются только обменная энергия и энергия магнитной анизотропии. Взаимодействие Дзялошинского-Мория добавляется для расчета  $\tau_2$ . Все взаимодействия (1) учитываются при расчете  $\tau$ .

атомной цепочки  $N$  и обратной температуры  $1/T$  системы. Рассматривались

цепочки длиной от 5 до 100 атомов в диапазоне температур от 5 до 40 К. Полученные значения времен спонтанного перемагничивания находятся в интервале от  $1,24 \times 10^{-7}$  с при 40 К примерно до 108 с при 5 К. При постоянной температуре функция  $\tau(N)$  имеет заметный скачок при  $N = 24$ . Функция  $\tau(N)$  имеет один локальный максимум и один локальный минимум ( $N_{min} > N_{max} > N_3$ ).

В первой модели нет разницы между энергиями образования доменной и антидоменной стенки, так как взаимодействие Дзялошинского-Мория не учитывается. Таким образом, барьеры  $E_1$  и  $E_2$  равны для всех длин цепочки ( $E_1(N) = E_2(N) \equiv E(N)$ ). Функция  $E(N)$  непрерывна, монотонно возрастает с ростом  $N$  и стремится к значению 21,87 эВ при  $N = 100$ . Для сравнения значений  $\tau$  и  $\tau_1$  на рис. 13(б) представлен десятичный логарифм  $\frac{\tau_1}{\tau}$  как функция длины атомной цепочки  $N$  и обратной температуры  $\frac{1}{T}$ . Видно, что значения  $\frac{\tau_1}{\tau}$  могут достигать  $\sim 10\ 000$  при низких температурах. Однако если  $T = 40$  К, отношение  $\frac{\tau_1}{\tau}$  больше 2 для  $N > 18$ . Основное отличие моделей 3 и 1 состоит в том, что значение длины, при котором меняется механизм перемагничивания, равно 23 вместо 24. Физическая причина этого явления заключается в том, что минимум диполь-дипольной энергии соответствует случаю, когда все магнитные моменты направлены вдоль оси цепочки. Таким образом, перемагничивание без образования доменной стенки энергетически выгоднее (при  $N = 23$ ), если учитывать диполь-дипольное взаимодействие.

Зависимость  $\frac{\tau_2}{\tau}$  от длины атомной цепочки  $N$  и обратной температуры  $\frac{1}{T}$  представлена на рис. 13(в). При постоянной температуре функция  $\frac{\tau_2}{\tau(N)}$  не является монотонной. При всех температурах эта функция имеет узкий пик при  $N = 23$  и локальный максимум при  $N = 17$ . Функция  $\frac{\tau_2}{\tau(N)}$  также имеет локальный минимум при  $N = 38$  или 39. Видно, что если  $T > 10,9$  К, то  $\frac{\tau_2}{\tau}$  становится меньше 2 при всех значениях  $N$ .

Таким образом, диполь-дипольным взаимодействием можно пренебречь при  $T > 10,9$  К, а взаимодействие Дзялошинского-Мория необходимо учитывать во всем температурном интервале от 5 до 40 К.

### 3.1.2 С внешним магнитным полем

Рассмотрим перемагничивание системы Co/Pt(664) во внешнем магнитном поле и исследуем зависимость величины частотных префакторов как от величины внешнего поля, так и от длины цепочки.

Рассмотрим подробнее процесс перемагничивания цепочки из 50 атомов Co, находящейся во внешнем магнитном поле  $B_y = 1$  Тл.

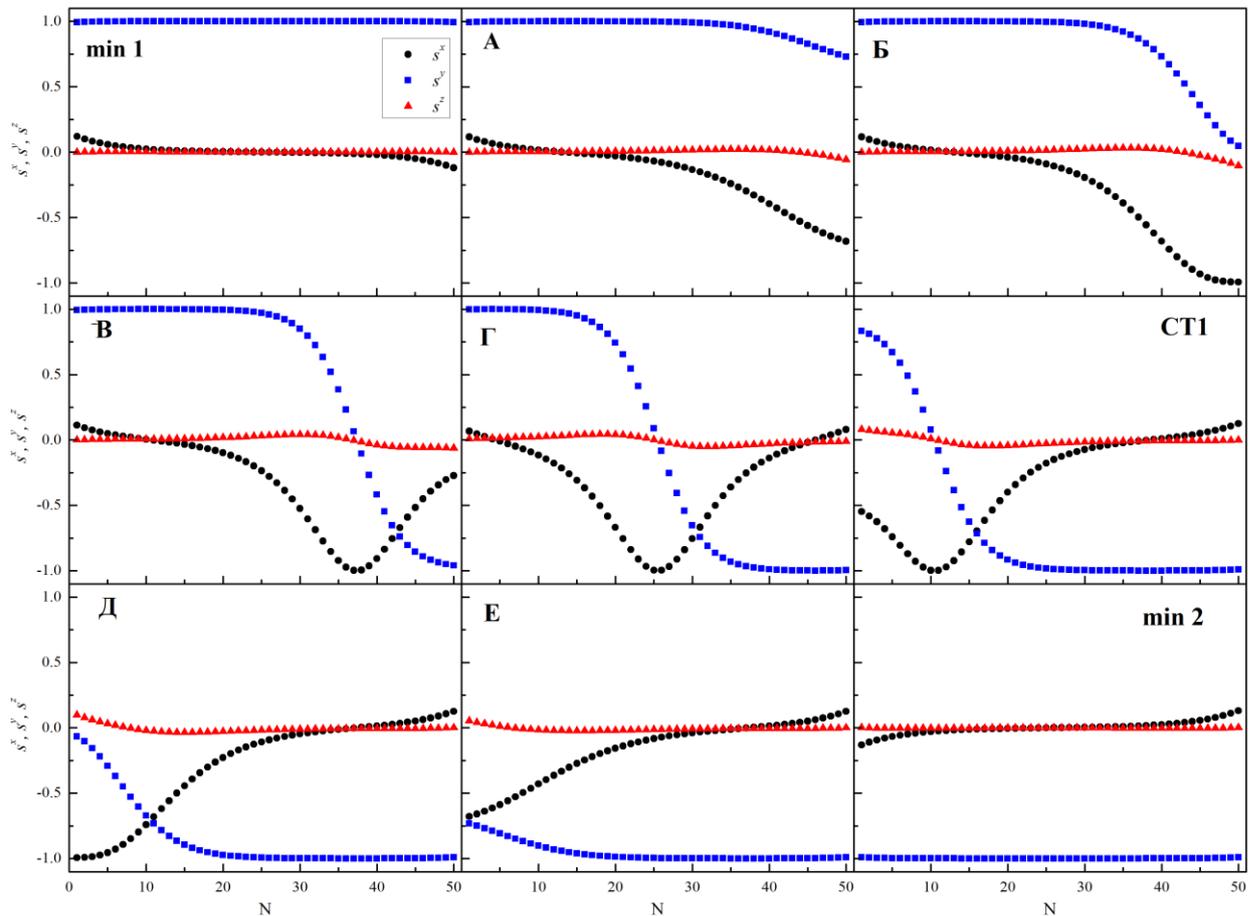


Рис.14. Последовательные изображения конфигураций цепочки из 50 атомов Co при ее перемагничивании посредством формирования антидоменной стенки. Начальное состояние, седловая точка и конечное состояние обозначены, как min 1, СТ1 и min 2, соответственно. Промежуточные изображения (А,Б,В,Г,Д,Е) показаны для наглядности.

На рис.14 показаны 9 из 15 последовательных изображений системы при перемагничивании за счет формирования АДС, её движения справа налево до седловой точки СТ1 и уничтожения на левом конце. При таком перемагничивании атомная цепочка переходит в метастабильное состояние ( $\min 2$ ), в котором магнитные моменты направлены «вниз». В случае перемагничивания путём образования доменной стенки процесс аналогичен, кроме несколько отличающейся седловой точки СТ2 (рис. 15). Как и в отсутствие внешнего магнитного поля, формирование ДС является энергетически менее выгодным, чем формирование АДС.

Вычислим частотные префакторы в рамках гармонического приближения ТПС. Зависимости энергетических барьеров и частотных префакторов от длины цепочки  $N$  для внешнего магнитного поля  $B_y = 1$  Тл показаны на рис. 16. Как и в случае отсутствия внешнего магнитного поля, наблюдается характерная особенность при длине цепочки, равной 24 атомам. Другой интересной особенностью зависимостей частотного префактора от длины

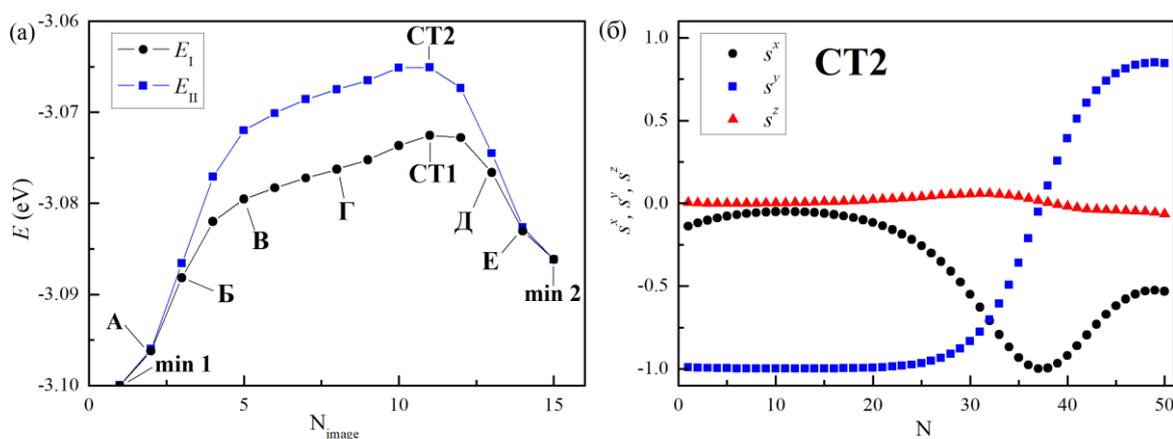


Рис.15. (а) Энергетическая диаграмма для двух способов перемагничивания цепочки из 50 атомов Со во внешнем поле  $B_y = 1$  Тл.  $E^I$  ( $E^{II}$ ) – энергия цепочки в процессе перемагничивания посредством формирования антидоменной (доменной) стенки. (б) Магнитная конфигурация атомной цепочки из 50 атомов Со в седловой точке СП2. (доменная стенка).

цепочки является локальный максимум при  $N = 17$ . Этот локальный максимум

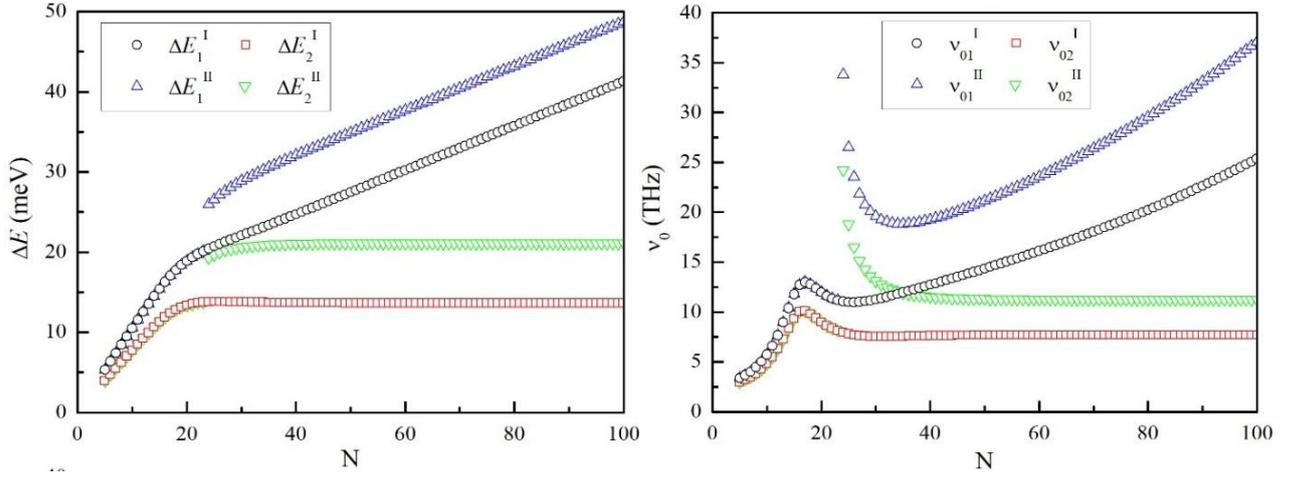


Рис.16. Зависимости энергетических барьеров  $\Delta E$  и частотных префакторов  $\nu_0$  для перемагничивания цепочки из атомов Co от длины цепочки  $N$ . Внешнее магнитное поле  $B_y = 1$  Тл.

связан с изменением механизма перемагничивания цепочки от одновременного переворота магнитных моментов к образованию АДС.

Изменение механизма перемагничивания при  $N = 17$  и  $N = 24$  сопровождается возрастанием частотного префактора, поскольку оно связано с перестройкой ландшафта энергетической поверхности вблизи седловой точки. Отметим также, что везде, за исключением окрестности этих двух особых точек, энергетические барьеры и частотные префакторы согласуются с хорошо известным эмпирическим правилом Мейера-Недделя [50, 51]: более высоким энергетическим барьерам соответствуют более высокие частотные префакторы. Кроме того, обнаружена немонотонная и достаточно сильная зависимость частотных префакторов как от длины цепочки, так и от величины внешнего магнитного поля.

Частоты перемагничивания для перехода из основного состояния в возбужденное можно вычислить по следующим формулам, аналогичным (38):

$$\nu_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = \nu_{01}^I \exp\left(-\frac{\Delta E_1^I}{kT}\right) + \nu_{01}^{II} \exp\left(-\frac{\Delta E_1^{II}}{kT}\right) \quad (41)$$

и обратно из возбужденного состояния в основное:

$$\nu_{\downarrow \rightarrow \uparrow} = \nu_{02}^I \exp\left(-\frac{\Delta E_2^I}{kT}\right) + \nu_{02}^{II} \exp\left(-\frac{\Delta E_2^{II}}{kT}\right) \quad (42)$$

где  $T$  – температура системы и  $k$  – постоянная Больцмана.

Для построения кривых намагничивания пренебрежем небольшими отклонениями векторов магнитных моментов крайних атомов от оси легкого намагничивания. Намагниченность атомной цепочки в безразмерных единицах  $M \equiv M_y \in [-1, 1]$  может быть найдена численно из уравнения [18,52]

$$\frac{dM(t)}{dt} = \mathfrak{A}(t)M(t) + \mathfrak{B}(t) \quad (43)$$

с начальным условием  $M(0) = 1$ , где  $\mathfrak{A} = -\nu_{\uparrow\rightarrow\downarrow} - \nu_{\downarrow\rightarrow\uparrow}$ ,  $\mathfrak{B} = \nu_{\downarrow\rightarrow\uparrow} - \nu_{\uparrow\rightarrow\downarrow}$ .

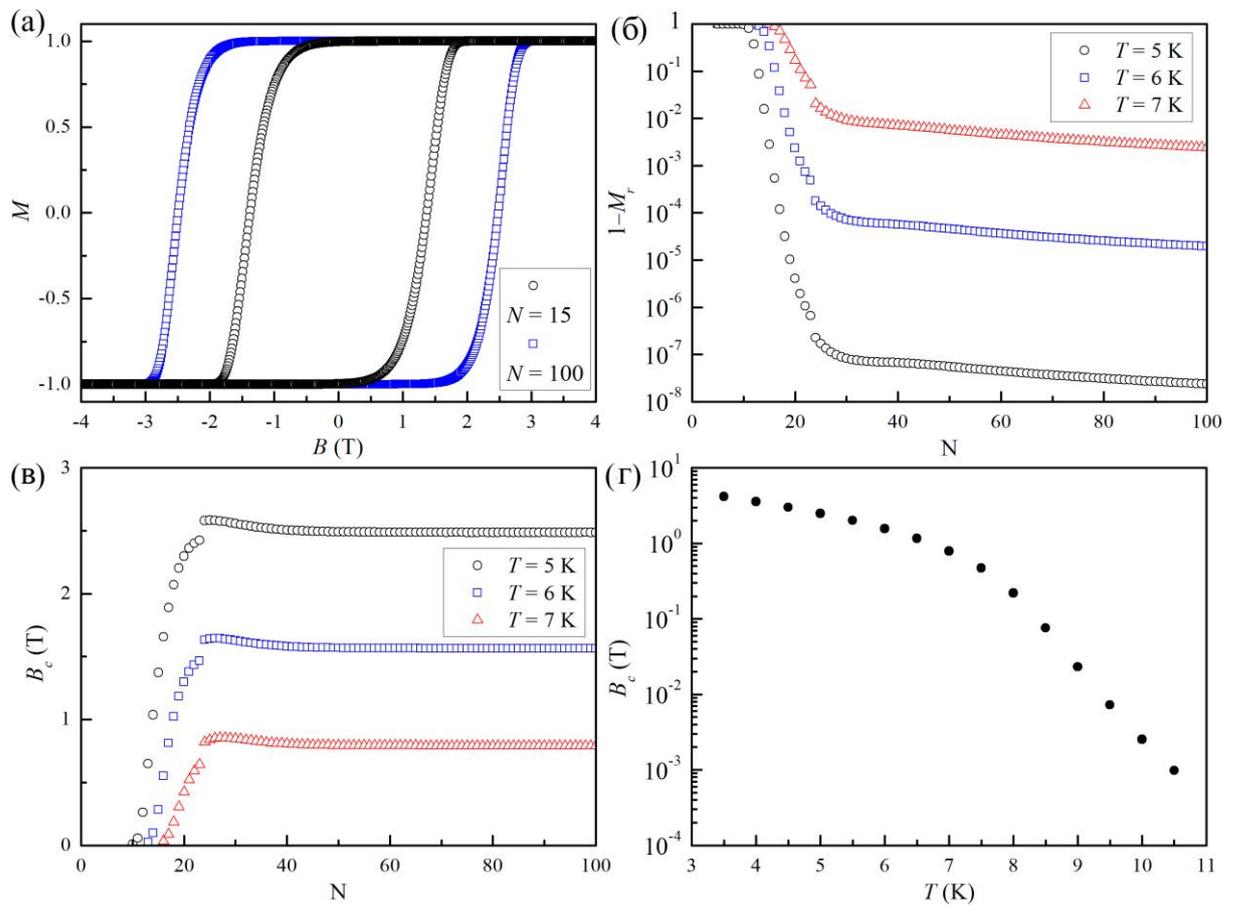


Рис.17. (а) Кривые намагничивания цепочек из 15 и 100 атомов Со при температуре 5 К. (б) Зависимость величины  $(1 - M_r)$  от длины  $N$  цепочки при температуре 5, 6 и 7 К, где  $M_r$  – остаточная намагниченность цепочки. (в) Зависимость коэрцитивной силы  $B_c$  от длины  $N$  цепочки при тех же температурах. (г) Зависимость коэрцитивной силы  $B_c$  цепочки из 100 атомов Со от температуры. Во всех случаях скорость изменения магнитного поля равна 130 Тл/с.

Рассмотрим линейный режим перемагничивания: магнитное поле  $B_y$  сначала убывает от  $B_0 = 5$  Тл до  $-B_0$  со скоростью  $\frac{dB_y}{dt} = -\gamma$ , а затем

возвращается к первоначальному значению. Скорость изменения магнитного поля постоянна и одинакова при уменьшении и увеличении поля. Следуя работе [14], выберем  $\gamma = 130 \frac{\text{Тл}}{\text{с}}$ .

На рис. 17а показаны кривые намагничивания цепочек из 15 и 100 атомов Со при температуре 5 К, полученные в результате численного решения уравнения (43). Коэрцитивная сила цепочки из 100 атомов равна 2.49 Тл. Коэрцитивная сила цепочки из 15 атомов почти в два раза меньше, она равна 1.38 Тл. На рис. 17б и 17в показаны зависимости остаточной намагниченности  $M_r$  и коэрцитивной силы  $B_c$  цепочки от ее длины при температурах 5, 6 и 7 К. Видно, что величины  $M_r$  и  $B_c$  выходят на константу при больших  $N$ , причем  $1 - M_r \sim N^{-1}$ . Зависимость коэрцитивной  $B_c$  силы цепочки из 100 атомов Со от температуры представлена на рис. 17г. Видно, что величина  $B_c$  экспоненциально падает с увеличением температуры, что согласуется с формулой (43).

### 3.2 Цепочки Fe на поверхности Pt(664)

Рассмотрим далее систему Fe/Pt(664). В отличие от системы Со/Pt(664), где ось легкого намагничивания направлена вдоль цепочки, в системе Fe/Pt(664) ось легкого намагничивания перпендикулярна цепочке. Согласно расчётам с помощью теории функционала плотности (ТФП) [11], ось тяжёлого намагничивания направлена вдоль цепочки по оси  $x$ , а угол  $\gamma$  равен  $3,51^\circ$ .

Аналогично системе Со/Pt(664) цепочки из Fe на Pt(664) имеют два вырожденных почти коллинеарных основных состояния. Из-за взаимодействия Дзялошинского-Мория магнитные моменты на концах подкручены в плоскости XY в направлении против часовой стрелки. Длинные цепочки перемагничиваются путём образования доменной стенки. В случае системы Со/Pt(664) стенка являлась неелевской, так как ось лёгкого намагничивания лежит в плоскости XY. Ось лёгкого намагничивания цепочки

Fe/Pt(664) направлена перпендикулярно плоскости XY, поэтому в отсутствие взаимодействия Дзялошинского-Мория доменная стенка являлась бы блоховской. Однако взаимодействие Дзялошинского-Мория приводит к повороту плоскости доменной стенки на угол  $\pi/2 - \beta$ , где  $|\beta| = 79,00 \pm 0,97^\circ$  — угол между плоскостью XY и плоскостью X'Y'. Вследствие этого доменная стенка занимает промежуточное положение между неелевской и блоховской стенками. На рис. 18 показаны магнитные конфигурации системы в основных состояниях (OC1, OC2) и двух неэквивалентных седловых точках (CT1, CT2). В состоянии CT1 ДС расположена ближе к правому концу цепочки и  $\beta > 0$ , а в состоянии CT2 АДС расположена ближе к левому концу и  $\beta < 0$ . Энергетические барьеры  $\Delta E_1 = E_{CT1} - E_{OC}$  и  $\Delta E_2 = E_{CT2} - E_{OC}$  для

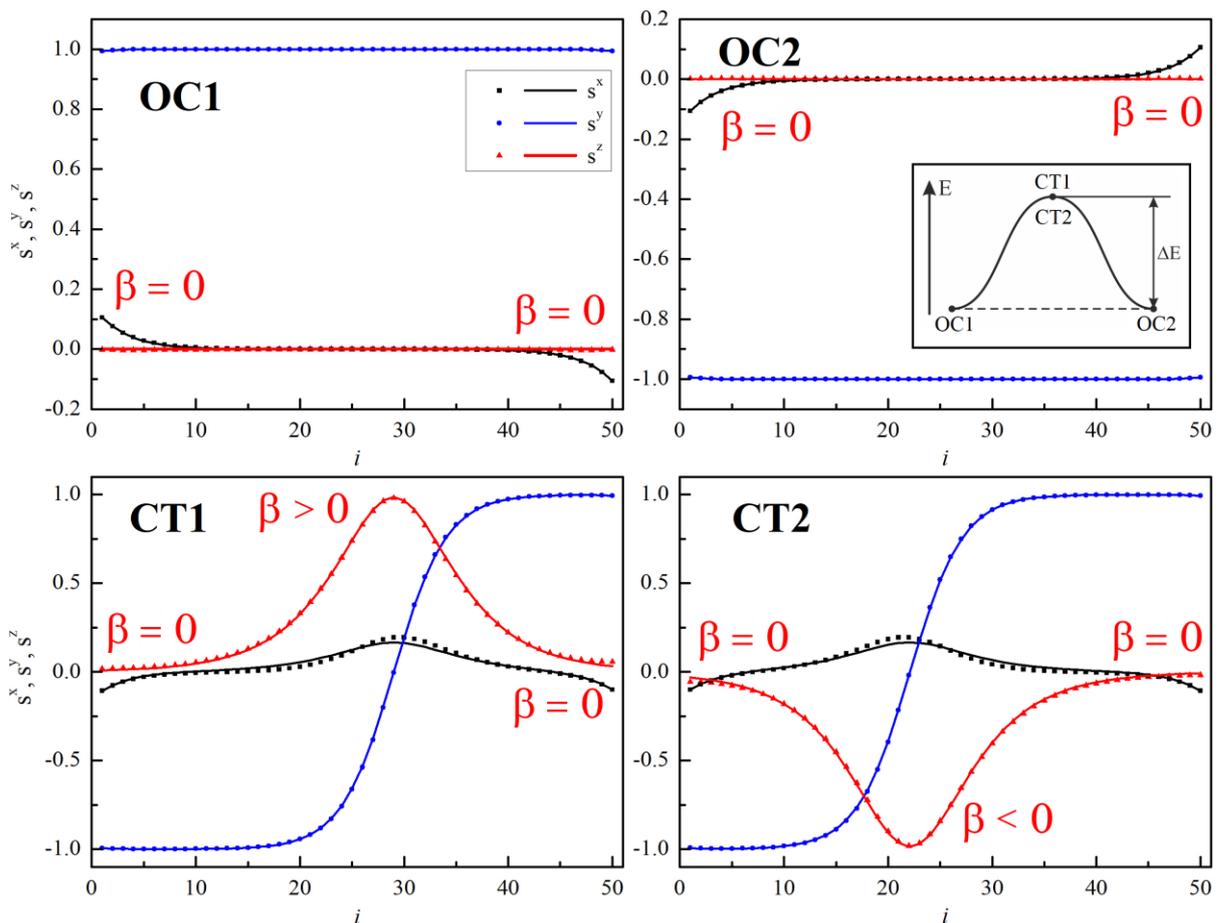


Рис 18. Основные состояния (OC1 и OC2) и седловые точки (CT1 и CT2) цепочки Fe/Pt(664), состоящей из  $N = 50$  атомов. Точки являются результатами расчетов ГМУЛ. Сплошные линии показывают теоретические приближения. На вставке представлена схематическая энергетическая диаграмма.

перемагничивания цепочки очень близки друг к другу:  $\Delta E_1 \approx \Delta E_2 = 16,96$  мэВ,  $\Delta E_1 - \Delta E_2 = 1,4 \cdot 10^{-5}$  мэВ для цепочки, состоящей из 50 атомов железа. Видно, что для системы Fe/Pt(664) энергии образования ДС и АДС почти не отличаются, поэтому этим отличием можно пренебречь.

Ширину доменной стенки можно оценить как

$$\Delta N = \sqrt{\frac{J}{2\tilde{K}}} = \sqrt{\frac{J}{2(K - |E|)} \left(1 + \frac{\pi^2 D_z^2}{16J|E|}\right)} \quad (44)$$

В отличие от цепочек Co/Pt(664) ширина доменной стенки для цепочек из железа зависит от параметра  $D_z$ . Условие  $t = \cos \beta \leq 1$  (см. главу 2.2) даёт следующие ограничения на параметры модели:

$$|E| \geq \frac{\pi^2 D_z^2}{64J} \left[ -1 + \sqrt{1 + \frac{128JK}{\pi^2 D_z^2}} \right], \quad (45)$$

$$D_z \leq \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2JE^2}{K - |E|}}. \quad (46)$$

Если использовать параметры, взятые из литературы [11], и неравенства (45) и  $E < K$ , то ограничения на параметр  $E$  будут следующими:

$$0,20 \text{ мэВ} \leq |E| < 1,73 \text{ мэВ}, \quad (47)$$

Неравенство (46) даёт ограничение на параметр  $D_z$

$$D_z \leq 6,68 \text{ мэВ}. \quad (48)$$

Рассмотрим влияние диполь-дипольного взаимодействия на энергетические барьеры для перемагничивания. Без учёта диполь-дипольного взаимодействия энергетические барьеры становятся немного больше  $\Delta E_1 =$

$\Delta E_2 = \Delta E = 17,01$  мэВ для цепочки из 50 атомов Fe. Эта малая разница (0,05 мэВ) существенна лишь при температурах ниже 0,5 К, но эти температуры не входят в диапазон нашего рассмотрения. Таким образом, диполь-дипольным взаимодействием можно пренебречь.

Используя формулы (47) и (20), можно оценить энергетический барьер  $\Delta E$  перемагничивания цепочки в случае длинных цепочек конечного размера ( $N \gg \Delta N$ ). Будем отсчитывать энергию от энергии коллинеарного состояния. Тогда энергия основного состояния (ОС1 или ОС2) равна  $2E_0$ . Согласно рис. 15 энергия седловой точки (СТ1 или СТ2) равна  $2E_0 + E_{ДС}$ . Энергетический барьер – это разница между этими двумя энергиями. Таким образом,  $\Delta E = E_{ДС}$ .

В случае коротких цепочек Fe ( $N \lesssim \Delta N$ ) все магнитные моменты коллинеарны и одновременно вращаются в плоскости YZ. Таким образом, энергетический барьер  $\Delta E$  можно оценить как

$$\Delta E_{short} = (K - E)N. \quad (49)$$

Следовательно, можно оценить энергетический барьер для различных длин цепочек

$$\Delta E = \begin{cases} \Delta E_{short}, & N < N_0, \\ E_{ДС}, & N \geq N_0. \end{cases} \quad (50)$$

Критическая длина цепочки  $N_0$  может быть найдена из условия  $\Delta E_{short} = E_{ДС}$ . Откуда значение критической длины  $N_0 = 4\Delta N$ .

В рамках непрерывной модели были построены аппроксимирующие функции, которые правильно описывают все особенности основных состояний и седловых точек. Для аппроксимации основного состояния (ОС1) длинных цепочек Fe/Pt(664) конечного размера могут быть использованы следующие функции

$$s_i^x = \sin \theta_i^{OC}, s_i^y = \cos \theta_i^{OC}, s_i^z = 0, \quad (51)$$

где

$$\theta_i^{OC} = f_1(i - i_0 - i_1) + f_1(i - i_0 + i_1) - \pi, \quad (52)$$

где параметр  $i_1 > 0$  подбирается под функцию,  $i_0 = \frac{N+1}{2}$ , и

$$f_1(x) = \arccos \left( \text{th} \left( \sqrt{\frac{2(K+E)}{J}} x \right) \right), \quad (53)$$

что очень схоже с функцией (11).

При рассмотрении основного состояния ОС2 в выражениях (51) необходимо сделать замены:  $s_i^x \rightarrow -s_i^x, s_i^y \rightarrow -s_i^y$ . На рис. 18 показаны функции (51) для цепочки Fe, состоящей из 50 атомов ( $i_1 = 33,2$ ). Аппроксимация седловых точек является более сложной задачей, поскольку магнитные моменты не лежат в одной плоскости. Мы аппроксимировали седловую точку (СТ1) следующими функциями

$$\begin{aligned} s_i^x &= (\sin \theta_{1i}^{CT} \cos \beta + \sin \theta_{2i}^{CT}) / s_i, \\ s_i^y &= \cos \frac{\theta_{1i}^{CT} + \theta_{2i}^{CT} + \pi}{s_i}, \\ s_i^z &= \sin \frac{\theta_{1i}^{CT} \sin \beta}{s_i}, \end{aligned} \quad (54)$$

где

$$s_i = \sqrt{(s_i^x)^2 + (s_i^y)^2 + (s_i^z)^2} \quad (55)$$

$$\theta_{1i}^{CT} = f_2(i - i_2), \quad (56)$$

$$\theta_{2i}^{CT} = f_1(i + i_3), \quad (57)$$

Для седловой точки СТ1  $i_2 = 29,0, i_3 = 7,7, i_4 = 58,7$ ; для седловой точки СТ2  $i_2 = 22,1, i_3 = 7,7, i_4 = 58,7$ .  $f_1$  определяется согласно выражению (49), а  $f_2, f_3$  следующим образом:

$$f_2(x) = \arccos \left( \operatorname{th} \left( \sqrt{\frac{2(K + E \cos(2\beta))}{J}} x \right) \right), \quad (58)$$

$$f_3(x) = \arccos \left( -\operatorname{th} \left( \sqrt{\frac{2(K + E)}{J}} x \right) \right), \quad (59)$$

На рис.18 видно хорошее согласие между результатами ГМУЛ и теоретическими результатами.

Сравним значения некоторых величин, полученных и аналитически, и с помощью ГМУЛ. Во-первых, сравним значения угла отклонения магнитных моментов на конце длинной цепочки. Оценка (55) дает значение  $\theta_0 = 0,123$ , что хорошо согласуется с результатом расчетов ГМУЛ, где  $\theta_0 = 0,106$  для цепочки из  $N = 50$  атомов. Во-вторых, сравним значения угла  $\beta$ . Выражение (13) дает значение  $\beta = 80,5^\circ$ , а по расчетам ГМУЛ  $\beta = 79,0$  (для  $N=50$ ). Видно, что результаты находятся в хорошем согласии. Теперь сравним энергетические барьеры. Выражение (14) дает значение  $\Delta E = 17,07$  мэВ, а расчет ГМУЛ – значение  $17,01$  мэВ ( $N = 50$ ). Видно, что для цепочки, состоящей из  $N = 50$  атомов, различие очень мало. Сравнение энергетических барьеров для цепочек различной длины от 5 до 100 атомов Fe представлено на рис. 19а. Точки — результаты ГМУЛ, а сплошные линии — результаты расчетов согласно уравнению (50). Численные и теоретические значения  $\Delta E$  хорошо согласуются как для коротких, так и для длинных цепочек Fe. Значительные отклонения имеются только в области критической длины  $N_0 = 20,32$ . Таким образом, формулу (50) можно использовать как для качественной оценки величины энергетического барьера  $\Delta E$ , так и для количественной оценки в большом диапазоне длин.

Обсудим, как изменения параметров  $D$ ,  $\alpha$  и  $E$  гамильтониана влияют на энергетические барьеры. Теоретическая оценка (50) зависит только от

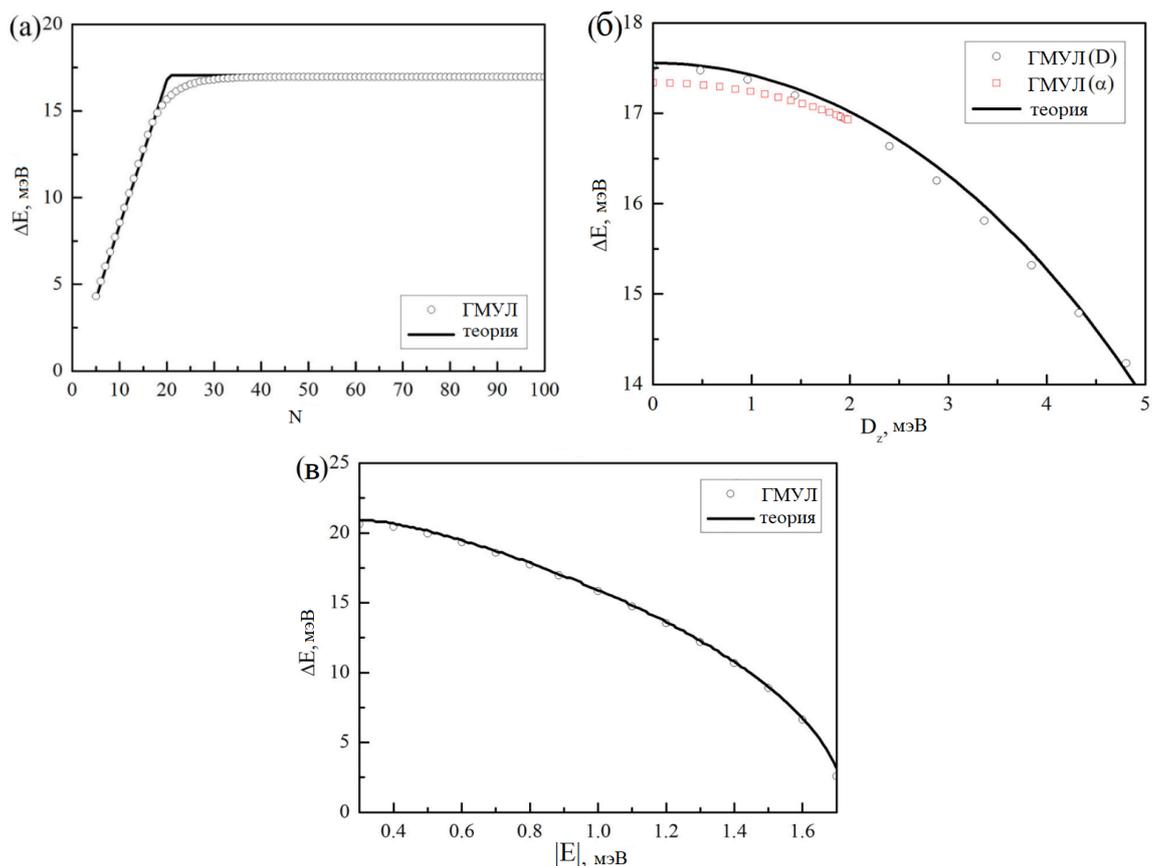


Рис. 19. Зависимости величины энергетического барьера  $\Delta E$  от а) длины цепочки  $N$ , б) от проекции вектора Дзялошинского  $D_z$  ( $N = 100$ ) и в) от параметра магнитной анизотропии  $E$  ( $N = 100$ ). Точки являются результатами расчетов ГМУЛ. Сплошные линии соответствуют теоретической оценке.

параметра  $D_z$ . Соответствующая зависимость представлена сплошной линией на рис.19(б). Для сравнения этих результатов с численными были проведены две серии расчетов для цепочки из 100 атомов Fe. В первом наборе параметр  $D$  варьировался при фиксированном угле  $\alpha = 74,03$  (черные точки на рис. 19б). А во втором наборе мы варьировали угол  $\alpha$  при фиксированном параметре  $D = 1,98$  мэВ (красные точки на рис. 19б). При этом изменения параметров лежали в пределах применимости модели (48). Видно, что во всех случаях теоретическая оценка (50) качественно согласуется с результатами ГМУЛ. Чем угол  $\alpha$  ближе к  $\pi/2$ , тем согласие результатов лучше. Мы также видим, что зависимость энергетического барьера  $\Delta E$  от параметра  $D_z$  не очень сильная. Энергетический барьер уменьшается с 17,56 до 13,83 мэВ при увеличении параметра  $D_z$  от 0 до 5 мэВ. Этот результат отличается от результата для

системы Co/Pt(664), где энергетические барьеры перемагничивания линейно зависят от параметра  $D_z$ . На рис. 16в представлена зависимость энергетического барьера перемагничивания от параметра  $|E|$ . Значение параметра  $|E|$  варьируется от 0,3 до 1,7 мэВ. Эти значения удовлетворяют неравенствам (45,47). С увеличением параметра  $|E|$  энергетический барьер  $\Delta E$  падает с 20,92 до 3,13 мэВ. Также видно, что теоретическая оценка (50) хорошо согласуется с численными результатами расчетов ГМУЛ при всех значениях параметра  $|E|$ .

### 3.3 Цепочки Mn на поверхности Pt(664)

Рассмотрим цепочки конечной длины из Mn на поверхности Pt(664).

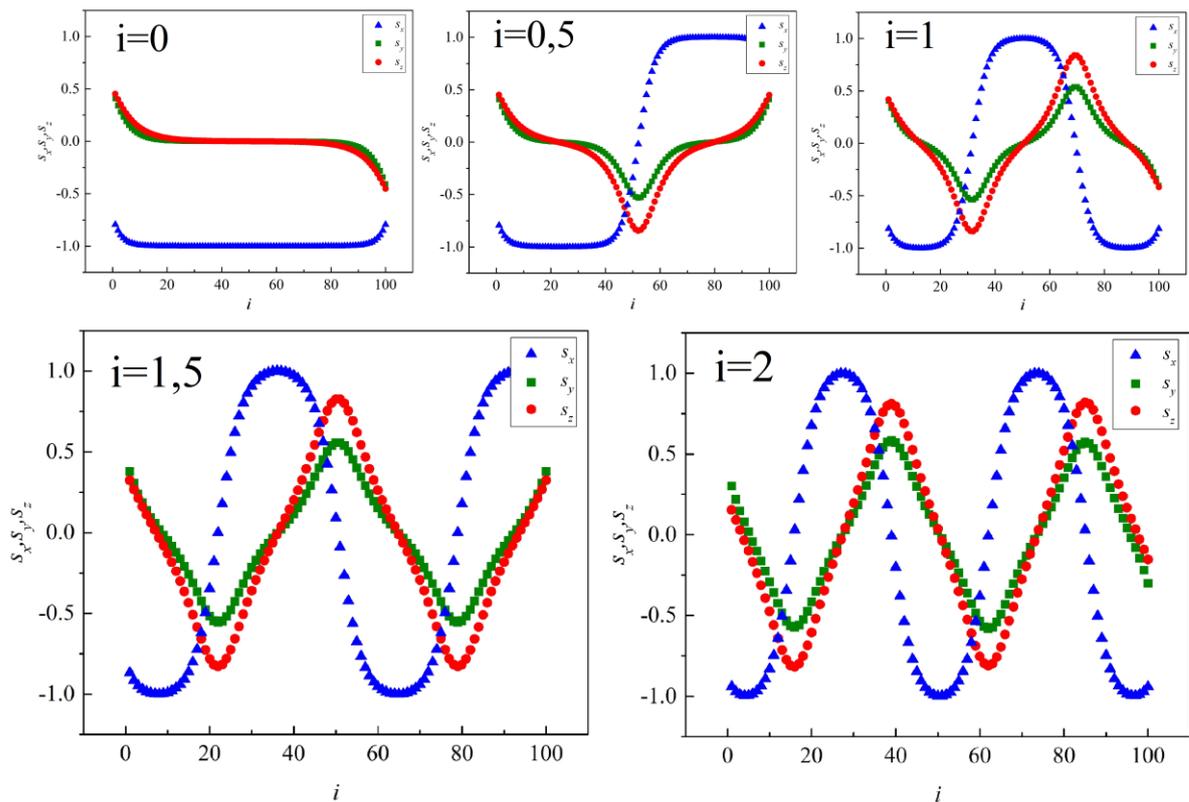


Рис. 20. Магнитные конфигурации цепочки из  $N = 100$  атомов в коллинеарном состоянии и в состояниях с магнитными моментами, закрученными на полпериода (основное состояние), 1, 1.5 и 2 периода.

Основным состоянием бесконечной цепочки является спиральное состояние с

периодом около 60 атомов [11]. Закручивание векторов магнитных моментов атомов цепочки обусловлено взаимодействием Дзялошинского-Мория. Обсудим, какие состояния являются основными в случае цепочек  $Mn$  конечной длины.

На рис. 20 представлены различные конфигурации цепочки из 100 атомов. Основным состоянием является состояние с магнитными моментами, закрученными на полпериода. Энергии конфигураций, представленных на рисунке, следующие:  $E_0 = -3,33753$  мэВ,  $E_{0,5} = -3,3377$  мэВ,  $E_1 = -3,33762$  мэВ,  $E_{1,5} = -3,33655$  мэВ,  $E_2 = -3,33382$  мэВ. Видно, что  $E_{0,5} < E_1 < E_0 < E_{1,5} < E_2$ , что также следует из рис.21.

При изучении цепочек  $Mn$  длиной от 5 до 200 атомов, были обнаружены характерные длины, при которых конфигурации с закрученными на целое число полупериодов векторами магнитных моментов становятся сначала метастабильными состояниями, а затем и основными (рис. 21). С помощью расчётов ГМУЛ были получены энергии цепочек в коллинеарном состоянии, а также в состояниях с закрученными векторами магнитных моментов всех атомов на полпериода, один, полтора и два периода. На рис. 21 представлены разности  $E_0 - E_i$  энергии коллинеарного состояния и энергий состояния цепочки, закрученной на  $i$  периодов ( $i=0.5, 1, 1.5, 2$ ). Наличие ненулевой разности означает появление метастабильного состояния с закрученной конфигурацией, а выход этой разности в положительную область указывает на то, что данное закрученное состояние выгоднее коллинеарного. Рассмотрим подробно цепочки разных длин. Цепочки длиной от 5 до 20 атомов имеют два основных вырожденных коллинеарных состояния. Закручивание магнитных моментов крайних атомов цепочки обусловлено взаимодействием Дзялошинского-Мория. Цепочки длиной от 21 атомов перемагничиваются путём образования доменной стенки, при этом состояние с магнитными моментами, закрученными на полпериода, является метастабильным. Цепочки длиной от 41 атомов имеют еще одно метастабильное состояние в закрученными на период магнитными моментами. Для цепочек длиной от 62

атомов появляется метастабильное состояние с закрученными на 1,5 периода магнитными моментами, а начиная с 95 атомов – состояние с магнитными моментами, закрученными на 2 периода. С увеличением длины цепочки меняется также её основное состояние. Так основным состоянием для цепочек в диапазоне длин от 62 до 107 атомов является состояние с закрученными на полпериода магнитными моментами, основным состоянием цепочек длиной от 108 до 152 атомов – состояние с закрученными на период магнитными моментами, основным состоянием цепочек длиной от 153 до 200 атомов – состояние с закрученными на полтора периода магнитными моментами. Полученные результаты согласуются со значением периода закручивания векторов магнитных моментов в бесконечно длинной цепочке атомов Mn, равным  $\approx 60$  атомов [11].

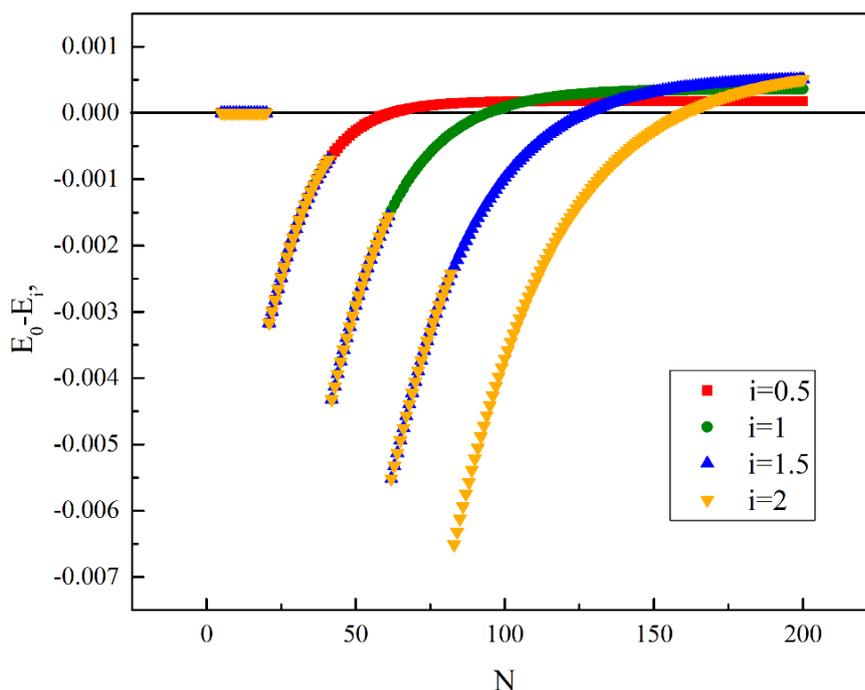


Рис. 21. Зависимости разностей энергии коллинеарного состояния и энергий состояния цепочки, закрученной на  $i$  полупериодов, от длины цепочки  $N$

## Выводы

- 1) Для систем Co и Fe на Pt(664) получено, что короткие цепочки перемагничиваются путём одновременного переворота всех магнитных моментов, а длинные – с образованием доменной или антидоменной стенки. Для цепочек Co стенка является неелевской, а для Fe занимает промежуточное положение между блоховской и неелевской.
- 2) Вследствие влияния взаимодействия Дзялошинского-Мория формирование доменной стенки для системы Co на Pt(664) энергетически менее выгодно, чем формирование антидоменной стенки. Кроме того, варьирование параметров гамильтониана показывает, что перемагничивание за счет образования доменной стенки может происходить только в определенной области параметров.
- 3) Взаимодействие Дзялошинского-Мория приводит к тому, что основные состояния систем Co/Pt(664) и Fe/Pt(664) являются неколлинеарными на концах, а основным состоянием цепочки из Mn для  $N > 61$  является спиральная конфигурация с периодом около 60 атомов.
- 4) Диполь-дипольным взаимодействием можно пренебречь в большом диапазоне температур (для системы Co/Pt(664) при температуре больше 10,9 К) и параметров гамильтониана.
- 5) Показано, что большинство полученных результатов могут быть удовлетворительно объяснены в рамках непрерывной модели. Магнитные конфигурации атомов цепочки вблизи локальных минимумов и седловых точек можно аппроксимировать простыми аналитическими функциями.
- 6) Используя совокупность данных, полученных методами ГМУЛ и ТПС, были построены кривые намагничивания цепочек из атомов Co, найдены остаточные намагниченности и коэрцитивные силы цепочек. Проанализированы зависимости коэрцитивной силы от длины цепочки, температуры и скорости изменения магнитного поля.

## Список литературы

- [1] I Zutic, J. Fabian, S. Das Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. V. **76**, 323. (2004).
- [2] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, S. Rusponi, P. Ohresser, W. Eberhardt, C. Carbone, K. Kern, Oscillatory Magnetic Anisotropy in One-Dimensional Atomic Wires, Phys. Rev. Lett. **93**, 077203 (2004).
- [3] S. Bose, Quantum Communication through an Unmodulated Spin Chain, Phys. Rev. Lett. V. **91**, 207901. (2003).
- [4] H. Verma, L. Chotorlishvili, J. Berakdar, S. K. Mishra, Qubit(s) transfer in helical spin chains, Eur. Phys. Lett. **119**, 30001 (2017).
- [5] D. J. Choi, N. Lorente, J. Wiebe, K. von Bergmann, A.F. Otte, A.J. Heinrich, Colloquium: Atomic spin chains on surfaces, Rev. Modern Phys., vol. **91**, 041001 (2019).
- [6] A.G. Syromyatnikov, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky, A.L. Klavsyuk, Formation and properties of metallic atomic chains and wires, Phys.-Uspekhi, vol. **64**, 671, (2021).
- [7] W. Kohn, Nobel lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals, Rev. Modern Phys., vol. **71**, 1253 (1999).
- [8] H. Ebert, D. Kodderitzsch, J. Minár, Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method—recent developments and applications, Rep. Prog. Phys., vol. **74**, 096501 (2011).
- [9] S. Lounis, P.H. Dederichs, S. Blugel, Magnetism of nanowires driven by novel even-odd effects, Phys. Rev. Lett. **101**, 107204 (2008).
- [10] S. Pick, P.A. Ignatiev, A.L. Klavsyuk, W. Hergert, V.S. Stepanyuk, P. Bruno, Structure and magnetic properties of Co chains on a stepped Cu surface, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 446001 (2007).

- [11] B. Schweflinghaus, B. Zimmermann, M. Heide, G. Bihlmayer, S. Blügel, Role of Dzyaloshinskii-Moriya interaction for magnetism in transition-metal chains at Pt step edges, *Phys. Rev. B*. **94**, 024403 (2016).
- [12] K.M. Tsysar, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky, Magnetization dynamics of mixed Co–Au chains on Cu(110) substrate: Combined ab initio and kinetic Monte Carlo study, *Chin. Phys. B* **24** 097302 (2015).
- [13] L.D. Landau, E. Lifshitz, On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies, *Phys. Z. Sowjet.*, vol. 8, 153 (1935).
- [14] Y. Li, B-G. Liu, Long-range ferromagnetism in one-dimensional monatomic spin chains, *Phys. Rev. B*, vol. **73**, 174418 (2006).
- [15] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Improved kinetic Monte Carlo models for computational and analytical investigations of the magnetic properties of finite-size atomic chains, *Europhysics Lett.*, vol. **137**, 56003 (2022).
- [16] S.V. Kolesnikov, Low-temperature study of the magnetic properties of finite atomic chains, *JETP Lett.* **103**, 588 (2016).
- [17] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, An estimate for the magnetization reversal time of antiferromagnetic chains within the Heisenberg model, *J. Exp. Theor. Phys.* **125**, 644 (2017).
- [18] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Magnetic properties of the finite-length biatomic chains in the framework of the single domain-wall approximation, *Phys. Rev. B* **100**, 224424 (2019).
- [19] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Magnetization reversal time for ferromagnetic and antiferromagnetic chains in the Heisenberg model, *IEEE Magn. Lett.* **10**, 2509105 (2019).
- [20] S. Kolesnikov, E. Saprónova, An estimation of magnetic properties of existing and prospective atomic chains in the framework of the Heisenberg model, *IEEE Magn. Lett.* **13**, 2501205 (2022).
- [21] I. Dzyaloshinsky, A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *J. Phys. Chem. Solids* 4(4), 241–255 (1958).

- [22] T. Moriya, New mechanism of anisotropic super exchange interaction. *Phys. Rev. Lett.* **4**, 228–230 (1960).
- [23] H.T. Nembach, J.M. Shaw, M. Weiler, E. Ju'è, T.J. Silva, Linear relation between Heisenberg exchange and interfacial Dzyaloshinskii–Moriya interaction in metal films. *Nat. Phys.* **11**, 825–829 (2015).
- [24] J. Cho, N.-H. Kim, S. Lee, J.-S. Kim, R. Lavrijsen, A. Solignac, Y. Yin, D.-S. Han, N.J.J. van Hoof, H.J.M. Swagten, B. Koopmans, C.-Y. You, Thickness dependence of the interfacial Dzyaloshinskii–Moriya interaction in inversion symmetry broken systems. *Nat. Commun.* **6**, 7635 (2015).
- [25] Y. Mokrousov, A. Thiess, S. Heinze, Structurally driven magnetic state transition of biatomic Fe chains on Ir(001). *Phys. Rev. B* **80**, 195420 (2009).
- [26] R. Mazzarello, E. Tosatti, Connection between magnetism and structure in Fe double chains on the Ir(100) surface. *Phys. Rev. B* **79**, 134402 (2009).
- [27] M. Menzel, Y. Mokrousov, R. Wieser, J.E. Bickel, E. Vedmedenko, S. Blügel, S. Heinze, K. von Bergmann, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, Information transfer by vector spin chirality in finite magnetic chains. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 197204 (2012).
- [28] M. Heide, G. Bihlmayer, S. Blügel, Dzyaloshinskii–Moriya interaction accounting for the orientation of magnetic domains in ultrathin films: Fe/W(110). *Phys. Rev. B* **78**, 140403 (2008).
- [29] L. Chotorlishvili, X.-G. Wang, A. Dyrdal, G.-H. Guo, V.K. Dugaev, J. Barnas, J. Berakdar, Rectification of the spin seebeck current in noncollinear antiferromagnets. *Phys. Rev. B* **106**, 014417 (2022).
- [30] M. Heide, G. Bihlmayer, S. Blügel, Non-planar Dzyaloshinskii spirals and magnetic domain walls in non-centrosymmetric systems with orthorhombic anisotropy. *J. Nanosci. Nanotechnol.* **11**, 3005–3015 (2011).
- [31] K.J.A. Franke, C. Ophus, A.K. Schmid, C.H. Marrows, Switching between magnetic Bloch and Neel domain walls with anisotropy modulations. *Phys. Rev. Lett.* **127**, 127203 (2021).

- [32] L. S´anchez-Tejerina, O. Alejos, E. Mart´inez, J.M. Mu˜noz, Asymmetric driven dynamics of Dzyaloshinskii domain walls in ultrathin ferromagnetic strips with perpendicular magnetic anisotropy. *J. Magn. Magn. Mater.* **409**, 155–162 (2016).
- [33] S. Rohart, A. Thiaville, Skyrmion confinement in ultrathin film nanostructures in the presence of Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *Phys. Rev. B* **88**, 184422 (2013).
- [34] S.V. Kolesnikov, E.S. Sapronova, I.N. Kolesnikova, An influence of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction on the magnetization reversal process of the finite-size Co chains on Pt(664) surface. *J. Magn. Magn. Mater.* **579**, 170869 (2023).
- [35] D.I. Bazhanov, O.V. Stepanyuk, O.V. Farberovich, V.S. Stepanyuk, Classical and quantum aspects of spin interaction in 3D chains on a Cu<sub>3</sub>N-Cu(110) molecular network, *Phys. Rev. B*, vol. **93**, 035444 (2016).
- [36] B. Dup´e, J.E. Bickel, Y. Mokrousov, F. Otte, K. von Bergmann, A. Kubetzka, S. Heinze, R. Wiesendanger, Giant magnetization canting due to symmetry breaking in zigzag Co chains on Ir(001), *New J. Phys.*, vol. **17**, 023014 (2015).
- [37] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, C. Carbone, Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains, *Nature* **416**, 301 (2002).
- [38] C.F. Hirjibehedin, C.P. Lutz, A.J. Heinrich, Spin coupling in engineered atomic structures, *Science*, vol. **312**, 1021 (2006).
- [39] E.M. Chudnovsky, L. Gunther, Quantum Tunneling of Magnetization in Small Ferromagnetic Particles, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988).
- [40] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, New York (1960).
- [41] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jónsson, Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation, *Comput. Phys. Comm.* **196**, 335 (2015).

- [42] И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М. Уздин, Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (миниобзор) Письма в ЖЭТФ, Т. **113**, 833 (2021).
- [43] P. Hanggi, P. Talkner, M. Borkovec, Reaction-rate theory: fifty years after Kramers, *Rev. Mod. Phys.* V. **62**, 251 (1990).
- [44] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Potential energy surface and rates of spin transitions, *Z. Phys. Chem.* V. **227**, 1543 (2013).
- [45] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Harmonic transition-state theory of thermal spin transitions, *Phys. Rev. B*, V. **85**, 184409 (2012).
- [46] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Size and shape dependence of thermal spin transitions in nanoislands, *Phys. Rev. Lett.*, V. **110**, 020604 (2013).
- [47] S. V. Kolesnikov, E. S. Sapronova, Influence of Dzyaloshinskii–Moriya and Dipole–Dipole Interactions on Spontaneous Magnetization Reversal Time of Finite-Length Co Chains on Pt(664) Surfaces, *IEEE Magn. Lett.* V. **13**, 2505905 (2022).
- [48] A.P. Popov, A. Rettori, M.G. Pini, Spectrum of noncollinear metastable configurations of a finite-size discrete planar spin chain with a collinear ferromagnetic ground state, *Phys. Rev. B* **92**, 024414 (2015).
- [49] J. van den Broek, H. Zijlstra, Calculation of intrinsic coercivity of magnetic domain walls in perfect crystals, *IEEE Trans. Magn.* **226** (1971).
- [50] G. Boisvert, L.J. Lewis, A. Yelon, Many-body nature of the Meyer-Neldel compensation law for diffusion, *Phys. Rev. Lett.* V. **75**, 469 (1995).
- [51] W. Meyer, H. Neldel, Relation between the energy constant and the quantity constant in the conductivity-temperature formula of oxide semiconductors, *Z. Tech. Phys.* V. **12**, 588 (1937).
- [52] С. В. Колесников, Исследование магнитных свойств атомных цепочек конечной длины при низких температурах, Письма в ЖЭТФ. **103**, 668-672 (2016).

## Список опубликованных работ

### Статьи

1. Kolesnikov S., Sapronova E., An Estimation of Magnetic Properties of Existing and Prospective Atomic Chains in the Framework of the Heisenberg Model, *IEEE Magnetics Letters*, том 13 (2022)
2. Колесников С.В., Сапронова Е.С., Влияние диполь-дипольного взаимодействия на время перемагничивания атомных цепочек конечной длины, *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, том 162, № 5, с. 708-717 (2022)
3. Kolesnikov S.V., Sapronova E.S., Kolesnikova I.N., An influence of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the magnetization reversal process of the finite-size Co chains on Pt(664) surface, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, том 579 (2023)
4. Kolesnikov S.V., Sapronova E.S., Influence of Dzyaloshinskii–Moriya and Dipole–Dipole Interactions on Spontaneous Magnetization Reversal Time of Finite-Length Co Chains on Pt(664) Surfaces, *IEEE Magnetics Letters*, том 13 (2022)
5. Kolesnikov S.V., Sapronova E.S., Kolesnikova I.N., Ground and excited states of the finite-size Fe chains on Pt(664) surface, *European Physical Journal B*, том 96, № 12 (2023)
6. Колесников С.В., Сапронова Е.С., Энергетические барьеры для перемагничивания атомных цепочек из Co на поверхности Pt(664) с учетом взаимодействия Дзялошинского–Мория, *Поверхность*, № 2, с. 26–43 (2024)
7. Колесников С. В., Сапронова Е. С., Салецкий А. М., Перемагничивание ферромагнитных атомных цепочек кобальта конечной длины, *Физика металлов и металловедение* (принята в печать)

## Тезисы конференций

1. Sapronova E.S., Kolesnikov S.V., An estimation of magnetic properties of existing and prospective atomic chains in the framework of the Heisenberg Model, *Book of Abstracts (The 4th International Baltic Conference on Magnetism)*, Svetlogorsk, Russia, с. 190 (2021)
2. Сапронова Е.С., Оценка времени перемагничивания атомных цепочек с учётом влияния диполь-дипольного взаимодействия, *Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2022»*, том 39, с. 495-496 (2022)
3. Сапронова Е.С., Влияние взаимодействия Дзялошинского-Мория на время перемагничивания атомных цепочек Со на поверхности Pt(664), *Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2023»*, с. 798-799 (2023)
4. Сапронова Е.С., Энергетические барьеры для перемагничивания атомных цепочек из Со на поверхности Pt(664) с учетом взаимодействия Дзялошинского-Мория, *ТЕЗИСЫ III Международной конференции «Физика конденсированных состояний» ФКС-2023, посвященной 60-летию ИФТТ РАН*, с. 166-166 (2023)
5. Сапронова Е.С., Перемагничивание атомных цепочек Со на поверхности Pt(664) с учётом зависимости частотных префакторов от длины цепочки, *Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2024»* (2024)