

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ПОТКИНА МАРИЯ НИКОЛАЕВНА

**УСТОЙЧИВОСТЬ ТОПОЛОГИЧЕСКИ
ЗАЩИЩЕННЫХ МАГНИТНЫХ
СТРУКТУР ДЛЯ УСТРОЙСТВ
КОМПЬЮТЕРНОЙ ПАМЯТИ**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор

Уздин В.М.

Санкт-Петербург – 2021

Оглавление

Введение	4
1 Времена жизни магнитных состояний нано и микросистем	12
1.1 Энергетические поверхности магнитных систем	14
1.2 Пути с минимальным перепадом энергии и активационные барьеры для магнитных переходов	30
1.3 Метод усеченного пути с минимальным перепадом энергии для поиска седловых точек первого порядка	35
1.4 Теория переходного состояния и частоты магнитных переходов .	39
2 Устойчивость магнитных скирмионов в устройствах магнитной памяти	52
2.1 Скирмион на треке.	53
2.2 Влияние структурных дефектов атомного масштаба на устойчивость магнитных скирмионов.	59
2.3 Внешнее магнитное поле как управляющий параметр для топологических магнитных структур.	68
3 Устойчивость и размер магнитных скирмионов	77
3.1 Фазовая диаграмма скирмионных состояний	78
3.2 Энергетические барьеры и предэкспоненциальный фактор	82

Заключение	95
Литература	99

Введение

Разработки новых систем магнитной памяти, передачи и обработки информации, искусственного интеллекта на основе магнитных материалов в значительной степени определяются прогрессом в изучении магнитных нано- и микроструктур [1, 2, 3]. При этом основными проблемами, которые необходимо решить для развития новых технологий являются уменьшение характерных размеров магнитных битов, увеличение скорости магнитной записи и передачи информации, энергоэффективности разрабатываемых устройств. Уменьшение размера отдельных магнитных элементов, в которых запоминается информация, до наномасштаба делает задачу анализа устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий ключевой не только для фундаментальной теории магнетизма, но и для практических приложений. В любом устройстве на основе магнитных материалов в процессе работы происходит перемагничивание и изменение магнитных состояний системы в целом или ее частей. Эти процессы зависят от пространственного размера системы. С одной стороны, уменьшение размеров магнитной структуры позволяет менять магнитное состояние, прикладывая меньшие воздействия. С другой – магнитное состояние становится менее устойчивым: взаимодействие с тепловым резервуаром может привести к его самопроизвольному изменению и потере информации, содержащейся в магнитной конфигурации. Поэтому время жизни магнитного состояния, определяемое тепловыми флуктуациями, должно значительно превосходить продолжительность процессов, в которых это состояние используется. В частности, для магнитной памяти, желательно, чтобы время жизни соответствующих магнитных состояний составляло десятки лет при комнатной температуре. При этом пространственный размер отдельного бита должен быть как можно меньше, составляя от одного до нескольких десятков нанометров. Создание магнитных носителей, в которых могут существовать

такие локализованные структуры, и аккуратная оценка их времен жизни при произвольных температурах – сложная задача, имеющая большой теоретический и практический интерес. Один из подходов к решению этой задачи заключается в использовании топологических магнитных текстур, представляющих собой магнитные состояния, сохраняющие определенные параметры, называемые топологическим зарядом, при непрерывном изменении намагниченности [4, 5, 6]. Неизменность топологического заряда должна приводить к устойчивости таких структур относительно произвольных непрерывных флуктуаций намагниченности. Однако в реальных магнитных системах, где магнитные моменты локализованы на узлах дискретной кристаллической решетки, о топологической защите можно говорить лишь в рамках приближенного описания, и возникает проблема количественного расчета времен жизни таких магнитных состояний. Теоретически, учесть тепловые флуктуации можно, решая стохастические уравнения движения для магнитных моментов, составляющих систему. Однако, оказывается, что характерная частота осцилляций отдельных магнитных моментов при температурах, представляющих практический интерес, более чем на 10 порядков выше, чем частота магнитных переходов состояния как целого. Оценка времен жизни состояний для таких «редких событий» на основе моделирования динамики и стандартных методов Монте-Карло не представляется возможным, но иерархия временных масштабов позволяет здесь использовать статистический подход, основанный на теории переходного состояния для магнитных степеней свободы [7]. Этот метод предполагает построение энергетической поверхности рассматриваемой системы как функции всех переменных, однозначно определяющих магнитную конфигурацию, поиск на ней локальных минимумов, отвечающих основному и метастабильным состояниям, и путей с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ) между ними, описывающих наиболее вероятные сценарии переходов. Максимальная энергия вдоль ПМПЭ определяет энергетические барьеры между состояниями, а форма энергетической поверхности вблизи минимумов и седловых точек первого порядка – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса для времен жизни состояний. Этот подход был использован для расчетов скоростей химических реакций [8], диффузии атомов на поверхности твердого тела при эпитаксиальном росте [9], оценке частот магнитных переходов в наноструктурах [10].

Хотя теория переходного состояния является в настоящее время общепризнанным теоретическим методом для оценки устойчивости топологических магнитных структур и расчета времен жизни магнитных состояний при произвольных температурах, существует целый ряд принципиальных вопросов, которые остаются открытыми, как с точки зрения разработки самого теоретического подхода, так и его применения к конкретным магнитным структурам. Именно на решение таких вопросов направлено исследование, выполненное в диссертационной работе.

Одна из важных проблем, возникающих при расчетах устойчивости магнитных систем в рамках теории переходного состояния, заключается в огромной размерности энергетической поверхности, на которой приходится искать ПМ-ПЭ. Большинство теоретических расчетов времен жизни магнитных скирмионов выполнено для двумерных систем Fe/Ir, для которых размер не превышает нескольких десятков нанометров. Однако, как показывает эксперимент, эти структуры устойчивы только при очень низких температурах, имеющих порядок 10 К. Скирмионы, стабильные при комнатных температурах, имеют существенно больший пространственный размер и для их исследования необходимо рассматривать структуры с миллионами степеней свободы. Разработка методов, позволяющих находить седловые точки первого порядка на поверхностях размерности миллион и выше, представляет собой сложную задачу, решение которой открывает новые грани в понимании природы топологической устойчивости магнитных систем. Разработка новых методов расчета и их компьютерная реализация позволили проводить расчеты систем, которые были недоступны для теоретического анализа ранее.

Другое направление исследований заключается в возможности управления размером, магнитными свойствами и устойчивостью топологических структур посредством изменения внешнего магнитного поля, а также за счет их взаимодействия с немагнитными дефектами и границами образца. Эти вопросы очень важны для практического использования локализованных топологических структур в устройствах трековой магнитной памяти, когда магнитные состояния перемещаются в пространстве по магнитным дорожкам без пространственного перемещения вещества относительно записывающих и считывающих устройств [11]. Магнитным полем можно менять размер скирмиона и время его

жизни, что позволяет получить нетривиальную зависимость тока от магнитного поля вследствие конкуренции между обычным эффектом Холла и топологическим эффектом Холла на скирмионах. Выбором оптимального магнитного поля можно подобрать параметры скирмиона таким образом, чтобы экспериментально можно было наблюдать квантовое туннелирование в ферромагнитную фазу при сверхнизких температурах, которое возможно отделить от надбарьерных переходов между теми же состояниями. Это позволяет на основе проведенных расчетов предложить параметры и предсказать результаты будущих экспериментов по туннелированию скирмионных состояний.

Целью диссертационной работы является разработка методов, алгоритмов и программ для количественной оценки устойчивости двумерных топологических магнитных структур относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий, а также расчеты времен жизни магнитных состояний таких систем при произвольных температурах с учетом влияния границ образца, немагнитных примесей, структурных дефектов, внешнего магнитного поля. Исследуемые структуры, в частности скирмионы в магнитных системах со взаимодействием Дзялошинского-Мории, являются одними из наиболее перспективных кандидатов для создания сверхплотной, быстрой и энергоэффективной магнитной памяти.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Разработанный новый метод усеченного пути с минимальным перепадом энергии позволяет искать седловые точки первого порядка на энергетических поверхностях размерности миллион и выше, что дает возможность рассчитывать энергию активации для рождения и коллапса топологических магнитных состояний микронного размера с атомным разрешением.

2. В результате расчетов в рамках теории переходного состояния для скирмионов, наблюдаемых экспериментально в системах Pd/Fe/Ir(111), найдено два механизма распада – внутри образца и путем ухода через его границу. Наиболее вероятный механизм распада зависит от ширины дорожки и величины внешнего магнитного поля.

3. Немагнитные структурные дефекты могут служить точками локализации скирмионных состояний. Теоретически показано, что энергетический барьер для зарождения и исчезновения скирмиона на структурном дефекте ниже,

чем в однородном состоянии. Найдены минимальные ширины дорожек и максимальные размеры немагнитных структурных дефектов, с которыми скирмионы могут быть использованы в качестве битов информации трековой магнитной памяти.

4. Показано, что размером квазидвумерных скирмионов, их устойчивостью и свойствами можно управлять, прикладывая внешнее магнитное поле перпендикулярно плоскости системы. Поле меняет времена жизни магнитных состояний, их радиус и концентрацию, что должно проявляться в экспериментах по наблюдению топологического эффекта Холла и процесса туннелирования скирмионов в ферромагнитное состояние.

5. В рамках теории переходного состояния показано, что устойчивость магнитных скирмионов может быть увеличена путем согласованного изменения констант

Дзялошинского-Мория и анизотропии при сохранении размера скирмиона постоянным. Предсказаны параметры систем, в которых времена жизни наномасштабных скирмионов могут достигать нескольких лет при комнатной температуре, что позволит использовать их в устройствах магнитной памяти.

Все полученные в работе результаты являются *новыми*. Разработанный метод поиска седловых точек на многомерных энергетических поверхностях впервые позволил находить энергетические барьеры, определяющие устойчивость магнитных систем с миллионами степеней свободы. Этот метод открывает новые возможности и для расчета устойчивости трехмерных топологических структур. Расчеты времен жизни магнитных скирмионов при произвольных температурах в условиях ограниченной геометрии, при наличии примесей и дефектов, всегда существующих в реальных образцах, соответствует уровню последних достижений в этой области. Устойчивость топологических магнитных систем – один из важнейших факторов, благодаря которому эти системы рассматриваются как основа новой технологии магнитной памяти. Поэтому последовательная теория, позволяющая проводить количественные оценки времен жизни топологических систем в зависимости от их параметров, внешних полей и температуры, является очень актуальной и активно развивается в настоящее время во всем мире.

Достоверность полученных в диссертации результатов определяется с од-

ной стороны тем, что в основе теоретического подхода лежат хорошо апробированные принципы статистической физики, с другой стороны сравнением с данными, полученными альтернативными методами и результатами прецизионных экспериментов. Например, предложенный в работе метод усеченного пути с минимальным перепадом энергии для поиска седловых точек на многомерной энергетической поверхности в каждом случае сопровождался расчетом нескольких наименьших собственных чисел гессиана энергии в полученной точке на основе стандартных алгоритмов. Тот факт, что градиент был равен нулю и одно и только одно из собственных чисел матрицы Гессе было отрицательно, доказывало, что разработанный алгоритм действительно дает седловую точку первого порядка на энергетической поверхности гигантской размерности. Полученные в результате расчетов магнитные конфигурации скирмионов в присутствии примесей и рассчитанные времена жизни магнитных состояний хорошо согласуются с экспериментальными данными, выполненными методами сканирующей туннельной микроскопии с разрешением по спину.

Все основные результаты диссертационного исследования были опубликованы в ведущих рецензируемых журналах, докладывались на научных семинарах СПбГУ, университета ИТМО, университета г. Майнц (Германия), Исландского университета, а также на ряде Российских и международных конференций.

Апробация работы

Результаты работы были представлены на следующих конференциях:

Международная конференция «Нанозифика и нанозлектроника», Нижний Новгород, 13-16 марта, 2017 г.; Международный симпозиум «11th international symposium on hysteresis modeling and micromagnetics (HMM 2017)», Барселона, Испания, 29-31 мая, 2017 г.; Международная конференция «Нанозифика и нанозлектроника», Нижний Новгород, 12-15 марта, 2018 г.; Международная конференция "Sol-SkyMag 2018", Сан-Себастьян, Испания, 18-22 июня, 2018 г.; Международная конференция «Нанозифика и нанозлектроника», Нижний Новгород, 10-13 марта, 2019 г.; Международный симпозиум «VII Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism"(EASTMAG-2019)», Екатеринбург, 8-13 сентября, 2019 г.; Международная конференция «Mathematical Challenge of Quantum Transport in Nanosystems, "Pierre Duclos Workshop"», Санкт-Петербург, Россия, 19-20 сентября, 2019 г.; «XX юбилейная всероссий-

ская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-20)», Екатеринбург, Россия, 19-26 ноября, 2019г.; Международная конференция «Mathematical Challenge of Quantum Transport in Nanosystems, "Pierre Duclos Workshop"», Санкт-Петербург, Россия, 14-16 сентября, 2020 г.

Список публикаций по теме диссертации

- [A1] Potkina, M.N. Truncated minimum energy path method for finding first order saddle points / I.S. Lobanov, M.N. Potkina, H. Jónsson, V.M. Uzdin // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2017. — Vol. 8, no. 5. — P. 586–595. **WOS, BAK**.
- [A2] Potkina, M.N. The effect of confinement and defects on the thermal stability of skyrmions / V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov et al. // *Physica B: Condensed Matter*. — 2018. — Vol. 549. — P. 6–9. **WOS, Scopus**.
- [A3] Potkina, M.N. Energy surface and lifetime of magnetic skyrmions / V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2018. — Vol. 459. — P. 236–240. **WOS, Scopus**.
- [A4] Potkina, M.N. Fine energy structure of a magnetic skyrmion localized on a nonmagnetic impurity in an external magnetic field / M. N. Potkina, I. S. Lobanov, V. M. Uzdin // *Physics of Complex Systems*. — 2020. — Vol. 1, no. 4. — P. 165–168.
- [A5] Potkina, M.N. Nonmagnetic impurities in skyrmion racetrack memory / M.N. Potkina, I.S. Lobanov, V.M. Uzdin // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2020. — Vol. 11, no. 6. — P. 628–635. **WOS, BAK**.
- [A6] Potkina, M.N. Topological Hall effect for electron scattering on nanoscale skyrmions in external magnetic field / K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, M. N. Potkina et al. // *Physical Review B*. — 2018. — Vol. 98, no. 21. — P. 214407. **WOS, Scopus**.
- [A7] Potkina, M.N. Magnetic skyrmion annihilation by quantum mechanical tunneling / S. M. Vlasov, P. F. Bessarab, I. S. Lobanov et al. // *New Journal of Physics*. — 2020. — Vol. 22, no. 8. — P. 083013. **WOS, Scopus**.

- [A8] Potkina, M.N. Toward room-temperature nanoscale skyrmions in ultrathin films /A. S. Varentcova, S. von Malottki, M. N. Potkina et al. // npj ComputationalMaterials. — 2020. — Vol. 6, no. 1. — P. 1–11. **WOS, Scopus.**
- [A9] Potkina, M.N. Interplay between size and stability of magnetic skyrmions / A.S. Varentsova, M.N. Potkina, S. von Malottki et al. // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. — 2018. — Vol. 9, no. 3. — P. 356–363. **WOS, ВАК.**

Российские и международные гранты, поддержавшие исследования выполненные в диссертации:

- «Времена жизни магнитных состояний нано и микроструктур», РФФИ, 18-02-00267.
- «Chiral ordering and stability of topological spin structures», фонд G-RISC. P-2018a-14.
- «Устойчивость и динамика топологических спиновых структур в ферромагнитных и антиферромагнитных материалах», РФФИ, 19-32-90048.
- «Исследование топологических магнитных текстур как основы для искусственных нейронных сетей», РНФ, 19-42-06302.
- «Энергоэффективное управление намагниченностью в наноструктурах», РНФ, 19-72-10138.
- «Природа топологической устойчивости киральных магнитных и жидкокристаллических систем», фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС», 19-1-1-12-2.

Глава 1

Времена жизни магнитных состояний нано и микросистем

Количественной характеристикой устойчивости магнитных состояний может служить их среднее время жизни, которое оказывается конечным вследствие тепловых флуктуаций, присутствующих в системе. Нас будут интересовать температуры значительно более низкие, чем температура фазового перехода в магнитной системе. Основное состояние, как правило, будет пространственно-однородным, а локализованные неколлинеарные структуры, возникающие на фоне основного состояния, - метастабильными. Если разделяющий их энергетический барьер велик по сравнению с энергией тепловых флуктуаций, пропорциональной $k_B T$, метастабильные состояния могут быть долгоживущими. При оценке их времен жизни в зависимости от температуры, важно учитывать и энтропию, соответствующую метастабильным состояниям, которая дает вклад в свободную энергию системы. Когда времена существования магнитных состояний на десятки порядков больше периода осцилляций отдельных магнитных моментов, составляющих систему, стохастическое моделирование динамики для определения времен жизни магнитных состояний оказывается невозможным. Однако, здесь работает статистический подход, предполагающий, что в системе, в процессе перехода между состояниями, в каждый момент реализуется квазиравновесное распределение Больцмана. Система переходит из начального равновесного состояния в переходное состояние, соответствующее максимуму энергии вдоль ПМПЭ, и после этого "скатывается" в другой локальный минимум энергии. Если энергия в минимуме и седловой точке аппроксимируется квадратичной функцией по всем переменным, от которых

зависит магнитная конфигурация, для времени жизни состояния можно получить аналитическое выражение. Именно этот метод, называемый теорией переходного состояния для магнитных степеней свободы [7, 12], используется и развивается в настоящей главе.

В первом разделе представлена теоретическая модель гейзенберговского типа, используемая в дальнейшем. Обсуждаются различные вклады в энергию магнитной системы, соотношение между параметрами в дискретном и непрерывном вариантах модели. В первом случае магнитная конфигурация задается направлением магнитных моментов на каждом узле решетки и размерность энергетической поверхности, таким образом, будет вдвое больше, чем число узлов. Во втором - намагниченность задается в каждой точке магнитного образца. Если весь объем магнетика разбить на малые области с однородной намагниченностью, каждую из которых рассматривать как отдельный магнитный момент, а взаимодействие между ними записать в рамках метода конечных разностей, то непрерывная модель эффективно сводится к дискретной. Вследствие большой размерности энергетической поверхности, которая в расчетах иногда превосходит 10^6 , ее невозможно изобразить на рисунке. Однако, если использовать анзац (подстановку) всего с двумя параметрами, которые определяют направления всех магнитных моментов, поверхность становится двумерной и ее можно представить наглядно. В этом же разделе показана энергетическая поверхность в непрерывной модели с анзацем, используемым Ф. Бюттнером и др.[13], на которой видна возможность формирования скирмионов двух разных размеров, стабилизированных взаимодействием Дзялошинского-Мория (ДМ) и магнитным дипольным взаимодействием, соответственно.

Во втором разделе главы изложены методы поиска оптимальных путей – ПМПЭ, - соединяющих локально устойчивые магнитные конфигурации. Максимум вдоль ПМПЭ определяет энергию переходного состояния и энергетический барьер, который необходимо преодолеть во время перехода. Рассматриваются геодезический метод подталкивания упругой лентой (ГМПУЛ) [7], метод струн [14, 15] и метод следования минимальной моде, который может использоваться в случае, когда известно только начальное состояние системы [16, 17]. В третьем разделе предложен новый метод усеченного пути с минимальным перепадом энергии, который позволяет искать седловые точки на энергетических

поверхностях размерности миллион и выше без поиска всего ПМПЭ. Это дает возможность рассматривать свойства микромагнитных систем с атомным разрешением. В четвертом разделе выведены формулы для времени жизни магнитных систем в гармоническом приближении для зависимости энергии от всех параметров, задающих магнитную конфигурацию в минимумах и седловой точке на энергетической поверхности. Эти формулы в дальнейшем используются для оценки времен жизни топологически защищенных магнитных скирмионов.

1.1 Энергетические поверхности магнитных систем

Под энергетической поверхностью будем понимать функционал энергии магнитной системы от набора переменных, однозначно задающих магнитную конфигурацию, вообще говоря, неравновесную. В магнитных системах, рассматриваемых далее, время продольной релаксации, ответственной за установление длины магнитных моментов, на несколько порядков меньше времени поперечной релаксации, связанной с упорядочением их направлений. Поэтому мы будем считать, что рассматриваемый временной масштаб таков, что величины магнитных моментов принимают равновесное значение, соответствующее минимуму энергии при заданном направлении моментов. Если система описывается в рамках метода функционала плотности или на основе гамильтониана для коллективизированных электронов, как, например, в неколлинеарной модели Александера-Андерсона [18], такой подход предполагает самосогласованный расчет величин магнитных моментов в процессе их переориентации. Если используется модель гейзенберговского типа с локализованными магнитными моментами, величины моментов предполагаются заданными. Иногда их значения и параметры взаимодействия определяются на основе расчетов из первых принципов [19, 20]. Направление каждого магнитного момента можно задать двумя углами: полярным θ и азимутальным φ . Если система включает магнитные моменты на плоскости в узлах квадратной решетки размером 1000×1000 , то размерность энергетической поверхности составит $2 \cdot 10^6$. Однако в случае, когда значения углов можно параметризовать всего несколькими переменными, размерность поверхности уменьшится и если таких параметров оставить только два, энергетическую поверхность можно представить наглядно, как двумерную

поверхность в 3-мерном пространстве [21]. Отметим также, что вблизи полюса при $\theta = 0$ угол φ не определен и точность расчетов при приближении к полюсу падает. Чтобы обойти эту трудность, можно использовать стереографическую проекцию [22] или выбрать в качестве координат ортогональные матрицы [23]. Ниже будут использоваться декартовы координаты в касательном пространстве к многообразию, определяемому заданием величины магнитных моментов. При этом для корректного задания матрицы Гессе необходимо ввести множители Лагранжа [24].

Рассмотрим теперь различные вклады в энергию в рамках обобщенной модели Гейзенберга, часто используемой при описании топологических магнитных структур. Энергетическая поверхность определяется выражением

$$E = E_{ex} + E_{DM} + E_K + E_{Ze} + E_{DD} \quad (1.1)$$

Здесь через E_{ex} и E_{DM} обозначены вклады изотропного и антисимметричного обменного взаимодействия, соответственно, E_K – энергия магнитной анизотропии, E_{Ze} – энергия взаимодействия со внешним магнитным полем и E_{DD} – энергия магнитного диполь-дипольного взаимодействия. Остановимся на каждом вкладе в (1.1) более подробно.

Изотропный обмен E_{ex}

В дискретной модели, когда магнитные моменты предполагаются локализованными на узлах кристаллической решетки

$$E_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.2)$$

где \mathbf{S}_i – единичный вектор, направленный вдоль магнитного момента на узле i . Параметр обменного взаимодействия $J_{i,j}$ убывает с расстоянием между магнитными моментами и далее будет считаться отличным от нуля только между ближайшими соседями. Однако, в ряде работ, в которых для описания топологических магнитных структур обменные интегралы выбираются на основе расчетов методом функционала плотности, параметры $J_{i,j}$ учитываются вплоть до 8 - 9 ближайших соседей [25, 26]. При этом знак обменного параметра меняется с расстоянием и утверждается, что учет конкуренции обменных взаимодействий существенно влияет на оценку устойчивости магнитного состояния [27].

В моделях с непрерывным распределением намагниченности \mathbf{m} вклад изотропного обменного взаимодействия в плотность энергии записывается в виде

$$\mathcal{A}(r)|\nabla\mathbf{m}|^2,$$

где

$$|\nabla\mathbf{m}|^2 = \sum_{i,j=x,y,z} \left(\frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial j} \right)^2.$$

Рассмотрим, например, магнитные моменты на квадратной или треугольной решетке и будем отсчитывать обменную энергию от энергии в ферромагнитном состоянии. Тогда, в случае малых отклонений направлений магнитных моментов на соседних узлах можно записать

$$E_{ex} = \frac{J}{2} \sum_{i,j} (1 - \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) \approx \frac{J}{4} \sum_{i,j} \varphi_{i,j}^2,$$

где $\varphi_{i,j} \approx |\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j|$ - угол между единичными векторами \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j , показанный на рисунке 1.1.

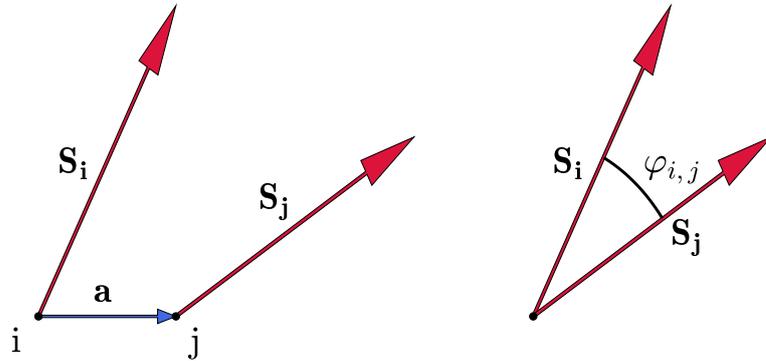


Рис. 1.1: Определение угла $\varphi_{i,j}$.

Обозначив

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{m}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{S}_j = \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a}),$$

получаем:

$$E_{ex} = \frac{J}{4} \sum_{i,\mathbf{a}} (\mathbf{m}(\mathbf{r}) - \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a}))^2, \quad (1.3)$$

где суммирование по \mathbf{a} происходит по всем векторам, соединяющим i -ый атом с его ближайшими соседями (рис. 1.2). Разложим $\mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ в ряд до первого порядка:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) &= \mathbf{m}(\mathbf{r}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{m}(\mathbf{r}) = \\ &= \mathbf{m}(\mathbf{r}) + \left(a_x \frac{\partial m_x}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) \mathbf{e}_x + \left(a_x \frac{\partial m_y}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_y}{\partial y} \right) \mathbf{e}_y + \left(a_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_z}{\partial y} \right) \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (1.4)$$

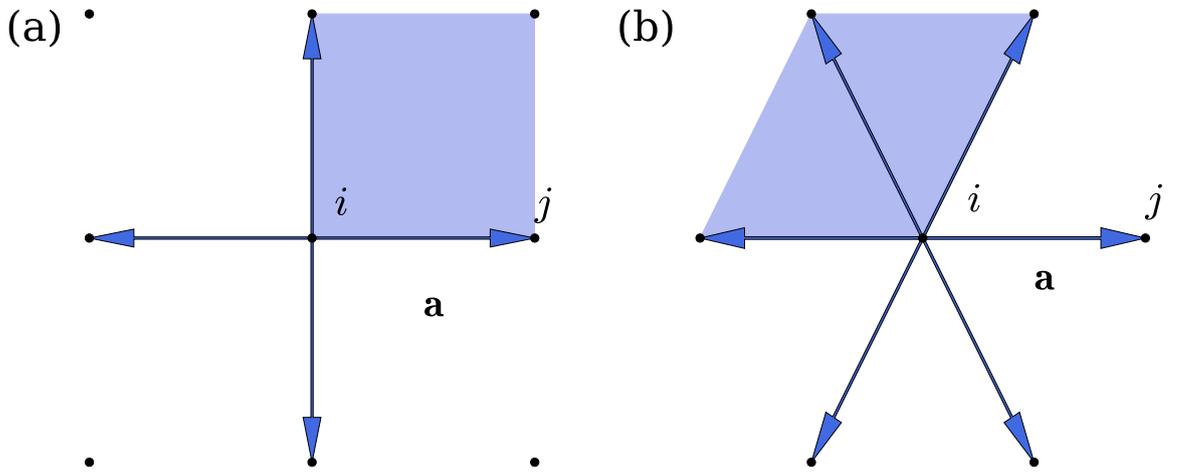


Рис. 1.2: (а) Квадратная решетка, (б) треугольная решетка. Стрелками показаны вектора \mathbf{a} , соединяющие узел i с его ближайшими соседями. Закрашенная область соответствует элементарной ячейке.

$$\begin{aligned} (\mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) - \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 &\approx a_x^2 \left(\frac{\partial m_x}{\partial x} \right)^2 + a_y^2 \left(\frac{\partial m_x}{\partial y} \right)^2 + 2a_x a_y \frac{\partial m_x}{\partial x} \frac{\partial m_x}{\partial y} + \\ &+ a_x^2 \left(\frac{\partial m_y}{\partial x} \right)^2 + a_y^2 \left(\frac{\partial m_y}{\partial y} \right)^2 + 2a_x a_y \frac{\partial m_y}{\partial x} \frac{\partial m_y}{\partial y} + \\ &+ a_x^2 \left(\frac{\partial m_z}{\partial x} \right)^2 + a_y^2 \left(\frac{\partial m_z}{\partial y} \right)^2 + 2a_x a_y \frac{\partial m_z}{\partial x} \frac{\partial m_z}{\partial y} \end{aligned}$$

Перекрестные члены, содержащие $a_x a_y$, сократятся при суммировании после подстановки в (1.3).

Для квадратной и треугольной решеток, рассматриваемых здесь, сумма по ближайшим соседям $\sum a_x^2 = \sum a_y^2$. Обозначим ее через L , тогда

$$E_{ex} = \frac{L}{4} J \sum_i [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2]. \quad (1.5)$$

Здесь

$$\nabla m_\alpha = \frac{\partial m_\alpha}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial m_\alpha}{\partial y} \mathbf{e}_y$$

$$(\nabla m_\alpha)^2 = \left(\frac{\partial m_\alpha}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_\alpha}{\partial y} \right)^2$$

Домножим и разделим правую часть уравнения (1.5) на объем элементарной ячейки V_c :

$$E_{ex} = \frac{L}{4V_c} J \sum_i V_c [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2]$$

При $V_c \rightarrow 0$ сумма в правой части стремится к интегралу. Имеем:

$$E_{ex} = \frac{L}{4V_c} J \int [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] dV$$

В модели с непрерывной намагниченностью

$$E_{ex} = \mathcal{A} \int |\nabla \mathbf{m}|^2 dV$$

Отсюда получаем соответствие между параметрами микромагнитной и дискретной модели:

$$\mathcal{A} = \frac{L}{4V_c} J \quad (1.6)$$

Для квадратной решетки: $L = 2a^2$, $V_c = a^2d$ и $\mathcal{A} = \frac{J}{2d}$, для треугольной: $L = 3a^2$, $V_c = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2d$ и $\mathcal{A} = \frac{\sqrt{3}}{2d}J$.

Антисимметричный обмен или взаимодействие Дзялошинского-Мория E_{DM}

Скирмионы и другие топологические структуры могут стабилизироваться уже при наличии конкурирующих обменных взаимодействий без учета спин-орбитального взаимодействия [28]. Однако, многие из топологических состоя-

ний являются хиральными, т.е. не совмещаются в пространстве со своим зеркальным отражением [29]. Существование этих магнитных структур объясняется наличием антисимметричного обмена – взаимодействия Дзялошинского-Мория (ДМ), возникающего в системах без центра инверсии [30, 31].

На дискретной решетке энергия взаимодействия ДМ задается формулой

$$E_{DM} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{D}_{i,j} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j],$$

где $\mathbf{D}_{i,j}$ - вектор ДМ.

Пусть. $\mathbf{D}_{i,j} = D\mathbf{d}_{i,j}$, где $\mathbf{d}_{i,j}$ - единичный вектор вдоль вектора ДМ, D - константа ДМ. Тогда энергия примет вид:

$$E_{DM} = -\frac{D}{2} \sum_{i,j} \mathbf{d}_{i,j} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] \quad (1.7)$$

Поскольку при ферромагнитном (ФМ) упорядочении магнитные моменты параллельны, энергия взаимодействия ДМ равна нулю, и можно сказать, что (1.7) задает энергию взаимодействия ДМ относительно ФМ состояния.

Направление вектора $\mathbf{d}_{i,j}$ зависит от типа нарушения инверсной симметрии [31]. В объемном образце, например в соединениях кубических магнетиков MnSi с кристаллической структурой B20 без центра инверсии вектор ДМ направлен вдоль вектора, соединяющего узлы решетки [32]:

$$\mathbf{d}_{i,j} = \frac{a_x}{a} \mathbf{e}_x + \frac{a_y}{a} \mathbf{e}_y$$

Найдем связь между вкладом от взаимодействия ДМ в дискретной модели и модели с непрерывным распределением намагниченности. Как и в случае гейзенберговского обмена, обозначим

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{m}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{S}_j = \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$

$$E_{DM} = -\frac{D}{2} \sum_{i,\mathbf{a}} \mathbf{d}_{i,j} [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})] \quad (1.8)$$

Подставим разложение $\mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ (1.4) в смешанное произведение:

$$\mathbf{d}_{i,j}[\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})] =$$

$$\begin{vmatrix} \frac{a_x}{a} & \frac{a_y}{a} & 0 \\ m_x & M_y & M_z \\ m_x + a_x \frac{\partial m_x}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_x}{\partial y} & m_y + a_x \frac{\partial m_y}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_y}{\partial y} & m_z + a_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_z}{\partial y} \end{vmatrix}$$

После суммирования в (1.8) сократятся все слагаемые, кроме:

$$\frac{a_x^2}{a} \left(m_y \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_y}{\partial x} \right) + \frac{a_y^2}{a} \left(-m_x \frac{\partial m_z}{\partial y} + m_z \frac{\partial m_x}{\partial y} \right)$$

Таким образом,

$$E_{DM} = -\frac{D}{2} \sum_{i,\mathbf{a}} \left[\frac{a_x^2}{a} \left(m_y \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_y}{\partial x} \right) + \frac{a_y^2}{a} \left(-m_x \frac{\partial m_z}{\partial y} + m_z \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) \right]$$

Домножим и разделим правую часть этого уравнения на V_c :

$$E_{DM} = \frac{DL}{2V_c a} \sum_i V_c \left[m_x \frac{\partial m_z}{\partial y} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_x}{\partial y} \right]$$

При $V_c \rightarrow 0$ сумма в правой части стремится к интегралу. Имеем

$$E_{DM} = \frac{DL}{2V_c a} \int \left[m_x \frac{\partial m_z}{\partial y} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_x}{\partial y} \right] dV \quad (1.9)$$

Обозначения совпадают с введенными при описании вклада гейзенберговского обмена.

В модели с непрерывной намагниченностью

$$E_{DM} = \mathcal{D} \int \left[m_x \frac{\partial m_z}{\partial y} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_x}{\partial y} \right] dV \quad (1.10)$$

Тогда соответствие констант ДМ микромагнитной и дискретной модели имеет вид:

$$\mathcal{D} = \frac{DL}{2V_c a} \quad (1.11)$$

Плотность энергии объемного ДМ может быть записана следующим образом [33]:

$$w = \mathcal{D} \mathbf{m} \cdot \nabla \times \mathbf{m} = \mathcal{D} \begin{vmatrix} m_x & m_y & m_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ m_x & m_y & m_z \end{vmatrix}$$

Антисимметричное обменное взаимодействие в объемных образцах приводит к формированию топологических киральных структур с доменными стенками блоховского типа, в которых магнитный момент поворачивается в направлении, ортогональном нормали к стенке. Иная ситуация реализуется, если нарушение симметрии инверсии обусловлено наличием поверхности или интерфейса. В этом случае вектор ДМ направлен перпендикулярно линии, соединяющей взаимодействующие атомы [34] и формируются неелевские доменные стенки с вращением магнитного момента в плоскости, перпендикулярной стенке.

В этом случае

$$\mathbf{d}_{i,j} = \frac{a_y}{a} \mathbf{e}_x - \frac{a_x}{a} \mathbf{e}_y$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{d}_{i,j} [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \mathbf{a})] = \\ & = \begin{vmatrix} \frac{a_y}{a} & -\frac{a_x}{a} & 0 \\ m_x & m_y & m_z \\ m_x + a_x \frac{\partial m_x}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_x}{\partial y} & m_y + a_x \frac{\partial m_y}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_y}{\partial y} & m_z + a_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + a_y \frac{\partial m_z}{\partial y} \end{vmatrix} \end{aligned}$$

После суммирования в (1.8) сократятся все слагаемые кроме содержащих:

$$\frac{a_y^2}{a} \left(m_y \frac{\partial m_z}{\partial y} - m_z \frac{\partial m_y}{\partial y} \right) \text{ и } \frac{a_x^2}{a} \left(m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_z \frac{\partial m_x}{\partial x} \right)$$

Аналогично случаю с объемным взаимодействием ДМ получаем:

$$E_{DM} = \frac{DL}{2V_c a} \int \left(m_z \frac{\partial m_x}{\partial x} - m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial y} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial y} \right) dV$$

$$\mathcal{D} = \frac{DL}{2V_c a},$$

Таким образом, связь параметров \mathcal{D} и D одинакова для интерфейсного и объемного взаимодействия ДМ. В итоге получаем соотношение параметров для квадратной решетки: $\mathcal{D} = \frac{D}{ad}$, для треугольной: $\mathcal{D} = \frac{\sqrt{3}}{ad}D$.

Плотность энергии ДМ в случае интерфейсного взаимодействия ДМ имеет вид [35]:

$$w = \mathcal{D} \left(m_z \frac{\partial m_x}{\partial x} - m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial y} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial y} \right) \quad (1.12)$$

Иногда используется еще два эквивалентных выражения для плотности энергии взаимодействия ДМ, обусловленного наличием интерфейса:

$$1. \quad w = -\mathcal{D} \mathbf{m} [[z \times \nabla] \times \mathbf{m}] \quad \text{согласно [28]}$$

$$[z \times \nabla] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = -\mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial x}$$

$$[[z \times \nabla] \times \mathbf{m}] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ M_x & M_y & M_z \end{vmatrix} = \mathbf{e}_x \frac{\partial m_z}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial m_z}{\partial y} - \mathbf{e}_z \frac{\partial m_y}{\partial y} - \mathbf{e}_z \frac{\partial m_x}{\partial x}$$

$$-\mathbf{m} [[z \times \nabla] \times \mathbf{m}] = -m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial y} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial y} + m_z \frac{\partial m_x}{\partial x},$$

что приводит к выражению (1.12).

$$2. \quad w = \mathcal{D}(m_z \nabla \cdot \mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \nabla)m_z) \quad \text{согласно [36]}$$

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$$m_z \nabla \cdot \mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \nabla)m_z = m_z \left(\frac{\partial m_x}{\partial x} + \frac{\partial m_y}{\partial y} + \frac{\partial m_z}{\partial z} \right) - m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial y} - m_z \frac{\partial m_z}{\partial z} =$$

$$= m_z \frac{\partial m_x}{\partial x} + m_z \frac{\partial m_y}{\partial y} - m_x \frac{\partial m_z}{\partial x} - m_y \frac{\partial m_z}{\partial y},$$

что также приводит к выражению (1.12).

В некоторых случаях рассматриваются модели, включающие два различных вектора ДМ, в тонкой магнитной пленке на поверхности металла для описания хиральных магнитных состояний в ней [37]. В тетрагональных сплавах Гейслера Mn-Pt-Sn экспериментально было обнаружено анизотропное взаимодействие ДМ, приводящее к формированию антискирмионной решетки [38].

Общая форма плотности энергии взаимодействия Дзялошинского-Мория может быть записана, как линейная комбинация инвариантов Лифшица $\mathcal{L}_{ij}^k = m_i \partial_k m_j - m_j \partial_k m_i$, $i, j, k \in \{x, y, z\}$, $i > j$. Мы рассматриваем случай $\partial_z m_i = 0$.

$$\mathcal{L}_i = \mathcal{L}_{zx}^x + \mathcal{L}_{zy}^y, \quad \mathcal{L}_b = \mathcal{L}_{zy}^x + \mathcal{L}_{zx}^y, \quad w_{i,b} = D\mathcal{L}_{i,b}.$$

Энергия анизотропии E_K

На дискретной решетке вклады, связанные с магнитной анизотропией записываются в виде

$$E_K = - \sum_i K (\mathbf{e} \cdot \mathbf{S}_i)^2 \quad (1.13)$$

где \mathbf{e} – единичный вектор вдоль оси анизотропии, K – константа анизотропии. Если $K < 0$, в системе реализуется анизотропия «легкая плоскость», при $K > 0$ – «легкая ось». Хотя в обоих случаях могут существовать скирмионные топологические состояния [29, 39], в дальнейшем будет рассматриваться только случай квазидвумерных магнитных систем с анизотропией типа «легкая ось» с $\mathbf{e} = \mathbf{e}_z$. В этом случае энергия анизотропии задается формулой:

$$E_K = -K \sum_i S_{i,z}^2$$

Если энергия анизотропии отсчитывается от энергии в ферромагнитном состоянии с магнитными моментами, упорядоченными вдоль оси z , то:

$$E_K = K \sum_i (1 - S_{i,z}^2) \quad (1.14)$$

Перейдем к непрерывному описанию намагниченности:

$$\mathbf{m}(r) = \mathbf{S}_i$$

Домножим и разделим правую часть уравнения (1.14) на V_c :

$$E_K = \frac{K}{V_c} \sum_i V_c (1 - m_z(r)^2)$$

При $V_c \rightarrow 0$ сумма в правой части стремится к интегралу:

$$E_K = \frac{K}{V_c} \int (1 - m_z^2) dV$$

В модели с непрерывной намагниченностью

$$E_K = \mathcal{K} \int (1 - m_z^2) dV$$

Отсюда получаем соответствие параметров анизотропии в микромагнитной и дискретной модели:

$$\mathcal{K} = \frac{K}{V_c} \quad (1.15)$$

Для квадратной решетки: $\mathcal{K} = \frac{K}{a^2d}$, для треугольной: $\mathcal{K} = \frac{2K}{\sqrt{3}a^2d}$.

Зеемановская энергия взаимодействия со внешним полем E_{Ze}

Рассмотрим случай, когда магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости системы, вдоль намагниченности на бесконечности, сонаправленной с осью z . Зеемановская энергия взаимодействия со внешним полем величиной B , отсчитываемая от однородного ферромагнитного состояния для дискретной модели представляется в следующем виде

$$E_{Ze} = \mu B \sum_i (1 - S_{i,z}), \quad (1.16)$$

где μ - величина магнитных моментов, которая предполагается одинаковой на всех узлах решетки.

Перейдем к непрерывному описанию намагниченности:

$$\mathbf{m}(r) = \mathbf{S}_i$$

Домножим и разделим правую часть уравнения (1.16) на V_c :

$$E_{Ze} = \frac{\mu B}{V_c} \sum_i V_c (1 - m_z(r))$$

При $V_c \rightarrow 0$, сумма в правой части стремится к интегралу:

$$E_{Ze} = \frac{\mu B}{V_c} \int (1 - m_z(r)) dV$$

В непрерывной микромагнитной модели

$$E_{Ze} = M_s B \int (1 - m_z(r)) dV,$$

где интегрирование идет по объему образца.

Отсюда получаем связь между магнитным моментом на узле и намагниченностью насыщения M_s :

$$M_s = \frac{\mu}{V_c} \quad (1.17)$$

Для квадратной решетки: $M_s = \frac{\mu}{a^2 d}$, для треугольной: $M_s = \frac{2\mu}{\sqrt{3} a^2 d}$.

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие E_{DD}

Энергия диполь-дипольного взаимодействия в дискретной модели имеет вид:

$$E_{DD} = \frac{\mu_0 \mu_S^2}{4\pi} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{i,j})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{i,j})}{r_{i,j}^5} \right]. \quad (1.18)$$

Здесь μ_0 -магнитная постоянная, вектор $\mathbf{r}_{i,j}$ направлен от i -го к j -му узлу, суммирование проводится по всем парам спинов. Это взаимодействие дальнего действия, в отличие от всех рассмотренных выше и его расчет для микромагнитных систем представляет значительные трудности. В большинстве случаев ниже мы будем рассматривать скирмионы небольшого радиуса в квазидвумерных системах. В этом случае можно считать, что дипольное взаимодействие учитывается в эффективной анизотропии [40].

В общем случае энергетическая поверхность, задаваемая (1.1), представляет собой многообразие большой размерности, которая для реальных топологических систем, рассматриваемых на атомном масштабе, может составлять

миллион и более. Для наглядного представления энергетической поверхности и понимания возможных сценариев магнитных переходов полезным является построение двумерной энергетической поверхности в предположении, что направления всех магнитных моментов можно задать, используя всего два параметра. Такой подход применялся в работе [21], где процесс перемагничивания спиновой пружины моделировался движением доменной стенки в магнитомягком магнетике, а параметрами, задающими магнитную конфигурацию, служили положение и ширина доменной стенки. Для топологических магнитных структур, таких как скирмионы, существуют аналитические выражения, описывающие профиль скирмиона и его магнитную конфигурацию, полученные на основе сравнения с данными эксперимента [41, 42, 13]. Эти соотношения, содержащие всего несколько параметров, достаточно хорошо воспроизводят локально устойчивые скирмионные состояния. Будем считать, что и в неравновесном состоянии, при магнитных трансформациях магнитная конфигурация по-прежнему задается тем же набором параметров, и только их значения меняются в процессе перехода. Тогда размерность энергетической поверхности будет равна числу таких параметров. Рассмотрим модельную магнитную конфигурацию, использованную в работе [13] в рамках модели с непрерывно распределенной намагниченностью. Она задается тремя переменными: величиной R_0 , определяющей размер скирмиона, шириной его доменной стенки Δ и углом ψ , который составляют магнитные моменты на границе скирмиона с радиальным направлением. Для направлений магнитных моментов мы будем использовать сферические координаты. Поскольку скирмионы обладают осевой симметрией и предполагается постоянство профиля скирмиона вдоль оси z , удобно использовать цилиндрические координаты. Для описания скирмиона достаточно задать радиальный профиль, форма которого зависит от перечисленных выше параметров. Он задается выражением:

$$\Theta = \Theta_{DW}(r - R_0, \Delta) + \Theta_{DW}(r + R_0, \Delta) - (q + 1)\pi/2 \quad (1.19)$$

$$\Theta_{DW}(r, \Delta) = \arctan \left(\exp \left(\frac{r}{\Delta} \right) \right)$$

где q - топологический заряд скирмиона.

В цилиндрических координатах энергетические вклады в (1.1) будут иметь вид:

$$\begin{aligned}
E_{ex} &= 2\pi\mathcal{A}d \int_0^\infty \left[\left(\frac{d\Theta}{dr} \right)^2 + \frac{\sin^2 \Theta}{r^2} \right] r dr, \\
E_{DM} &= 2\pi\mathcal{D}d \int_0^\infty \left[\frac{d\Theta}{dr} + \frac{\sin 2\Theta}{2r} \right] r dr, \\
E_K &= 2\pi\mathcal{K}d \int_0^\infty \sin^2 \Theta r dr, \\
E_{Ze} &= 2\pi M_s B d \int_0^\infty (1 - \cos \Theta) r dr,
\end{aligned} \tag{1.20}$$

Вычисления, касающиеся оценки диполь-дипольного взаимодействия, приведены в [13]. Здесь d - толщина образца. Удобно использовать безразмерные переменные $t = d/\Delta$, $\rho_0 = R_0/\Delta$ и ввести параметр $\rho = R/\Delta$, определяемый из условия $m_z(R)=0$. Далее радиусом скирмиона мы будем называть R .

Связь между ρ и ρ_0 дается соотношением:

$$\rho = \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\exp(2\rho_0) + 1}{2 \exp \rho_0} \right)$$

После подстановки выражения для профиля скирмиона (1.19) в формулы для вкладов в энергию (1.20) были сделаны оценки содержащихся в них интегралов [13]. Приведем окончательный ответ:

$$E = E_{ex} + E_K + E_{DM} + E_{Ze} + E_{DD} \tag{1.21}$$

где

$$E_{ex} = 2\pi\mathcal{A}dI_A, \quad I_A = 2\rho + \frac{2}{\rho} + 1.93(\rho - 0.65) \exp(-1.48(\rho - 0.65))$$

$$E_K = 2\pi\mathcal{K}d\Delta^2 I_k, \quad I_k = 2\rho - \frac{1}{3} \exp(-\rho/\sqrt{2})$$

$$E_{DM} = -2\pi d\Delta(\mathcal{D}_i \cos(\psi) - \mathcal{D}_b \sin(\psi))I_D, \quad I_D = \pi\rho + \frac{1}{2} \exp(-\rho)$$

$$E_{Ze} = -2\pi M_s B d \Delta^2 I_z, \quad I_z = \rho^2 + \frac{\pi^2}{12} - 0.41 \exp(-\rho^2)$$

$$E_{DD} = E_{d,v} + E_{d,s}$$

$$E_{d,v} = 4\pi\mu_0 M_s^2 \Delta R d \cos^2 \psi I_{v,a},$$

$$I_{v,a} = I_{v,a}(\infty) \frac{\ln(2)}{\pi} f_v(ta)$$

$$I_{v,a}(\infty) = \frac{1}{2}(1 - 0.27 \exp(-1.164\rho))$$

$$f_v(t) = \frac{2\pi t}{((2\pi)^n + (2t \ln(2))^n)^{1/n}} - \frac{t^2 10^{-0.02k^2 + 1.3k - 2.45}}{(2t \log(2) + 3\pi)^k}$$

$$n = \frac{1}{6} \rho^{2/3} \exp(-0.31\rho) + 1$$

$$k = \frac{2.7 + \frac{14}{\rho - 0.8}}{\exp(25 - 10\rho) + 1} + \frac{10}{\exp(10\rho - 25) + 1}$$

$$a = \frac{\partial_t I_{v,a}(0)}{2 \ln(2) I_{v,a}(\infty)}$$

$$\partial_t I_{v,a}(0) = \frac{4.45(\rho - 0.283)}{\rho(\rho + 0.93)^2} + \ln(2)$$

$$E_{d,s} = -2\pi\mu_0 M_s^2 d \Delta^2 I_s$$

$$I_s = I_z h(R/d) - \frac{1}{2} I_k \sigma(t) - \frac{0.29 - 0.4 \exp(-2\rho)}{\cosh^2\left(\frac{4}{9} \ln\left(\frac{d}{1.65R}\right)\right)}$$

$$h(x) = \frac{8x}{3\pi} \left[\frac{(1 - k(x)^2)K(k) + (2k^2 - 1)E(k)}{k^3} - 1 \right]$$

$$k(x) = \frac{2x}{\sqrt{1 + 4x^2}}$$

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 x}} dx$$

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 x} dx$$

$$\sigma(t) = \frac{t + 2t \ln(\pi) - 2t \ln(t) + 4\pi \ln(\Gamma(t/\pi)) + 2\pi - 4\pi^2 t^{-1} \psi^{(-2)}(t/\pi)}{2\pi}$$

$$\psi^{(-2)}(z) = \int_0^z \ln \Gamma(t) dt$$

Мы исследуем многослойную систему, в которой магнитные слои чередуются с немагнитными. Суммарная толщина магнитных слоёв была выбрана равной $d_m = 31.6 \text{ nm}$, а полная толщина образца $d = 4d_m$. Параметры магнитных слоев соответствуют системе, исследованной в ([13], рис.2 d), но с измененными параметрами ДМ и магнитного поля: $\mathcal{A}_m = 10 \text{ pJ / m}$, $\mathcal{D}_{i,m} = 2.6 \text{ mJ / m}^2$, $\mathcal{K}_m = 1.72 \text{ pJ / m}$, $B = 0.27 \text{ T}$, $M_{s,m} = 1.4 \text{ MA / m}$. В расчетах используется подход эффективной среды – многослойная система рассматривается эффективно как однослойная пленка, и параметры системы усредняются следующим образом [43]: $\mathcal{A} = \mathcal{A}_m \frac{d_m}{d}$, $\mathcal{D}_i = \mathcal{D}_{i,m} \frac{d_m}{d}$, $M_s = M_{s,m} \frac{d_m}{d}$, $\mathcal{K} = \mathcal{K}_m \frac{d_m}{d}$. Поверхностный дипольный вклад $E_{d,s}$ дает добавку в константу анизотропии $\mathcal{K}_a = -\frac{\mu_0 M_s^2}{2} \left(\frac{d_m}{d} - \frac{d_m^2}{d^2} \right)$, а также дополнительное слагаемое в энергию $\mu_0 \frac{M_s^2}{2} \left(\frac{d_m}{d} - \frac{d_m^2}{d^2} \right)$ [43].

Энергетическая поверхность в зависимости от R и Δ показана на рисунке 1.3. Угол ψ фиксирован и равен 0. Видно, что в рассматриваемом диапазоне параметров существует два локально устойчивых скирмионных состояния. Первое соответствует скирмиону - с радиусом около 4 nm, который стабилизируется за счет взаимодействия ДМ. Второе - скирмион большего радиуса ($R \approx 33 \text{ nm}$). За его устойчивость отвечает в основном дипольное взаимодействие. Оба состояния могут существовать в системе одновременно, переходя из одного в другое под действием тепловых флуктуаций. На этом же рисунке показан ПМПЭ между состояниями, соответствующими скирмионам разного размера. Различные методы, используемые для поиска ПМПЭ на многомерных энергетических поверхностях магнитных систем, рассматриваются в следующем разделе.

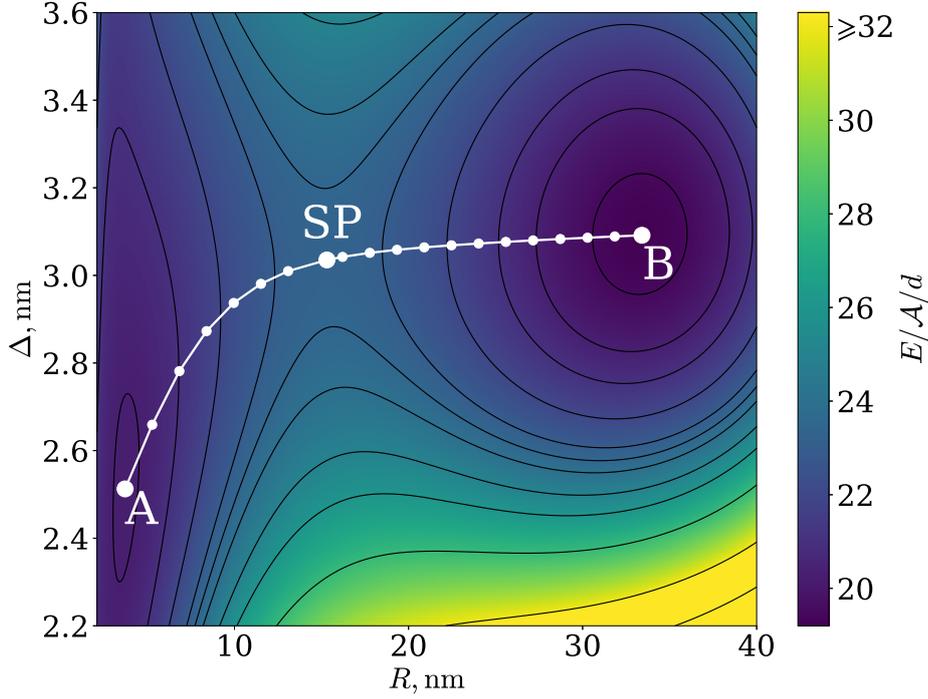


Рис. 1.3: Энергетическая поверхность для системы с энергией, задаваемой по формулам (1.21). Белая кривая с кружками, соответствующими образам системы, показывает ПМПЭ между скирмионными состояниями разных размеров.

1.2 Пути с минимальным перепадом энергии и активационные барьеры для магнитных переходов

Общие подходы для поиска ПМПЭ на энергетической поверхности между локально устойчивыми состояниями рассмотрим, используя в качестве модельной системы тонкую магнитную пленку со взаимодействиями (1.1). Будем описывать энергию системы магнитных моментов, локализованных в узлах дискретной кристаллической решетки, обобщенной моделью Гейзенберга, ограничившись короткодействующими взаимодействиями:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]) - \sum_i (\mu \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B} + K S_{i,z}^2). \quad (1.22)$$

Здесь \mathbf{S}_i - трехмерный вектор единичной длины направленный вдоль маг-

нитного момента на узле i . Параметр гейзенберговского обмена J и вектора Дзялошинского-Мория \mathbf{D}_{ij} будем считать отличными от нуля только для моментов на соседних узлах. Ось анизотропии \mathbf{e}_z и магнитное поле \mathbf{V} перпендикулярны плоскости системы. Константы анизотропии $K > 0$ и величины магнитных моментов μ одинаковы на всех узлах решетки.

Поиск локальных минимумов на энергетической поверхности, соответствующих основному и метастабильным состояниям, может быть проведен стандартными методами, например с использованием метода сопряженных градиентов [23] или метода Ньютона и его производных. Более сложной является задача поиска седловых точек первого порядка, отвечающих минимуму по всем направлениям кроме одного и максимуму вдоль оставшегося направления, но именно эти точки определяют энергетические барьеры между локально устойчивыми состояниями. Седловые точки можно найти как максимум вдоль ПМ-ПЭ, который соединяет локально устойчивые магнитные состояния. Если эти состояния заранее известны, можно использовать следующие вычислительные методы:

1. *Геодезический метод подталкивания упругой лентой (ГМПУЛ)* [44].

Путь аппроксимируется дискретным набором образов состояний системы, p_0, \dots, p_N , которым сопоставляются точки на энергетической поверхности, p_0 и p_N соответствуют начальному и конечному локально устойчивым состояниям. Расстояние вдоль пути называют координатой реакции. За начальное приближение пути часто берется геодезическая между p_0 и p_N . В каждой точке пути p_n определяется касательный вектор τ^n с помощью следующей процедуры [45]. На участках возрастания и убывания энергии вдоль пути задается вектор $\hat{\tau}^n$:

$$\hat{\tau}^n = \begin{cases} \tau_+^n, & E(p_{n+1}) > E(p_n) > E(p_{n-1}), \\ \tau_-^n, & E(p_{n+1}) < E(p_n) < E(p_{n-1}), \end{cases}$$

где $\tau_+^n = p_{n+1} - p_n$ и $\tau_-^n = p_n - p_{n-1}$. Если $E(p_n)$ – локальный максимум или минимум вдоль пути, то $\hat{\tau}^n$ определяется взвешенной суммой τ_+^n и τ_-^n , которая непрерывно переходит к приведенным выше соотношениям, когда зависимость энергии вдоль пути становится монотонной. За касательный вектор τ^n выбирается единичный вектор вдоль $\hat{\tau}^n$. Образы соединяются искусственными

«пружинами», которые не позволяют им скатиться в минимумы по энергетической поверхности. Жесткость пружин в большинстве реализаций ГМПУЛ выбирается одинаковой для всех образов. Однако увеличение жесткости пружин для образов, находящихся вблизи максимума энергии вдоль пути, увеличивает стабильность алгоритмов, особенно квазиньютоновского типа. В этом случае образ с наибольшей энергией «подтягивает» к себе остальные образы системы, обеспечивая лучшее разрешение вблизи седловой точки, которая представляет основной интерес для оценки устойчивости относительно тепловых флуктуаций [45, 23]. Силы упругости должны быть сопоставимы по величине с градиентом энергии, чтобы обеспечить сходимость к ПМПЭ. Далее проводится релаксация системы образов под действием проекции сил упругости f_n на направление касательной к пути и проекции антиградиента энергии на направление, ортогональное к пути:

$$F_n = -\nabla E(p_n) + (\nabla E(p_n) \cdot \tau^n) \tau^n + f_s \cdot \tau^n,$$

где $f_n = k[|p_{n+1} - p_n| - |p_n - p_{n-1}|]$ и через $|p_{n+1} - p_n|$ обозначено расстояние между $n + 1$ и n образами вдоль энергетической поверхности. Наличие пружин обеспечивает почти равномерное распределение образов вдоль пути в равновесном состоянии. В подпространстве, ортогональном касательной к пути, образы расположены в минимуме и поэтому имеют максимальный статистический вес среди близких состояний. Введение искусственных подталкивающих пружинок дало название методу «подталкивания упругой лентой». Алгоритм ГМПУЛ также учитывает постоянство длины векторов \mathbf{S}_i , так что касательные вектора к пути проецируются на касательное подпространство к магнитным моментам. Он может быть использован и в рамках моделей коллективизированного магнетизма, когда величины магнитных моментов определяются в результате самосогласованных расчетов при фиксированных направлениях на каждом узле решетки [18, 46]. Когда ПМПЭ найден, образ с максимальной энергией дает оценку для энергии седловой точки. Для более точного определения этой энергии можно использовать метод "взбирающегося образа" (climbing image) [45], позволяющий более точно определить седловую точку. В этом случае выбирается образ p_{max} с наибольшей энергией вдоль пути, убираются силы упругости искусственных пружин, действующие на него, и включается дополнительная

сила, равная градиенту энергии вдоль пути, которая заставляет образ двигаться в направлении увеличения энергии:

$$F_{max} = -\nabla E(p_{max}) + 2(\nabla E(p_{max}) \cdot \tau^{max})\tau^{max}.$$

Правило оптимизации других образов вдоль пути не изменяется, а сами образы служат для определения одной степени свободы, для которой выполняется максимизация энергии. Поскольку цепочка образов сходится к ПМПЭ, она дает хорошее приближение энергетической поверхности вдоль координаты реакции вблизи седловой точки. После того, как максимальная энергия вдоль пути найдена, плотность образов по разные стороны от седловой точки может быть различна. Можно выбрать два или более образов, которые “взбираются” к седловой точке, если требуется исследовать ее окрестность более подробно.

2. *Метод струн* [14, 47] основан на эволюции гладких кривых с внутренней параметризацией (струн), смещение которых приводит к ПМПЭ между локально устойчивыми начальным и конечным состояниями. Он аналогичен ГМПУЛ, но вместо упругих пружин, равномерно распределяющих образы вдоль пути, здесь используется другой алгоритм. Сначала образы смещаются под действием поперечной составляющей реальной силы. Затем путь аппроксимируется, например, при помощи интерполяции сплайнами, находится его длина и положение образов корректируется так, чтобы они были бы расположены на одинаковом расстоянии друг от друга вдоль пути. Алгоритм “взбирающегося образа” здесь также может быть реализован для точного определения положения седловой точки.

Если у рассматриваемой системы известно только начальное состояние, соответствующее локальному минимуму на энергетической поверхности, а конечное – неизвестно, то исследование энергетической поверхности позволяет определить наиболее вероятные состояния, в которые может быть реализован переход. Здесь необходимо учитывать, что расчет энергии в каждой точке энергетической поверхности требует определенных вычислительных затрат. Если размерность энергетической поверхности невелика, то набор конечных состояний можно определить, задавая случайную начальную конфигурацию и проводя поиск минимума энергии, используя стандартные итерационные методы. Однако для энергетической поверхности размерностью миллион и больше, на которой

имеется огромное число локальных минимумов, этот подход затруднителен. В этом случае возможно применение другого метода, называемого *Метод следования минимальной моде* [17, 16]. Он позволяет найти ближайшие седловые точки первого порядка, определяющие сценарии перехода в различные конечные состояния, которые априори неизвестны. Начиная с точки, близкой к минимуму, на каждом шаге итерации система перемещается в направлении собственного вектора гессиана энергии, соответствующего минимальному собственному числу. При этом в подпространстве, ортогональном этому вектору проводят релаксацию к состоянию с минимальной энергией. Поиск минимального собственного значения не требует больших вычислительных затрат и может быть проведен, например, с помощью алгоритма Ланцоша [48]. Вычисления минимальной моды можно избежать, если релаксировать одновременно два состояния, сохраняя расстояние между ними, как это делается в методе димера [49]. Тогда эти состояния упорядочиваются вдоль соответствующего минимальной моде собственного вектора. Когда минимальное собственное число становится отрицательным, метод следования минимальной моде реализует процедуру аналогичную алгоритму "взбирающегося образа", обеспечивая сходимость к седловой точке первого порядка. Выбирая разные начальные состояния вблизи минимума, можно получить несколько седловых точек, каждая из которых соответствует определенному механизму ухода из начального состояния. Этот метод, реализованный для магнитных систем, позволил получить магнитный переход, соответствующий образованию двух скирмионов из одного, сопровождающийся удвоением топологического заряда системы [17]. Энергия активации такого процесса оказалась сравнима с энергией активации для коллапса скирмиона.

Все рассмотренные выше методы работают на системах с большим числом степеней свободы, которое может составлять несколько миллионов. Однако, наиболее наглядно можно представить механизмы и сценарии магнитных переходов в случае двумерных энергетических поверхностей. На рис. (1.4) показана энергетическая поверхность скирмионных магнитных состояний, определяемых их радиусом R и шириной доменной стенки Δ . Путем минимизации энергии (1.21) по R и Δ было найдено два минимума, соответствующих равновесным скирмионам разного размера. Энергии в минимумах составляют $E_A \approx 20Ad$, $E_B \approx 19Ad$. Методом подталкивания упругой лентой, описанным выше, был по-

строен ПМПЭ между этими состояниями, показанный на рис. (1.4). Затем был использован метод «взбирающегося образа» для более точного определения седловой точки. Энергия в этой точке $E_{sp} \approx 23Ad$. Таким образом, энергетические барьеры, разделяющие состояния А и В, составляют $\Delta E_{AB} = E_{sp} - E_A \approx 3Ad$, $\Delta E_{BA} = E_{sp} - E_B \approx 4Ad$. ПМПЭ между состояниями скирмионов разного размера представлен на рис. 1.3 белой линией с образами, показанными белыми кружками. Седловая точка отмечена белым кружком большего радиуса. Видно, что в процессе перехода от большого скирмиона к малому сначала уменьшается радиус скирмиона, а потом, уже после седловой точки, уменьшается и ширина его доменной стенки. Отметим, что масштаб по осям на рис. 1.3 различен и, поэтому, расстояние между образами выглядит не одинаковым. На рис. 1.4 показана энергия вдоль ПМПЭ в зависимости от координаты реакции. Координата реакции d_j определяется как смещение вдоль ПМПЭ:

$$d_1 = 0$$

$$d_j = \sum_{i=2}^j \sqrt{(R_i - R_{i-1})^2 + (\Delta_i - \Delta_{i-1})^2}, \quad j = 2..N,$$

где j – номер образа. На рис. 1.4 видно, что все образы, за исключением образа в седловой точке, расположены равномерно вдоль пути.

1.3 Метод усеченного пути с минимальным перепадом энергии для поиска седловых точек первого порядка

Одной из проблем, возникающих при поиске ПМПЭ для переходов между магнитными состояниями, представляющими практический интерес для устройств компьютерной памяти и других приложений в спинтронике, является большая размерность энергетической поверхности. Если использовать топологически защищенные магнитные структуры, локализованные на дискретной решетке, процесс их коллапса часто происходит через формирование локальных структур, содержащих небольшое число неколлинеарно упорядоченных магнитных моментов на фоне однородного, например, ФМ состояния. При этом для аккуратной оценки энергии активации и формы энергетической поверхности

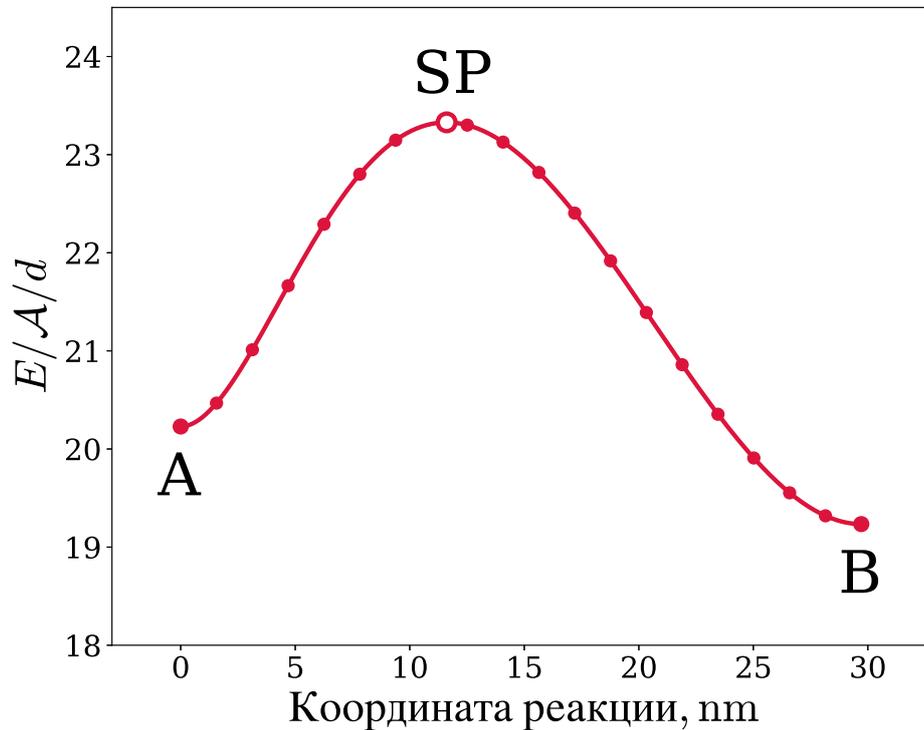


Рис. 1.4: Путь с минимальным перепадом энергии между скирмионами разных размеров.

вблизи седловой точки необходимо атомное разрешение, что приводит к большим, а иногда и непреодолимым вычислительным трудностям при описании систем микронного масштаба. С другой стороны, для оценки устойчивости и расчета времен жизни состояний в рамках ТПС знания всего ПМПЭ не требуется: необходимо только определить энергию в переходном состоянии и иметь зависимость энергии от координат, задающих состояние системы в окрестности минимума, соответствующего начальному состоянию, и около седловой точки. Несколько подходов к реализации поиска седловой точки без нахождения полного ПМПЭ известно в литературе. В простейшем методе два промежуточных образа частично сошедшегося ПМПЭ, расположенные по разные стороны от разделяющей поверхности, выбираются в качестве фиксированных начальной и конечной точек пути вместо локальных минимумов [50]. Метод может давать выигрыш во времени расчета, но не всегда позволяет добиться сходимости в случае сложного энергетического ландшафта. В более сложных алгоритмах, которые чаще позволяют добиться сходимости, сохраняя выигрыш во време-

ни, предусматривается возможность смещения новых начальных и конечных образов вдоль эквипотенциальных контуров в сторону ПМПЭ [51, 52]. Во всех приведенных работах поиск седловой точки проводился на основе МПУЛ, предполагающего введение дополнительных искусственных пружин для равномерного распределения образов вдоль пути.

В рамках настоящей работы был развит новый алгоритм, основанный на методе струн, получивший название «метода усеченного ПМПЭ» [53]. Он позволяет найти часть полного пути, включающую седловую точку и более подробно описать энергетическую поверхность вблизи переходного состояния. Именно седловая точка и ее окрестность важны для определения частот перехода между магнитными конфигурациями в рамках ТПС. Для процессов рождения и уничтожения скирмионов, которые будут рассмотрены ниже как модельные системы при сравнении разных методов, метод усеченного пути позволяет локализовать и полностью описать седловую точку даже в случаях, когда всю равновесную структуру и ПМПЭ не удастся рассчитать из-за ограничений, связанных с объемом компьютерной памяти.

Остановимся на алгоритме, используемом при расчетах методом усеченного пути. На первом этапе выделяется один из образов, называемый якорем, например, с максимальной энергией, и рассматривается часть пути фиксированной длины, включающая этот образ. Необходимо, чтобы часть образов выделенного участка находилась с одной стороны, а часть – с другой от гребня, разделяющего начальное и конечное состояния на энергетической поверхности. На концах рассматриваемого отрезка пути ставится условие обращения в ноль только поперечной составляющей градиента энергии. После этого проводится оптимизация пути, например, как в методе струн, и перераспределение образов на участке. В отличие от метода струн в методе усеченного ПМПЭ образы перераспределяются по части пути около седловой точки, при этом длина пути должна быть не больше некоторого наперед выбранного значения. Якорь не участвует в перераспределении, а на следующей итерации в качестве якоря выбирается ближайший к нему образ. В качестве якоря может быть выбрано одно из локально устойчивых состояний, например, начальное или конечное. Тогда его положение не меняется в процессе работы алгоритма, но необходимо, чтобы второй конец участка пути находился за областью переходного состояния. Это

требует качественного понимания формы энергетической поверхности и общей структуры переходного состояния.

Расчеты коллапса скирмиона внутри образца показывают, что процесс состоит из двух этапов: сначала скирмион сжимается до размера, составляющего несколько постоянных решетки, а затем магнитные моменты получившейся структуры начинают вращаться и система переходит в ФМ состояние. Седловой точке соответствует локальная конфигурация, в которой угол, образуемый магнитными моментами в центре с нормалью к поверхности близок к прямому. Состояния до седловой точки представляют собой неравновесные скирмионы меньшего радиуса. Это согласуется с представленной на рис. 1.3 ПМПЭ на двумерной энергетической поверхности, при построении которой предполагалось, что форма скирмиона параметризуется одним и тем же набором параметров и в равновесном состоянии, и в процессе магнитного перехода.

Отметим, что для скирмиона, находящегося внутри ограниченной области, возможен другой сценарий исчезновения, соответствующий уходу за свободную границу образца. Этот процесс будет подробнее рассмотрен в следующей главе. Сейчас отметим, что из-за отталкивания скирмиона от границы, его равновесное состояние соответствует положению вдали от границы. Большая часть ПМПЭ представляет собой движение скирмиона по направлению к границе как целого, практически без изменения формы и энергии. Часть пути, представляющая интерес для оценки времени жизни состояния, лежит в небольшой области, размером порядка радиуса скирмиона, вблизи границы. Только этой частью можно ограничиться, используя метод усеченного ПМПЭ.

Перейдем к сравнению расчетов коллапса скирмиона внутри образца с помощью стандартного метода струн и метода усеченного ПМПЭ. Рассматриваемая система представляет собой магнитные моменты, локализованные в узлах квадратной решетки в плоскости x - y размером 100×100 спинов. Энергия системы описывается обобщенной моделью Гейзенберга (1.22) со следующими значениями параметров: константа анизотропии $K = 0,004 J$, вектор ДМ, направленный вдоль ребра, соединяющего пару взаимодействующих спинов, имеет длину $D = 0,05 J$, внешнее магнитное поле отсутствует. Все величины измеряются в единицах обменного параметра J . При выбранных значениях параметров модели скирмион является метастабильным состоянием с радиусом приблизительно

равным 21 постоянной решетки. При расчетах использовались периодические граничные условия в плоскости x - y . Начальный путь для коллапса скирмиона на многообразии, определяемом условием постоянства величин магнитных моментов, выбирался как геодезическая между состоянием, соответствующим скирмиону, и ФМ состоянием с магнитными моментами, направленными вдоль z .

Как отмечалось выше, бóльшая часть полного ПМПЭ соответствует сжатию скирмиона, а седловая точка расположена на участке коллапса его ядра, когда радиус неколлинеарной структуры составляет примерно 3 постоянных решетки. Поэтому выбор в качестве образа на одном конце усеченного пути состояния скирмионного типа с радиусом 10 постоянных решетки, а на другом – ФМ состояния позволяет задать начальный путь, концы которого находятся по разные стороны разделяющей поверхности. ФМ состояние использовалось в качестве якоря. При проведении расчетов методом усеченного ПМПЭ был использован метод струн, описанный выше. Сравнение результатов расчета полного ПМПЭ и его части представлены на рис. 1.5. Левый столбец соответствует полному ПМПЭ, правый – УПМПЭ с якорем в ферромагнитном состоянии (последнее изображение). Область неколлинеарной структуры всех изображений в УПМПЭ на порядок меньше, а разрешение пути в УПМПЭ выше, чем при вычислении полного ПМПЭ. Энергия СТ была найдена с точностью $0,001 \text{ J/grad}$ в два раза быстрее с помощью УПМПЭ.

1.4 Теория переходного состояния и частоты магнитных переходов

ТПС для магнитных степеней свободы предполагает, что магнитные моменты – классические объекты с заданной энергией взаимодействия, определяемой, например, уравнением (1.22), и что переходы между магнитными состояниями являются медленными процессами по сравнению с колебаниями отдельных моментов, так что распределение Больцмана устанавливается и поддерживается во всей доступной области на энергетической поверхности системы до переходного состояния включительно. Траектории на энергетической поверхности

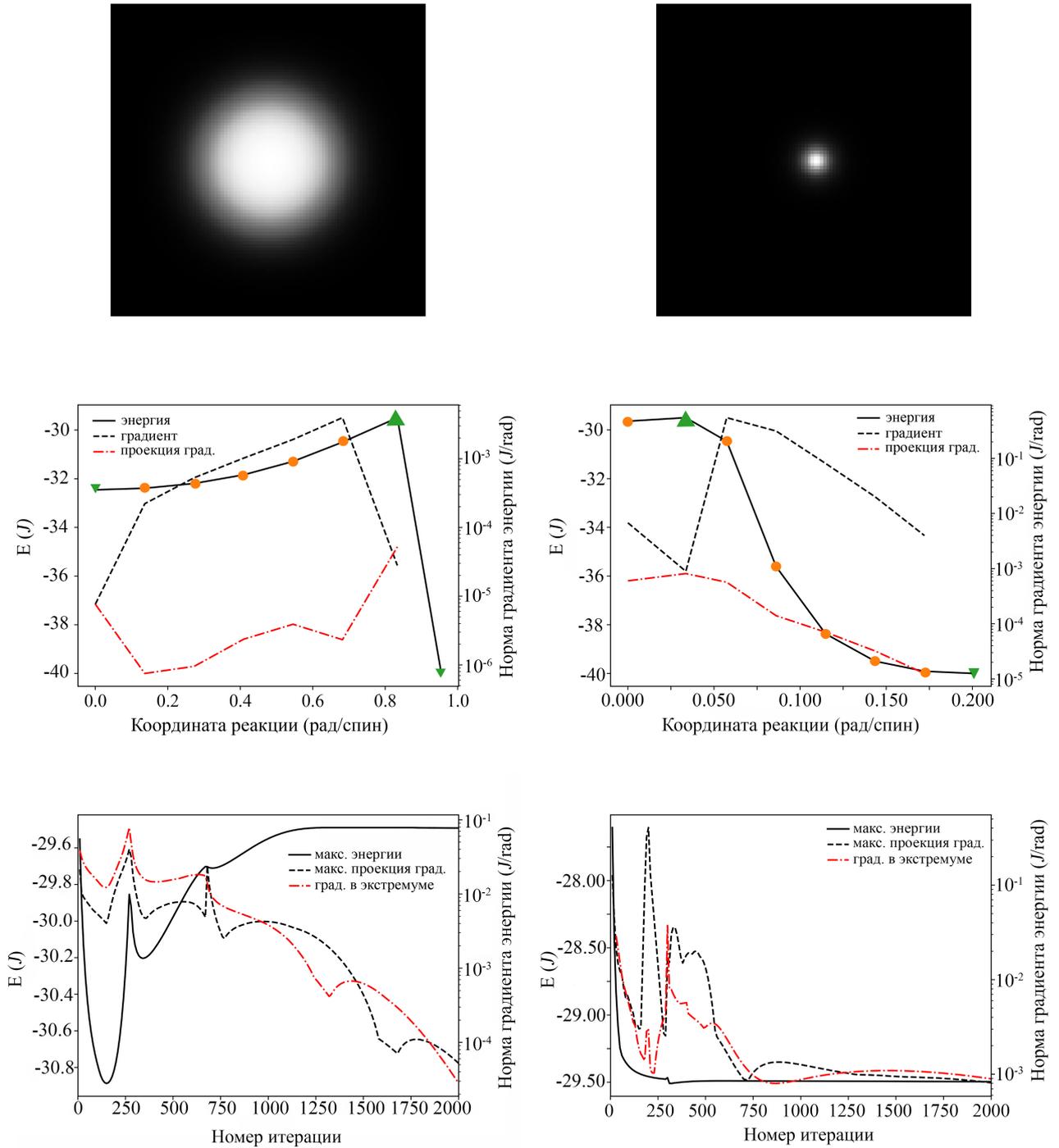


Рис. 1.5: Расчет полного ПМПЭ для коллапса скирмиона (слева) и усеченного ПМПЭ (справа). Верхний ряд - первые изображения ПМПЭ после 2000 итераций, центральный ряд-ПМПЭ после 2000 итераций, нижний ряд - история сходимости.

предполагаются реактивными, т.е. они соединяют начальное и конечное состояния, пересекая разделяющую поверхность только один раз [7, 54].

В рамках ТПС для времен жизни магнитных состояний можно получить закон Аррениуса:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (1.23)$$

где $\Delta E = E_{sp} - E_m$ определяется энергий в седловой точке E_{sp} по отношению к энергии в начальном состоянии E_m . Значения энергий может быть найдено методами, описанными в предыдущем разделе.

Если в седловой точке и минимуме, соответствующем начальному состоянию, используется гармоническое приближение для формы энергетической поверхности, то предэкспоненциальный фактор τ_0 зависит от гессианов энергии в этих точках. Результаты расчетов энергии активации и времен жизни, выполненные для магнитных скирмионов, оказываются в хорошем количественном соответствии с данными, полученными на основе моделирования стохастического уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта при достаточно высоких температурах, когда такое моделирование возможно [40, 55].

Ниже будут выведены формулы для расчета времен жизни магнитных состояний в рамках гармонического приближения ТПС. В дальнейшем они будут использоваться для анализа устойчивости относительно тепловых флуктуаций скирмионов на дорожках, в присутствии точечных немагнитных примесей и других дефектов пространственной структуры, существование которых необходимо учитывать при проектировании устройств компьютерной памяти.

Рассмотрим систему, состоящую из N магнитных моментов одинаковой величины μ в рамках дискретной решеточной модели, соответствующей (1.22). В дальнейшем будем учитывать в основном только короткодействующее взаимодействие. Дальнодействующее магнитное диполь-дипольное взаимодействие будет учитываться путем перенормировки эффективной анизотропии, хотя большинство аналитических результатов можно использовать и при его явном учете.

Магнитная конфигурация задается набором всех векторов \mathbf{S}_i . Запишем энергию (1.22) в более общей форме:

$$E[S] = \frac{1}{2} S \cdot QS + S \cdot L \quad (1.24)$$

Очевидно,

$$\frac{\partial E[S]}{\partial S} = QS + L \quad (1.25)$$

Здесь L - векторное поле, Q - самосопряженный оператор над векторными полями. Динамика системы определяется уравнением Ландау-Лифшица

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} S \times \frac{\partial E[S]}{\partial S}, \quad (1.26)$$

где векторное произведение относится к каждому магнитному моменту, входящему в конфигурацию S .

Подставляя производную (1.25) в (1.26), получаем уравнение динамики в виде:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} S \times (QS + L), \quad (1.27)$$

Дальнейшие расчеты будут проводиться в декартовых координатах в касательном пространстве к многообразию \mathcal{M} , определяемому условием $\|\mathbf{S}_i\| = 1$.

Рассмотрим состояние $S = S^0 + \Delta$ в окрестности состояния S^0 . Вследствие условия нормировки получаем:

$$1 = \mathbf{S}_n^2 = (\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n)^2 = (\mathbf{S}_n^0)^2 + 2\mathbf{S}_n^0 \cdot \Delta_n + (\Delta_n)^2.$$

Таким образом, с точностью до квадратичных членов $\mathbf{S}_n^0 \cdot \Delta_n = 0$ и для всех n вектор Δ_n принадлежит касательному пространству к многообразию \mathcal{M} . Используя координаты в касательном пространстве, определим криволинейные координаты вблизи \mathbf{S}^0 следующим образом:

$$\mathbf{S}_n = \frac{\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n}{\|\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n\|}$$

$$\frac{1}{\|\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n\|} = \frac{1}{\sqrt{(\mathbf{S}_n^0)^2 + 2\mathbf{S}_n^0 \Delta_n + \Delta_n^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_n^2}} = 1 - \frac{1}{2} \Delta_n^2 + o(\Delta_n^2) \quad \text{при } \Delta \rightarrow 0$$

$$\mathbf{S}_n = \mathbf{S}_n^0 + \Delta_n - \frac{1}{2} \mathbf{S}_n^0 \Delta_n^2 + o(\Delta_n^2) \quad \text{при } \Delta \rightarrow 0.$$

Обозначим через $D = \text{diag}_n \Delta_n^2$. Далее мы опустим индекс n . Тогда

$$S = S^0 + \Delta - \frac{D}{2}S^0 + o(\Delta^2) \quad \text{при } \Delta \rightarrow 0.$$

Подставляя это выражение в (1.24), получим энергию в локальных координатах:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \left(S^0 + \Delta - \frac{D}{2}S^0 \right) Q \left(S^0 + \Delta - \frac{D}{2}S^0 \right) + \left(S^0 + \Delta - \frac{D}{2}S^0 \right) \cdot L + o(\Delta^2) = \\ &= E_0 + E_1[\Delta] + \frac{1}{2}E_2[\Delta] + o(\Delta^2), \end{aligned} \quad (1.28)$$

где

$$E_0 = E[S^0] = \frac{1}{2}S^0 Q S^0 + S^0 L - \text{энергия в } S^0,$$

$E_1[\Delta] = \Delta \cdot (Q S^0 + L)$ – дифференциал энергии в локальных координатах в S^0 , и

$$E_2[\Delta] = \Delta \cdot Q \Delta - D S^0 \cdot (Q S^0 + L) \quad (1.29)$$

– квадратичная форма гессиана энергии в локальных координатах.

Разложение энергии E позволяет найти стационарную точку S^0 энергии. В стационарной точке дифференциал энергии равен нулю для любых приращений, поэтому $(Q S^0 + L)_n$ параллелен \mathbf{S}_n^0 для всех n :

$$\Delta \cdot (Q S^0 + L)_n = 0, \quad \Delta \cdot \mathbf{S}_n^0 = 0 \quad \Rightarrow \quad (Q S^0 + L)_n \parallel \mathbf{S}_n^0 \quad \forall n$$

Таким образом, существуют множители Лагранжа λ_n , такие, что

$$(Q S^0 + L)_n = \lambda_n \mathbf{S}_n^0 \quad \forall n \quad (1.30)$$

Принимая во внимание условие нормировки, множители Лагранжа можно найти явно

$$\lambda_n = \mathbf{S}_n^0 \cdot (Q S^0 + L)_n \quad (1.31)$$

Получается нелинейная система алгебраических уравнений, решение которых определяет стационарную точку энергии.

После подстановки (1.31) в (1.29) разложение энергии по степеням Δ в стационарной точке S_0 (гармоническое приближение) (1.28) упрощается:

$$E = E_0 + \frac{1}{2}\Delta \cdot Q\Delta - \frac{1}{2}\sum_n \lambda_n \Delta_n^2 + o(\Delta^2) = E_0 + \frac{1}{2}\Delta \cdot H\Delta + o(\Delta^2) \quad (1.32)$$

Таким образом, гессиан энергии H в точке S_0 , ограниченный на касательное пространство, совпадает с матрицей Q с вычтенными из главной диагонали множителями Лагранжа.

Введем собственный ортонормированный базис для гессиана H :

$$He^n = \zeta^n e^n, \quad e^n \cdot e^m = \delta_{n,m}.$$

Раскладывая малые приращения около стационарной точки S^0 в касательном пространстве \mathcal{M} по этому базису

$$\Delta = \sum_{n=1}^{2N} \Delta^n e^n, \quad (1.33)$$

получим энергию в окрестности этой точки в виде

$$E = E^0 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{2N} \zeta^n (\Delta^n)^2 + o(\Delta^2). \quad (1.34)$$

Если в начальный момент система находилась в состоянии вблизи минимума энергии S_m , то вероятность обнаружить ее в элементе конфигурационного пространства dS можно представить в виде

$$dP = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_m}{k_B T}} dS,$$

где E_m -энергия в минимуме, а нормировочная константа определяется выражением:

$$Z = \int e^{-\frac{E_m}{k_B T}} dS. \quad (1.35)$$

В приближении (1.34) имеем:

$$Z = e^{-\frac{E_m}{k_B T}} \frac{(2\pi k_B T)^N}{\sqrt{\det H[S_m]}} \quad (1.36)$$

Число переходов из начального в конечное состояние в единицу времени $k = 1/\tau$ можно оценить как произведение вероятности попасть в окрестность седловой точки (переходного состояния) на скорость ухода из нее в направлении конечного состояния:

$$k = \frac{I}{Z} = \frac{1}{Z} \int_{v^\perp > 0} v^\perp(\Delta) e^{-\frac{E^{sp}}{k_B T}} d\Delta, \quad (1.37)$$

где v^\perp – компонента скорости dS/dt ортогональная поверхности, проходящей через седловую точку и разделяющей начальное и конечное состояние. Разделяющая поверхность строится ортогонально собственному вектору e^1 , соответствующему отрицательному собственному значению ζ^1 . Интеграл берется по части разделяющей поверхности, где скорость направлена в сторону конечного состояния. Эта скорость может быть найдена из уравнения Ландау-Лифшица в гармоническом приближении.

Подставляя $S = S^0 + \Delta + o(\Delta)$ в уравнение динамики (1.27), получим уравнение движения в касательном пространстве:

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n + o(\Delta)) = \frac{\gamma}{\mu}(\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n + o(\Delta)) \times (Q(S^0 + \Delta + o(\Delta)) + L)_n$$

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{S}_n^0 + \Delta_n + o(\Delta)) = \frac{\gamma}{\mu} \mathbf{S}_n^0 \times (QS^0 + L)_n + \frac{\gamma}{\mu} [\Delta_n \times (QS^0 + L)_n + \mathbf{S}_n^0 \times (Q\Delta)_n] + o(\Delta) \quad (1.38)$$

Запишем уравнение движения (1.27) для состояния S^0 :

$$\frac{dS^0}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} \mathbf{S}_n^0 \times (QS^0 + L)_n$$

Из него с учетом уравнения (1.30) следует, что S^0 не меняется со временем: $\frac{dS^0}{dt} = 0$. Таким образом, первое слагаемое в правой части уравнения (1.38) равно нулю, а в левой части остается $\frac{d}{dt} \Delta_n$. После подстановки во второе слагаемое правой части уравнения выражения (1.30), получаем уравнение динамики с точностью до квадратичных членов в виде:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{\Delta}_n = \frac{\gamma}{\mu}\mathbf{S}_n^0 \times [(Q - \lambda_n)\mathbf{\Delta}]_n$$

или без спинового индекса и с учетом $H = Q - \lambda$:

$$\frac{d}{dt}\Delta = \frac{\gamma}{\mu}S^0 \times H\Delta \quad (1.39)$$

Компонента скорости ортогональная разделяющей поверхности задается уравнением

$$v^\perp = \left(\frac{dS}{dt}\right)^\perp = \left(\frac{d}{dt}\Delta\right)^\perp = e^1 \cdot \frac{d}{dt}\Delta = \frac{\gamma}{\mu}e^1 \cdot (S^0 \times H\Delta) \quad (1.40)$$

Подставим в (1.40) разложение приращения Δ по собственному базису Гессиана H в седловой точке:

$$v^\perp = \frac{\gamma}{\mu} \sum_n \zeta_s^n \Delta^n e^1 \cdot (S^0 \times e^n) = \sum_n a^n \Delta^n \quad (1.41)$$

где $a^n := \frac{\gamma}{\mu} \zeta_s^n e^1 \cdot (S^0 \times e^n)$ - это скорость роста перпендикулярной составляющей скорости v^\perp в направлении собственного вектора Гессиана энергии e^n при движении из S^0 . Очевидно, что $a^1 = 0$.

Рассмотрим вновь частоту переходов. Подставим перпендикулярную составляющую скорости (1.41) и разложение энергии в переходном состоянии (1.34) $E = E_s + \frac{1}{2} \sum_l \zeta_s^l (\Delta^l)^2$ в выражение для частоты переходов (1.37):

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\sum_{n=2}^{2N} a^n \Delta^n > 0 \wedge \Delta^1 = 0} \sum_n a^n \Delta^n \exp\left(-\frac{1}{2k_B T} \sum_l \zeta_s^l (\Delta^l)^2\right) d\Delta$$

Где E^s - энергия переходного состояния. Введем переменные $\xi^l = \Delta^l \sqrt{\frac{\zeta_s^l}{2k_B T}}$, тогда:

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\sum_{n=2}^{2N} \frac{a^n \xi^n}{\sqrt{\zeta_s^n}} > 0 \wedge \xi^1 = 0} \sum_{n=2}^{2N} a^n \xi^n \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^n}} \prod_{l=2}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} e^{-(\xi^l)^2} d\xi$$

Произведение экспонент содержит в показателе выражение, представляющее собой квадрат длины некоторого вектора в $2N$ -мерном конфигурационном

пространстве со знаком минус. Эта длина выражается через координаты ξ^l в базисе $\{e_s^i\}$, но она может быть записана в любом ортонормированном базисе, при этом якобиан перехода к новому базису равен единице. Если выберем один из векторов этого базиса вдоль v^\perp , то границы области интегрирования будут иметь простой вид, и все интегралы можно вычислить явно. Вводя ортонормированные координаты η , такие, что

$$\eta^1 = \xi^1 \quad \text{и} \quad \eta^2 \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} = \sum_{n=2}^{2N} \frac{a^n \xi^n}{\sqrt{\zeta_s^n}},$$

мы получим

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\eta^2 > 0 \wedge \eta^1 = 0} \sqrt{2k_B T} \eta^2 \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \prod_{l=2}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} e^{-(\eta^l)^2} d\eta$$

Возьмём интеграл по всем переменным:

$$\int_{\mathbb{R}^{2N-2}} \prod_{l=3}^{2N} e^{-(\eta^l)^2} d\eta = \sqrt{\pi}^{2N-2} = \pi^{N-1}$$

$$\int_0^\infty \eta^2 e^{-(\eta^2)^2} d\eta^2 = \frac{1}{2}$$

В итоге:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \pi^{N-1} e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \sqrt{2k_B T} \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \prod_{l=2}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} = \\ &= e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \frac{(2\pi k_B T)^N}{2\pi} \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \left(\prod_{l=2}^{2N} \zeta_s^l \right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (1.42)$$

Подставляя выражения (1.42) и (1.36) в (1.37), получаем выражение для частоты переходов:

$$k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \sqrt{\frac{\det H_m}{\prod_{l=2}^{2N} \zeta_s^l}} e^{-\frac{E_s - E_m}{k_B T}} \quad (1.43)$$

Это выражение совпадает с полученным в работе [7]. Как было сказано выше, мы определили величины a^n следующим образом:

$$a_n = \frac{\gamma \zeta_s^n}{\mu} e^1 \cdot (S^0 \times e^n) \quad (1.44)$$

Приведем также другой вид формулы для частоты переходов. Состояния, принадлежащие ПМПЭ и близкие к переходному состоянию, задаются формулой $S^0 + \epsilon e^1$. Эти состояния эволюционируют в соответствии с лианеризованным уравнением Ландау-Лифшица 1.39:

$$\epsilon \frac{d}{dt} e^1 = \epsilon \frac{\gamma}{\mu} S^0 \times H e^1$$

Подставим в предыдущее уравнение $H e^1 = \zeta_s^1 e^1$:

$$\frac{d}{dt} e^1 = \frac{\gamma \zeta_s^1}{\mu} S^0 \times e^1 \quad (1.45)$$

Обозначим проекцию скорости $\frac{de^1}{dt}$ вдоль пути на собственные подпространства Гессиана как

$$b_n := e^n \cdot \frac{d}{dt} e^1$$

С учетом (1.45):

$$b_n = \frac{\gamma \zeta_s^1}{\mu} e^n \cdot (S^0 \times e^1) = -\frac{\gamma \zeta_s^1}{\mu} e^1 \cdot (S^0 \times e^n)$$

Тогда a_n и b_n связаны следующим образом:

$$a_n = -\frac{\zeta_s^n}{\zeta_s^1} b_n = \frac{\zeta_s^n}{|\zeta_s^1|} b^n$$

Подставляя это выражение в (1.43), получаем эквивалентную формулу для частоты переходов:

$$k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\sum_{n=2}^{2N} \frac{\zeta_s^n}{|\zeta_s^1|} (b^n)^2} \sqrt{\frac{\det H_m}{|\det H_s|}} \exp\left(-\frac{E_s - E_m}{k_B T}\right)$$

Сумма по собственным значениям представляет собой значения квадратичной формы матрицы H на векторе b :

$$\sum_n \zeta_s^n (b^n)^2 = b \cdot Hb$$

Последнее выражение может быть вычислено в произвольном базисе, включая исходный базис, в котором задавалась магнитная конфигурация, и, таким образом, не требуется поиск всех собственных значений гессиана. В итоге частота переходов задается следующей формулой

$$k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{b \cdot Hb}{|\zeta_s^1|}} \sqrt{\frac{\det H_m}{\det |H_s|}} \exp\left(-\frac{E_s - E_m}{k_B T}\right)$$

где

$$b_n = \frac{d\nu_n}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} \mathbf{S}_{s,n} \times (H_s \nu)_n$$

ν - единичная касательная к ПМПЭ в седловой точке, состояния S_m и S_s - минимум и седловая точка на энергетической поверхности, E_m и E_s - соответствующие энергии, H_m и H_s - гессианы энергии в S_m и S_s .

Рассмотрим теперь случай наличия квазиуловых мод в минимуме и седловой точке. Пусть в минимуме n_m квазиуловых мод $\zeta_m^1 \approx 0$, $\zeta_m^2 \approx 0$, ... $\zeta_m^{n_m} \approx 0$, тогда в выражении (1.35) будет присутствовать n_m интегралов, которые дают объем квазиуловых мод V_m . Оставшийся интеграл даст выражение

$$\frac{(2\pi k_B T)^{2N-n_m}}{\sqrt{\prod_{l=n_m+1}^{2N} \zeta_m^l}}$$

В итоге:

$$Z = e^{-\frac{E_m}{k_B T}} V_m \frac{(2\pi k_B T)^{2N-n_m}}{\sqrt{\prod_{l=n_m+1}^{2N} \zeta_m^l}}$$

Пусть в седловой точке n_s квазиуловых мод: $\zeta_s^2 \approx 0$, $\zeta_s^3 \approx 0$, ... $\zeta_s^{n_s+1} \approx 0$. Обозначим $j = n_s + 2$.

Тогда имеем:

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\sum_{n=j}^{2N} a^n \Delta^n > 0 \wedge \Delta^1 = 0} \sum_{n=j}^{2N} a^n \Delta^n \exp\left(-\frac{1}{2k_B T} \sum_{l=j}^{2N} \zeta_s^l (\Delta^l)^2\right) d\Delta$$

Введем переменные $\xi^l = \sqrt{\frac{\zeta_s^l}{2k_B T}} \Delta^l$, тогда:

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\sum_{n=j}^{2N} \frac{a^n \xi^n}{\sqrt{\zeta_s^n}} > 0 \wedge \xi^1 = 0} \sum_{n=j}^{2N} a^n \xi^n \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^n}} \prod_{l=j}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} e^{-(\xi^l)^2} d\xi$$

Вводя ортонормированные координаты η , такие, что

$$\eta^1 = \xi^1 \quad \text{и} \quad \eta^j \sqrt{\sum_{n=j}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} = \sum_{n=j}^{2N} \frac{a^n \xi^n}{\sqrt{\zeta_s^n}},$$

мы получим

$$I = e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \int_{\eta^j > 0 \wedge \eta^1 = 0} \sqrt{2k_B T} \eta^j \sqrt{\sum_{n=j}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \prod_{l=j}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} e^{-(\eta^l)^2} d\eta$$

Возьмём интеграл по всем переменным:

$$\int_0^\infty \eta^j e^{-(\eta^j)^2} d\eta^j = \frac{1}{2}$$

$$\prod_{l=j+1}^{2N} \int e^{-(\eta^l)^2} d\eta^l = \sqrt{\pi}^{2N-j}$$

$$\int d\eta^2 \dots d\eta^{n_s+1} = V_s$$

$$\begin{aligned} I &= e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \frac{V_s}{2} \sqrt{\pi}^{2N-j} \sqrt{2k_B T} \sqrt{\sum_{n=j}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \prod_{l=j}^{2N} \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta_s^l}} = \\ &= e^{-\frac{E_s}{k_B T}} \frac{V_s}{2} \sqrt{\pi}^{2N-n_s-2} \sqrt{2k_B T}^{2N-n_s} \sqrt{\sum_{n=n_s+2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \left(\prod_{l=n_s+2}^{2N} \zeta_s^l \right)^{-\frac{1}{2}} = \\ &= e^{-\frac{E_s}{k_B T}} V_s \frac{\sqrt{2\pi k_B T}^{2N-n_s}}{2\pi} \sqrt{\sum_{n=n_s+2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \left(\prod_{l=n_s+2}^{2N} \zeta_s^l \right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Подставляя выражения для I и Z в (1.37), получаем формулу для частоты переходов при наличии квази нулевых мод в минимуме и седловой точке:

$$k = \frac{(2\pi k_B T)^{\frac{n_m - n_s}{2}} V_s}{2\pi V_m} \sqrt{\sum_{n=n_s+2}^{2N} \frac{(a^n)^2}{\zeta_s^n}} \sqrt{\frac{\prod_{l=n_m+1}^{2N} \zeta_m^l}{\prod_{l=n_s+2}^{2N} \zeta_s^l}} e^{-\frac{E_s - E_m}{k_B T}} \quad (1.46)$$

Подведем итоги и сформулируем основные **выводы** по материалу, изложенному в первой главе. В качестве перспективных магнитных структур для устройств компьютерной памяти могут служить топологически защищенные магнитные состояния, такие, как магнитные скирмионы. Устойчивость этих систем в рамках обобщенной модели Гейзенберга для магнитных моментов, локализованных на узлах дискретной решетки, может быть количественно оценена на основе теории переходного состояния для магнитных степеней свободы. Был представлен обзор методов поиска путей с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ) на многомерных энергетических поверхностях магнитных систем. Разработан новый метод усеченного ПМПЭ, позволяющий искать седловую точку на энергетической поверхности без поиска полного ПМПЭ. Этот метод дает возможность проводить расчеты скирмионов микронного масштаба с атомным разрешением. Выведены уравнения для расчета предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса для частот магнитных переходов. Разработанные методы и алгоритмы будут использованы в следующих главах для расчета времен жизни конкретных топологических магнитных структур.

Глава 2

Устойчивость магнитных скирмионов в устройствах магнитной памяти

Магнитная беговая (трековая) память (magnetic racetrack memory) с доменными стенками в качестве носителей информации была предложена в 2008 году [1] как альтернатива устройствам хранения данных на жёстких магнитных дисках (hard (magnetic) disk drive, HDD). Вместо механического перемещения считывающего устройства относительно магнитной среды, носителя информации, было предложено использовать движение магнитных структур – доменных стенок – по магнитным нанопроводам под действием электрического тока. Сейчас HDD вытесняются твердотельными накопителями (Solid-State Drive, SSD), которые хранят данные в полупроводниковых ячейках, не содержат движущихся частей и имеют скорость чтения/записи намного выше, чем HDD. Трековая память с доменными стенками по-прежнему в разработке. Был предложен целый ряд новых конструкций [56], которые, в частности, обещают более высокую плотность хранения, чем твердотельные накопители, благодаря трехмерной организации магнитных регистров сдвига.

Развитие технологий, связанных с использованием топологических магнитных структур, таких как скирмионы, открыло новое направление разработки трековой магнитной памяти. Скирмионы представляют собой хиральные метастабильные квазичастицы размером от нескольких нанометров до микронов [4]. Малый размер скирмионов, их высокая подвижность под воздействием экстремально малых токов делает эти магнитные структуры перспективными кандидатами для создания на их основе сверхплотной, быстрой и энергоэффектив-

ной магнитной памяти [6, 5, 57]. Для практического использования скирмионов необходимо обеспечить их устойчивость относительно тепловых флуктуаций при температурах вплоть до комнатных. Считается, что устойчивость скирмионов может быть связана с топологическими свойствами магнитной структуры. Эти состояния обладают отличным от нуля "топологическим зарядом" q [58, 35]. Для квазидвумерных систем с непрерывным распределением намагниченности

$$q = \frac{1}{4\pi} \int \int \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial y} \right] d^2r, \quad (2.1)$$

где $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ - единичный трехмерный вектор, направленный вдоль намагниченности в точке \mathbf{r} . Топологический заряд – целое число, показывающее, сколько раз вектор $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ покрывает единичную сферу. Он сохраняется при непрерывном изменении намагниченности и, таким образом, переход из состояния с $q \neq 0$ в состояние $q = 0$, например ферромагнитное (ФМ), при непрерывном изменении намагниченности, невозможен. Это должно обеспечить «топологическую защиту» магнитных структур относительно произвольных тепловых флуктуаций [29]. Однако для моментов на дискретной решетке топологические аргументы, строго говоря, не работают и возникает вопрос о количественной оценке устойчивости, которая может быть определена в рамках ТПС с использованием методов и алгоритмов, развитых в первой главе. В настоящей главе будут представлены расчеты энергии активации и времен жизни скирмионов в условиях ограниченной геометрии, при наличии внешнего магнитного поля и немагнитных дефектов атомного размера.

2.1 Скирмион на треке.

Одно из наиболее активно развивающихся направлений разработки устройств на основе топологических систем связано с возможностью их движения под действием спин-поляризованного тока по магнитным дорожкам заданной архитектуры [11, 59, 60]. Когда скирмион или другой локализованный объект находится на магнитной дорожке, близость границы дорожки, ее кривизна и структурные дефекты могут существенно влиять на устойчивость системы относительно тепловых флуктуаций [61, 62].

Для очень узких дорожек, когда их ширина становится существенно меньше равновесного размера уединенного скирмиона, возможна его трансформация в пару доменных стенок [63]. Скирмион может разрушиться при проходе сужения на треке, двигаясь под действием спин-поляризованного тока [15]. Поэтому проблема оценки времен жизни топологических структур в условиях ограниченной геометрии здесь особенно важна.

Расчеты равновесных состояний скирмионов на магнитной дорожке показывают, что их размер начинает уменьшаться, когда ширина дорожки становится порядка удвоенного диаметра скирмиона [64, 65]. Аналогичный эффект отмечался по результатам расчета скирмионов в нанодиске в рамках микромагнитной модели [66].

На рис. 2.1 показаны рассчитанные конфигурации скирмионов, соответствующие локальным минимумам на энергетической поверхности для трека шириной $W = 70, 25$ и 14 атомных рядов. Численные значения параметров взяты из работы [67] и соответствуют экспериментально наблюдаемым скирмионам в системе Pd/Fe/Ir(111) [68]: $\mu B = 0.093J, K = 0.07J, D = |\mathbf{D}_{ij}| = 0.32J, J = 7$ мэВ. Размер скирмиона уменьшается по мере уменьшения ширины дорожки. На границах трека магнитные моменты отклоняются от направления, ортогонального поверхности, из-за нескомпенсированного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Когда собственный размер скирмиона становится близким к ширине трека, структура скирмиона на границе значительно искажается, и это увеличивает общую энергию системы по сравнению с широким треком.

Изучалось два возможных механизма исчезновения и зарождения скирмионов: внутри трека и посредством ухода или формирования новой структуры на границе образца. Для широких треков эти два механизма исследовались в работах [69, 19], а как функция ширины трека для скирмиона в магнитном поле $B=3,75$ Тл в [64]. Чтобы найти ПМПЭ для каждого из этих механизмов, выбирались разные начальные пути и положения промежуточных образов между скирмионным и ФМ состояниями. Для коллапса внутри трека это последовательность скирмионоподобных структур с центром в той же точке пространства, что и исходный скирмион, но с уменьшающимся размером. Для ухода через границу начальный путь соответствует приближению к границе без изменения размера и формы скирмиона и частичному выходу его за преде-

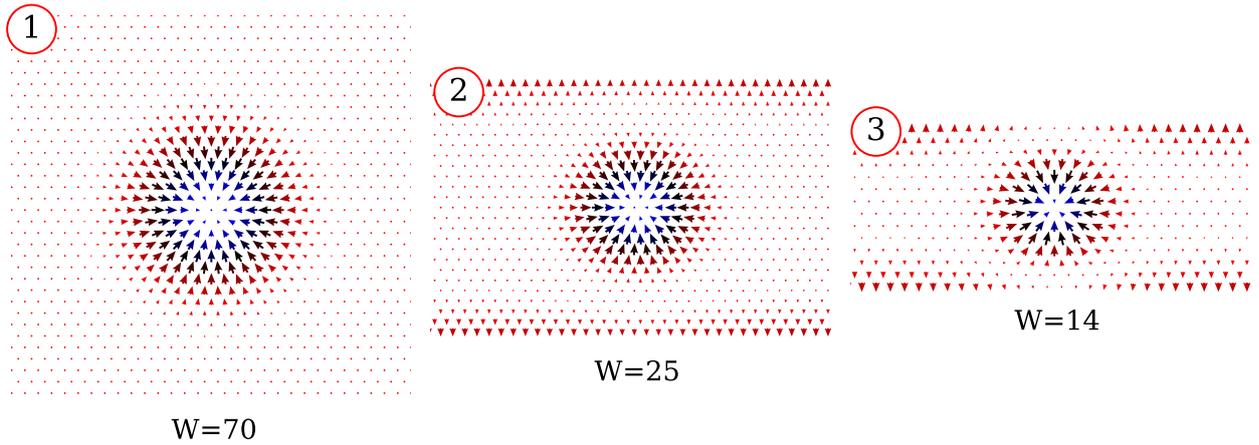


Рис. 2.1: Скирмион на треках разной ширины W : 1) $W = 70$, 2) $W = 25$, 3) $W = 14$.

лы образца. ПМПЭ для первого механизма показаны на рис.(2.2, а) для трех значений ширины дорожки. С уменьшением ширины дорожки энергия скирмиона возрастает по сравнению с энергией ФМ состояния. Энергия в седловой точке также увеличивается, но не так сильно, поскольку размер неколлинеарной структуры в седловой точке меньше размера равновесного скирмиона (см. вставку на рис. 2.2, а). В результате энергия активации для процесса коллапса скирмиона становится меньше для более узких треков. Соответственно, энергия активации зарождения скирмиона растет.

ПМПЭ для исчезновения скирмиона на границе трека показаны на рис.(2.2, б). Здесь изменение энергии активации с шириной аналогично коллапсу, но несколько меньше. Когда ширина трека значительно превышает собственный размер скирмиона, процесс ухода через границу можно разделить на два этапа: смещение скирмиона к границе, включающее лишь небольшое увеличение энергии, и затем исчезновение на границе. Это хорошо видно в случае $W = 70$, когда ПМПЭ имеет горизонтальную часть, соответствующую движению скирмиона как целого без значительного изменения формы. И для этого сценария зависимость энергии в переходном состоянии от ширины трека меньше, чем в начальном равновесном состоянии, где на узких треках обе границы действуют на скирмион одновременно. Поэтому барьер, который нужно преодолеть для уничтожения скирмиона уменьшается, а для его зарождения из ФМ состояния увеличивается с уменьшением ширины дорожки. Исчезновение скирмиона на

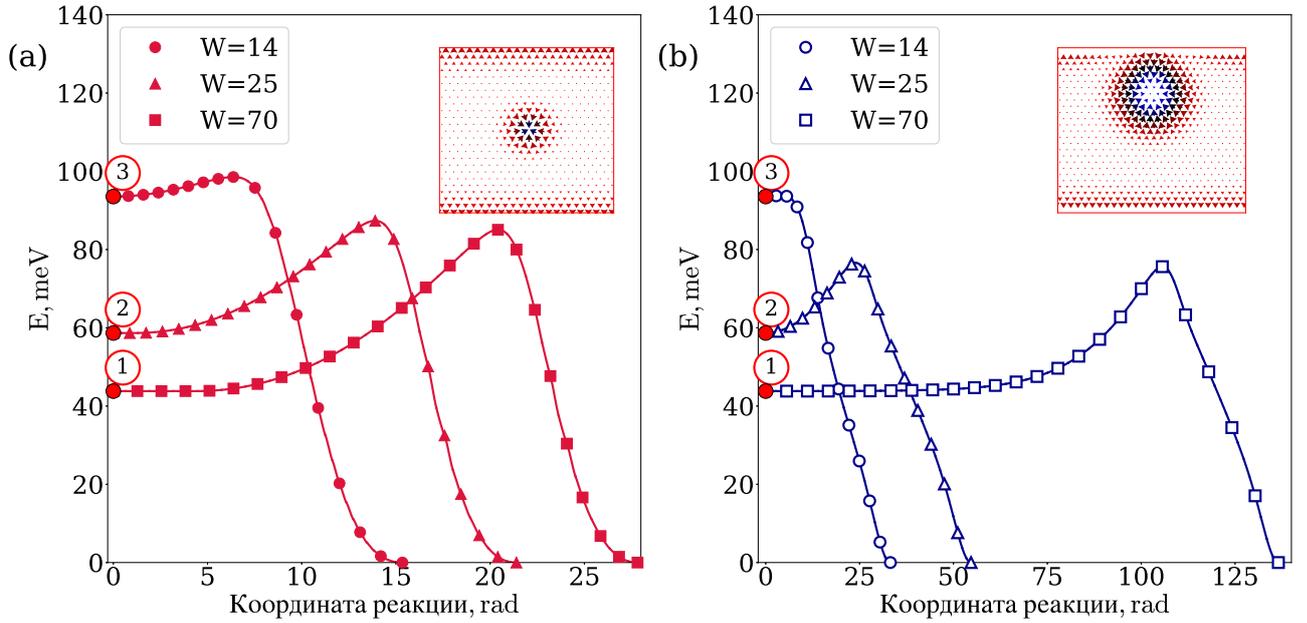


Рис. 2.2: Пути с минимальным перепадом энергии для переходов из скирмиона в ФМ состояние для треков разной ширины W , внутри трека (a) и на границе трека (b). Число в красных кружках соответствует конфигурациям, показанным на рис. 2.1. На вставках показана магнитная конфигурация в седловых точках.

границе требует более низкой энергии активации, чем внутри образца. Барьер для зарождения скирмиона увеличивается, когда ширина трека уменьшается, но он всегда ниже вблизи границы чем внутри трека.

Оценка предэкспоненциального множителя в законе скорости Аррениуса в рамках гармонического приближения теории переходного состояния [7] дает значение порядка 10^{12} с^{-1} для коллапса и 10^9 с^{-1} для ухода через границу на самом широком треке шириной 70 атомов. Это вместе с рассчитанной энергией активации позволяет оценить время жизни скирмиона. Оказалось, что для коллапса внутри образца оно составляет более 3 лет, а для ухода через границу - около полумесяца при температуре 10 К. При комнатной температуре такие скирмионы нестабильны.

Поведение барьеров меняется при увеличении магнитного поля, направленного противоположно намагниченности в центре скирмиона. Такое поле, как и границы трека, приводит к уменьшению размера скирмиона. Энергия метастабильных скирмионов в сильных полях увеличивается, а их равновесное число

и устойчивость относительно тепловых флуктуаций уменьшается. Это должно проявляться в особенностях топологического эффекта Холла, связанного с рассеянием электронов проводимости на скирмионах [70], а также в предсказанной теоретически возможности наблюдения квантового туннелирования скирмионного состояния в ФМ при сверхнизких температурах [71]. Эти вопросы и соответствующие результаты будут представлены в третьем разделе этой главы. На рис.2.3 приведена зависимость энергии активации уничтожения скирмионов в зависимости от ширины трека при трех разных значениях внешнего поля. Видно, что при поле $B = 3.75$ Тл барьер для радиального коллапса скирмиона выше барьера для его ухода через границу для всех значений W , что согласуется с результатами расчетов [19] для широкой дорожки. При $B = 4.6$ Тл барьеры близки, но для узкого трека ($W < 27$) энергия активации ниже для ухода через границу, а для широкого – для исчезновения внутри трека. При $B = 6.3$ Тл барьер для коллапса более чем в 2 раза ниже чем для ухода. При этом величина барьеров уменьшается с увеличением поля.

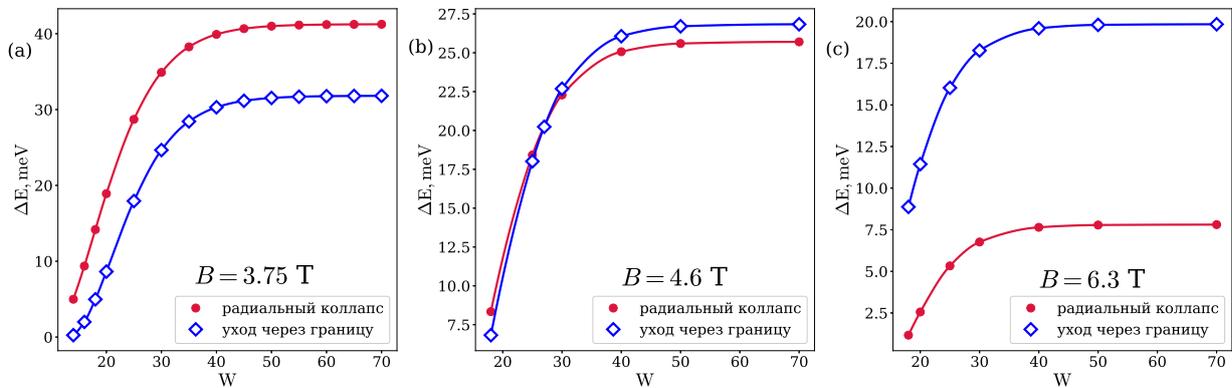


Рис. 2.3: Изменение барьера для исчезновения скирмиона в зависимости от ширины трека W для трех различных значений магнитного поля: $B = 3,75$ Тл (а), $B = 4,6$ Тл (б) и $B = 6,3$ Тл (в). Закрашенные красные символы соответствуют коллапсу, а незакрашенные синие символы соответствуют уходу через границу.

Аналогичные зависимости энергии активации для зарождения скирмионов внутри и на границе дорожки показаны на рис. 2.4 для того же набора полей. Здесь наблюдается такое же поведение: в поле $B = 6.3$ Тл энергетический барьер, который нужно преодолеть для зарождения скирмиона внутри образца ниже, чем на границе, в поле $B = 4.6$ Тл – ниже при ширине трека меньше

27 рядов и выше для более широких треков. При $B = 6.3$ Тл зарождение на границе требует более низкой энергии активации. ПМПЭ для скирмиона на до-

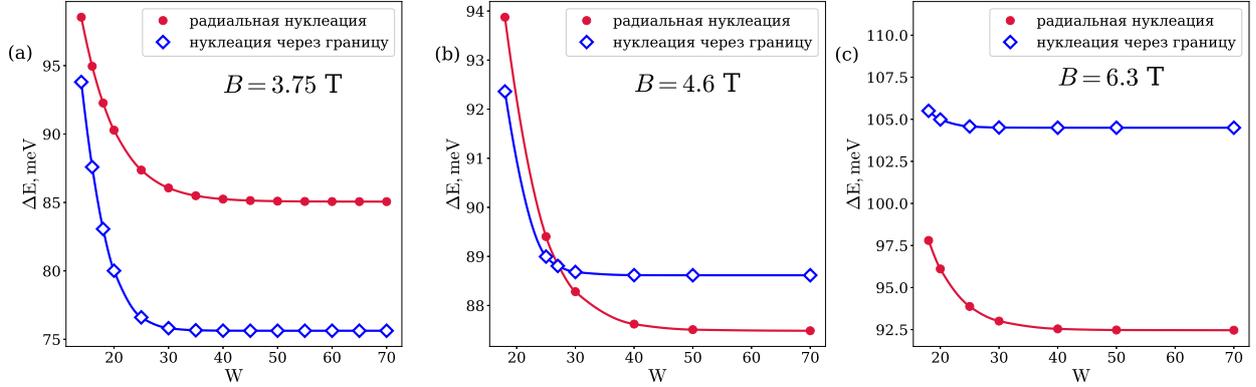


Рис. 2.4: Изменение барьера для зарождения скирмиона в зависимости от ширины трека W для трех различных значений магнитного поля: $B = 3,75$ Тл (а), $B = 4,6$ Тл (б) и $B = 6,3$ Тл (в). Закрашенные красные символы соответствуют зарождению внутри трека, незакрашенные синие символы соответствуют зарождению на границе.

рожке шириной $W = 30$ слоев в различных магнитных полях показаны на рис. 2.5. Рис. 2.5(а) соответствует коллапсу внутри трека, 2.5(б) – уходу скирмиона через границу. Видно, что энергия в седловой точке при уходе через границу сильно увеличивается с ростом магнитного поля, в то время, как для коллапса внутри образца это увеличение гораздо меньше. Из-за этого с увеличением поля барьер для ухода через границу трека становится больше, чем для коллапса. Барьер для зарождения скирмиона из ФМ состояния в больших полях становится меньше внутри трека, чем на его границе.

Время жизни скирмиона определяется не только энергией активации, но и частотой попыток. Если размер трека значительно больше, чем размер скирмиона, то для коллапса внутри трека как состояние скирмиона, так и седловая точка имеют две квазиулевы моды, которые соответствуют переносу в плоскости магнитной конфигурации. Следовательно, согласно формуле (1.46) частота попыток не зависит от температуры. В общем случае влияние квазиулевых мод зависит от параметров системы и температуры [64, 19]. Рассчитанные значения времени жизни в треке с шириной $W = 30$ при $T=6$ К составляют $1,6 \cdot 10^{16}$ с, $1,1 \cdot 10^6$ с и $2,4 \cdot 10^{-7}$ с для магнитного поля 3,75 Тл, 4,6 Тл и 6,3 Тл соот-

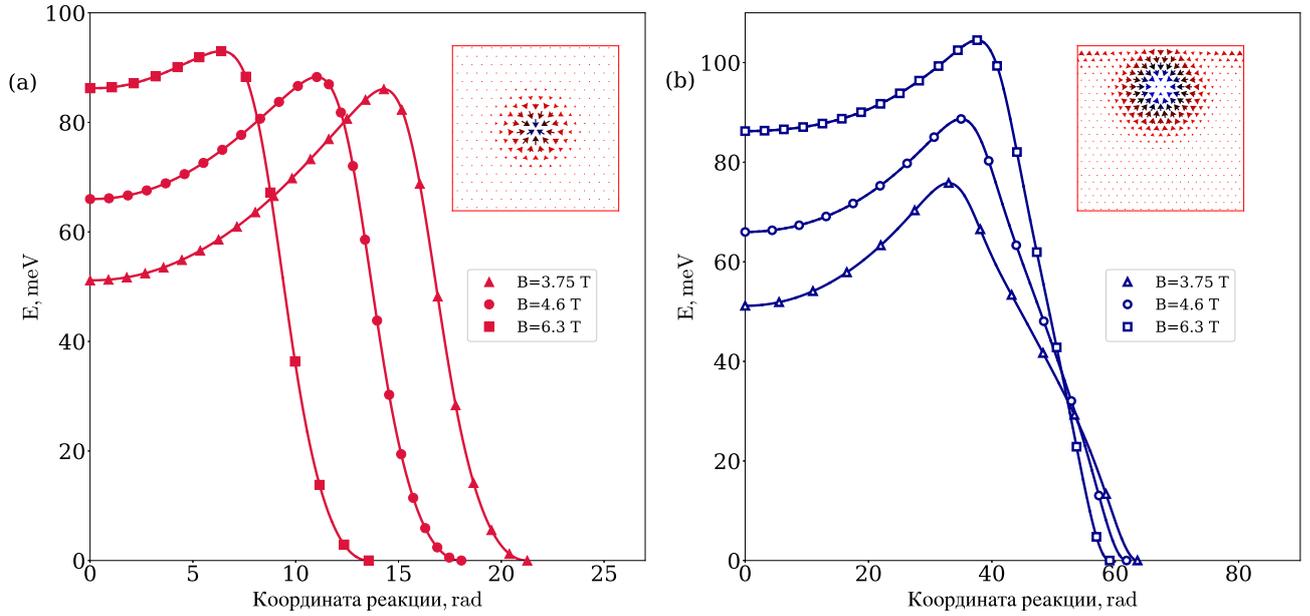


Рис. 2.5: Пути с минимальным перепадом энергии для перехода из состояния скирмиона в ферромагнитное состояние внутри (а) и через границу (б) трека. На вставках показаны конфигурации магнитных векторов, соответствующие седловым точкам. Ширина трека составляет $W=30$.

ответственно. Для выхода через границу в седловой точке имеется только одна нулевая мода, соответствующая перемещению вдоль границы. В этом случае время жизни пропорционально $(k_B T)^{1/2}$, и полученные значения составляют $1,7 \cdot 10^9$ с, $2,4 \cdot 10^7$ с и $3,2 \cdot 10^4$ с для трех величин магнитного поля.

2.2 Влияние структурных дефектов атомного масштаба на устойчивость магнитных скирмионов.

Для практического использования магнитных скирмионов важным вопросом является влияние структурных дефектов атомного масштаба на устойчивость и динамику топологических магнитных состояний. Локальные дефекты могут выступать притягивающими или отталкивающими центрами, приводя к формированию связанных состояний и деформации магнитного профиля скирмиона [72, 73], изменению траектории движения под действием тока [74]. Протяженные дефекты могут образовывать «рельсы», позволяющие перемещать

скирмионы вдоль заданных траекторий [75, 76]. При этом проблему устойчивости магнитных состояний при совместном воздействии ограниченной геометрии образца и точечных или протяженных дефектов необходимо решать при проектировании любых устройств, использующих скирмионы или другие топологические структуры.

Ниже мы рассмотрим вопрос об устойчивости квазидвумерных скирмионных состояний в присутствии немагнитных дефектов – примесных немагнитных атомов и кластеров, состоящих из них. Будут представлены результаты расчетов для кластеров разных размеров, находящихся на дорожках разной ширины.

На основе дискретного варианта обобщенной модели Гейзенберга с энергией, определяемой уравнением (1.22) были рассчитаны равновесные конфигурации скирмионов, локализованных на кластерах из нескольких немагнитных атомов. Рассматривались кластеры, состоящие из 1, 3, 4, 7 и 8 немагнитных атомов или вакансий, образующих компактную группу на двумерной треугольной решетке. Согласно имеющимся в литературе данным [74], устойчивые положения немагнитного дефекта в связанном состоянии дефект-скирмион задаются минимумами энергии связи, которые соответствуют положению дефекта вблизи локального максимума плотности энергии изолированного скирмиона. При этом пренебрегается изменением формы скирмиона под воздействием структурного дефекта. Скирмион на немагнитном кластере примесей стремится расположиться таким образом, чтобы максимизировать сумму энергетических вкладов всех магнитных моментов, замещенных немагнитными атомами.

На рис. 2.6 показано взаимное расположение скирмиона и немагнитного кластера, соответствующее минимуму энергии всей системы. Для всех рассмотренных размеров и геометрических форм кластера последний локализуется вблизи области, где моменты магнитных атомов лежат в плоскости пленки. Для удлиненных кластеров длинная ось направлена приблизительно вдоль изолинии постоянной плотности энергии. Такое расположение наблюдалось экспериментально методами сканирующей туннельной микроскопии для скирмионов в бислое PdFe на поверхности Ir(111) [72]. Энергия скирмиона на примеси, как показывают выполненные расчеты, меньше, чем энергия вдали от дефекта. Это объясняет, почему скирмионы, под воздействием спин-поляризованного тока с иглы туннельного микроскопа, как правило, образуются на вакансиях и дефек-

тах пространственной структуры [68].

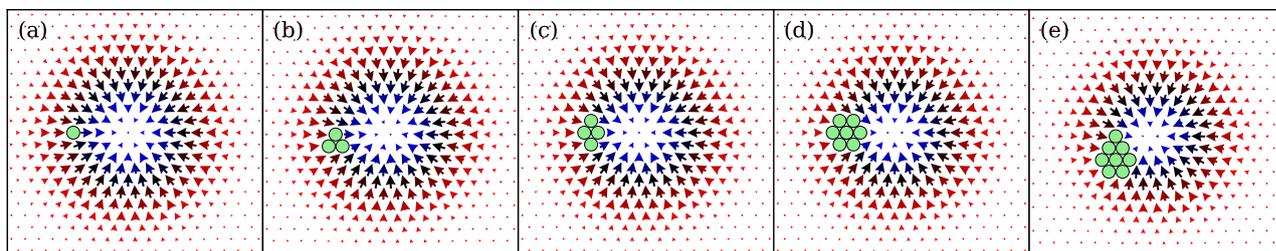


Рис. 2.6: Равновесное расположение скирмиона, локализованного на немагнитных кластерах, состоящих из 1 (a), 3 (b), 4 (c), 7 (d), 8 (e) атомов. Стрелки показывают направление магнитных моментов в плоскости, цвет обозначает составляющую, перпендикулярную плоскости (красный - спин, ориентированный вдоль внешнего поля, синий – противоположно полю). Немагнитные атомы изображены зелеными кружками.

В разделе 2.1 этой главы было показано, что отталкивание от свободной границы существенно влияет на размер, форму скирмиона и его устойчивость вплоть до исчезновения локально устойчивого скирмионного состояния для очень узких треков [64, 77]. Несмотря на то, что скирмион, локализованный на дефекте имеет меньшую энергию, чем свободный, оказывается, что энергия активации для процесса коллапса связанного состояния скирмион-дефект, также ниже, что делает эту структуру менее устойчивой, чем изолированный свободный скирмион.

В предлагаемых в литературе схемах устройств, где движение скирмионов управляется цепочкой примесей, вдоль которой происходит движение [73], а также в элементах трековой памяти [11] взаимодействие с примесями и границами, которое невозможно исключить полностью, должно влиять на устойчивость состояний и, следовательно, на работу всей системы в целом. Возникает вопрос: как дефекты совместно с границами треков будут влиять на локализацию и коллапс скирмионов? Для исследования этого вопроса были построены ПМПЭ и рассчитана энергия активации для процессов образования связанного состояния скирмиона и немагнитного кластера, ухода скирмиона с этого кластера, а также для коллапса и зарождения скирмиона непосредственно на таком дефекте [65].

Расчеты были выполнены для каждой конфигурации, представленной на рис. 2.6.

ПМПЭ для присоединения скирмиона к семиатомному кластеру (1-2-3) и последующего его коллапса (3-4-5) показаны на рис.2.7. На вставках даны магнитные конфигурации в равновесных локально устойчивых состояниях и в седловых точках. Связанное состояние скирмиона (3) во всех рассмотренных случаях имеет меньшую энергию, чем изолированного скирмиона (1). Тем не менее это метастабильное состояние имеет энергию более высокую, чем ФМ состояние с немагнитным дефектом. Энергия переходного состояния (2) для процесса локализации на кластере зависит от размера кластера. Она становится больше при увеличении размера кластера и при уменьшении ширины трека. Энергия переходного состояния (4) для процесса коллапса также растет при увеличении размера дефекта и сужении трека. Соотношение барьеров для отрыва от дефекта и для коллапса зависит от параметров системы, как будет показано ниже. Исчезновение скирмиона, локализованного на дефекте, посредством ухода через границу образца также возможно. Однако обычно этот процесс проходит в два этапа: отделение от дефекта и после этого выход не связанного скирмиона за границу. Исключение составляют только очень узкие магнитные дорожки. Как было показано в разделе 2.1 вероятность разных сценариев исчезновения скирмиона зависит от внешнего магнитного поля [77]. Аналогичная ситуация имеет место и для систем с немагнитными дефектами.

Барьеры для локализации скирмиона на дефекте (а) и отрыва от него (б) показаны на рис. 2.8 для кластеров разного размера в зависимости от ширины трека W . Для каждого кластера барьер для присоединения меньше, чем барьер для отрыва, что согласуется с результатами [78, 77]. Разница в энергиях активации означает, что скирмионы будут локализованы на немагнитных дефектах, если тепловой энергии будет достаточно чтобы преодолеть барьер для присоединения, но мало, чтобы сразу уйти от дефекта.

Оба барьера для присоединения скирмиона к кластеру и обратного процесса увеличиваются с увеличением размера кластера. Следовательно, на больших структурных дефектах вероятность закрепления и ухода ниже. Барьер для образования связанного состояния практически не зависит от ширины дорожки, хотя для узких дорожек он немного уменьшается.

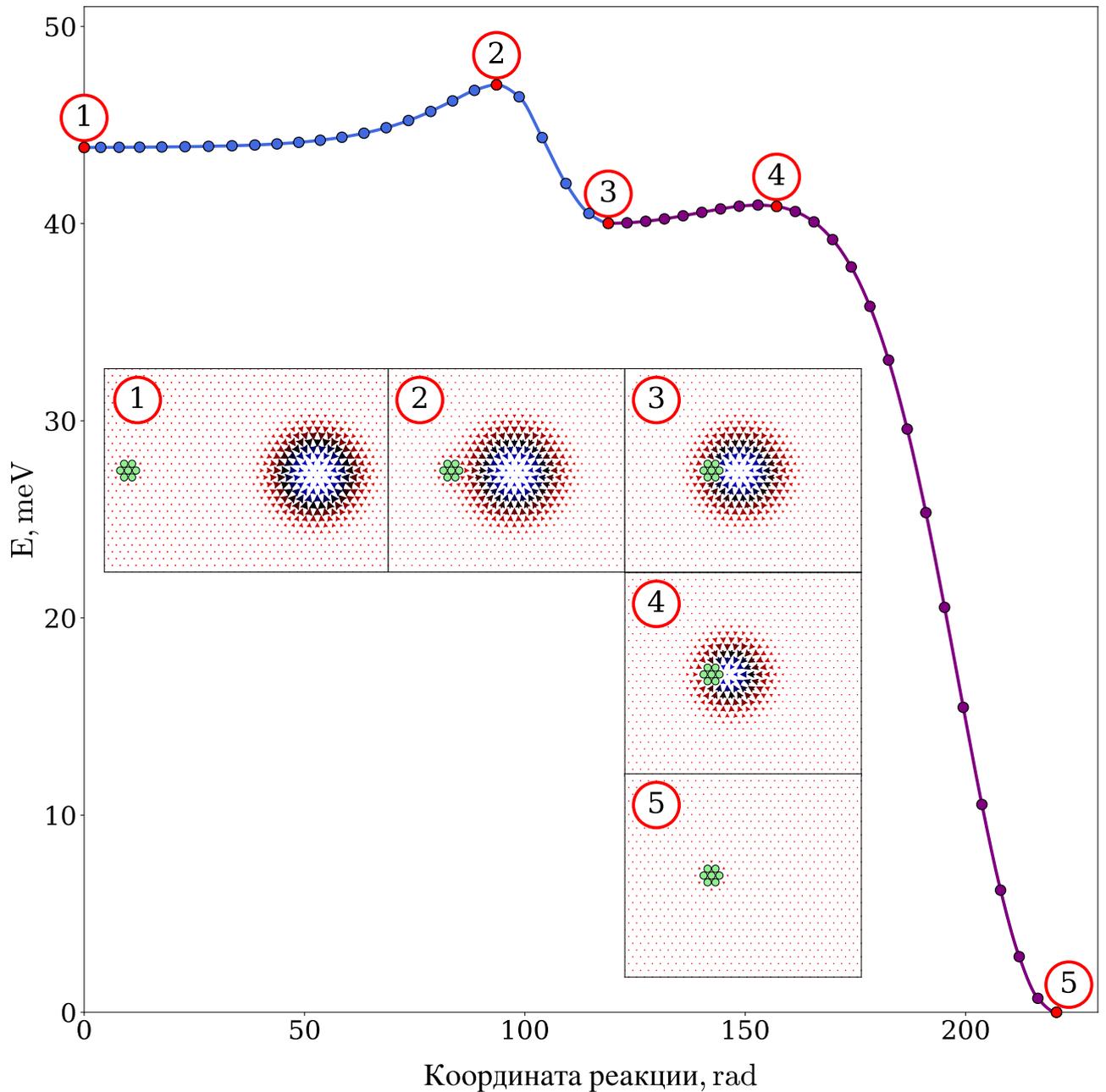


Рис. 2.7: ПМПЭ для скирмиона в присутствии немагнитного дефекта. Участок 1-2-3 соответствует пути от состояния скирмиона вдали от немагнитного кластера из 7 атомов до скирмиона, локализованного на кластере. Участок 3-4-5 представляет собой ПМПЭ от скирмиона, локализованного на кластере, до немагнитного кластера в ФМ образце. На вставках показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ. Состояния 2 и 4 соответствуют седловым точкам. Скирмион локализован внутри трека шириной $W = 61$ атом.

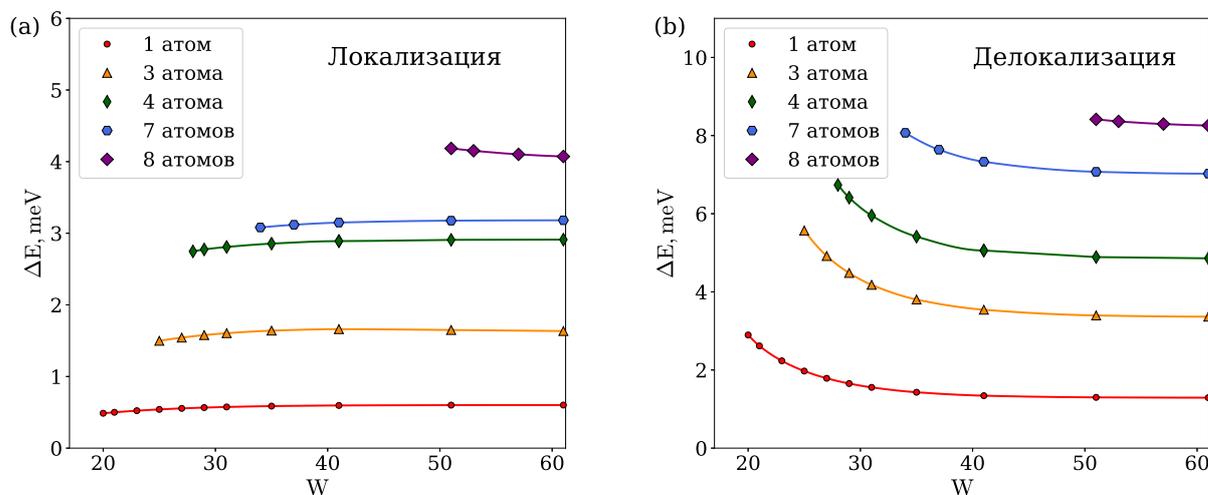


Рис. 2.8: Энергетический барьер для процесса локализации (а) и ухода (б) скирмиона от немагнитного кластера разного размера в зависимости от ширины трека.

С другой стороны, энергия активации процесса диссоциации скирмиона на дефекте возрастает, когда ширина дорожки становится меньше пяти диаметров скирмиона, что усиливает эффект фиксации скирмиона на дефектах на узких дорожках. Это проявляется для немагнитных дефектов всех размеров, но менее выражено для кластеров большого размера. Поскольку критический ток для движения скирмиона в присутствии немагнитных примесей можно оценить по барьеру диссоциации, общее потребление энергии скирмионной трековой памяти будет выше для узких треках, чем при движении скирмионов в неограниченной среде.

Как было показано выше, с уменьшением ширины трека время жизни скирмиона и его устойчивость относительно тепловых флуктуаций уменьшается. Когда на скирмион действуют и близость границы образца, и немагнитные дефекты, его устойчивость становится еще меньше. Действительно, минимальная ширина дорожки, на которой может существовать скирмион, растет с увеличением размера кластера, на котором он локализован. Например, скирмион, локализованный на восьмиатомном кластере, нестабилен при $W < 50$, а на одиночной немагнитной примеси – устойчив до $W = 20$. Немагнитный дефект значительно снижает активационный барьер для коллапса скирмиона по сравнению с кол-

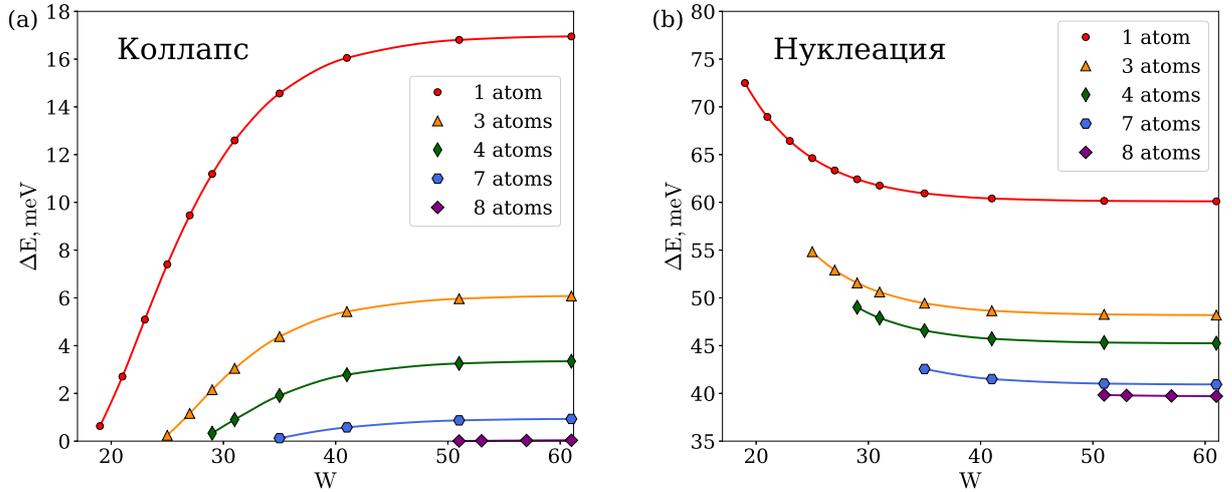


Рис. 2.9: Энергетический барьер для исчезновения (а) и зарождения (б) скирмиона на немагнитных кластерах разного размера в зависимости от ширины трека.

лапсом в однородной среде. Например, барьер для распада скирмиона на дефекте из семи атомов меньше 1 мэВ; без такого дефекта на дорожке такой же ширины барьер составляет 42 мэВ [64, 77]. Энергетический барьер для коллапса уменьшается с шириной дорожки для кластеров всех размеров, как показано на рис. 2.9 а. Уменьшение происходит быстрее для мелких дефектов и особенно заметно, когда ширина дорожки меньше пяти диаметров скирмиона. Это означает, что на узких дорожках S_k не только трудно отделить от немагнитного дефекта, но он может быть разрушен в процессе отделения.

Барьер для образования скирмиона на дефекте уменьшается с ростом размера дефекта так же, как и барьер для коллапса. Поэтому состояние вблизи большого дефекта регулярно возмущается: постоянно рождаются и исчезают новые скирмионы. При наличии тока, способного вызвать отрыв скирмиона от дефекта, такие неоднородности могут использоваться в качестве генераторов скирмионов. Это согласуется с обнаруженными в результате динамического моделирования эффектами рождения скирмионов на неровностях трека [79]. В отличие от энергии активации для процесса коллапса, барьер зарождения увеличивается с уменьшением ширины трека (рис. 2.9b), поэтому концентрация S_k на узких дорожках будет низкой. Влияние границ меньше для процессов

локализации-делокализации, чем для процессов коллапса-рождения, поскольку конфигурация боковой части скирмиона, взаимодействующей с дефектом, слабо изменяется при сжатии скирмиона границами, в то время как форма скирмиона в целом становится эллиптической и скирмион имеет меньший размер.

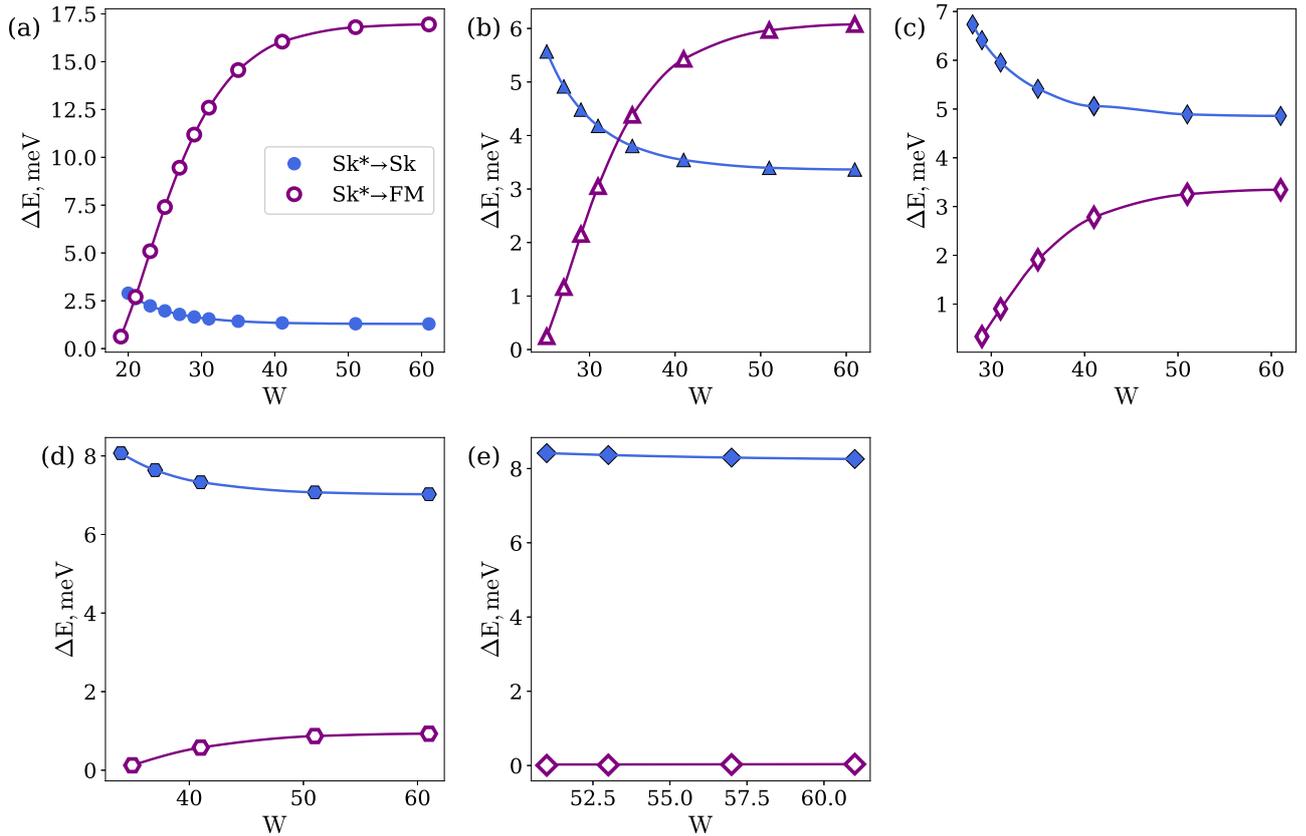


Рис. 2.10: Зависимость энергетических барьеров отрыва скирмиона от дефекта и исчезновения скирмиона для различных размеров примеси: (а) 1 атом, (б) 3 атома, (с) 4 атома, (д) 7 атомов, (е) 8 атомов от ширины трека.

Локализованный на дефекте скирмион может диссоциировать под воздействием тока или из-за тепловых флуктуаций, но он может и коллапсировать во время этого процесса. В устройствах трековой памяти коллапс скирмиона нежелателен, за исключением стадии удаления информации. Поэтому предполагается, что барьер диссоциации для скирмиона, связанного с дефектом, должен быть ниже, чем энергия активации его коллапса. Однако фактическое соотношение барьеров зависит от параметров системы. На рис. 2.10 сравниваются барьеры для отрыва скирмиона и его коллапса на примеси в зависимости

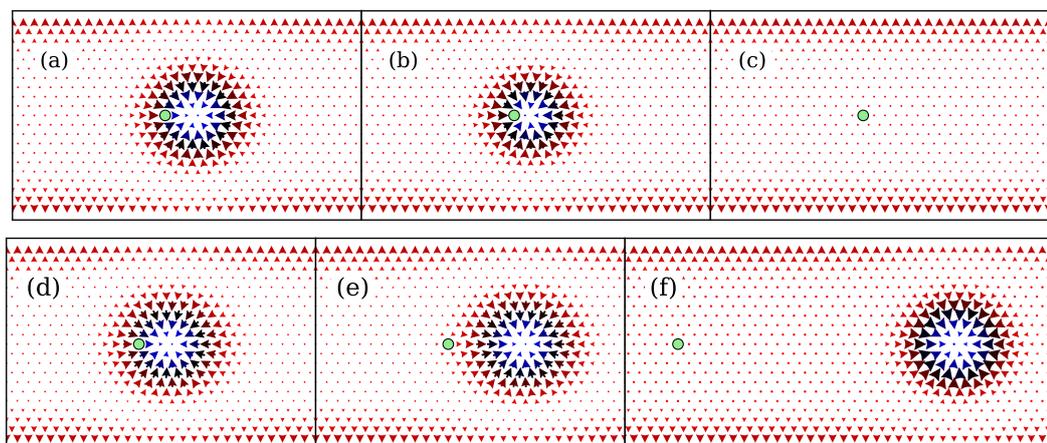


Рис. 2.11: Верхний ряд: Конфигурации вдоль ПМПЭ для коллапса скирмиона на одноатомной немагнитной примеси: (a) начальный минимум, соответствующий скирмиону, локализованному на примеси, (b) седловая точка, (c) конечный минимум, соответствующий ФМ состоянию с примесью. Нижний ряд: Конфигурации вдоль ПМПЭ для отрыва скирмиона от одноатомной немагнитной примеси: (d) начальный минимум, соответствующий скирмиону, локализованному на примеси, (e) седловая точка (f), конечный минимум, соответствующий скирмиону вдали от примеси.

от ширины трека.

Для мелких дефектов (состоящих из одного и трех атомов) ширина трека определяет, какой процесс будет более вероятным: на широких дорожках скирмион с большей вероятностью оторвется от примеси, а узких - скорее разрушится. Между этими процессами существует кроссовер, соответствующая ширина дорожки является наименьшей, применимой в устройствах трековой памяти на скирмионах.

Например, для одноатомной примеси кроссовер происходит при ширине трека, соответствующей $W = 21$. Для этого случая на рис. 2.11 показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ для коллапса и отрыва от дефекта: начальное состояние, седловая точка, и конечное состояние. Но, как показано на рис. (2.10 c, d, e), если дефект большой, барьер для коллапса всегда меньше, чем для отрыва, и при случайных воздействиях, например, вследствие тепловых флуктуаций, скирмионы, вероятно, будут исчезать непосредственно на

дефекте. Используя активационный барьер в качестве приблизительной оценки критического тока, мы предполагаем, что трековая память не будет работать при наличии дефектов, с размерами превышающими ширину доменной стенки скирмиона.

2.3 Внешнее магнитное поле как управляющий параметр для топологических магнитных структур.

Внешнее магнитное поле представляет собой один из наиболее естественных и удобных инструментов управления топологическими магнитными структурами, такими как квазидвумерные скирмионы. Для скирмионов малого радиуса в системах PdFe/Ir(111) метастабильные скирмионы при низких температурах существуют вплоть до полей 7-8 Тл и могут иметь размер менее нанометра [41, 80]. Внешнее магнитное поле влияет на форму, размер и устойчивость скирмионов, а поэтому меняет отклик системы, содержащей скирмионные состояния, на внешнее воздействие. Это позволяет управлять свойствами системы, прикладывая магнитное поле в определенные моменты времени в выбранных точках пространства. Так, экспериментально было показано, что в зависимости от величины магнитного поля, ток с иглы туннельного микроскопа может либо создавать новые скирмионы в заданной точке образца, либо уничтожать уже имеющиеся [68]. Это, в принципе, позволяет записывать и стирать информацию закодированную с помощью скирмионных состояний в устройствах магнитной памяти.

Радиальный профиль скирмиона может быть приближенно описан в виде суперпозиции профилей двух перекрывающихся доменных стенок, расположенных симметрично относительно центра. Зависимость полярного угла от расстояния до центра записывается в виде [41]

$$\Theta(r) = \pi + \sum_{t=\pm 1} \arcsin \left(\tanh \left(\frac{-r + tc}{w/2} \right) \right). \quad (2.2)$$

В этом выражении подгоночные параметры c и w задают положение и ширину доменных стенок. Данная формула эквивалентна (1.19), а параметры связаны с размером скирмиона и толщиной доменной стенки следующим образом:

$c = R_0$, $w = 2\Delta$. Расчеты равновесной структуры скирмиона в решеточной модели (1.22), выполненные для различных значений внешнего магнитного поля, и описание равновесного профиля скирмиона на основе уравнения (2.2) представлены на рис. 2.12.

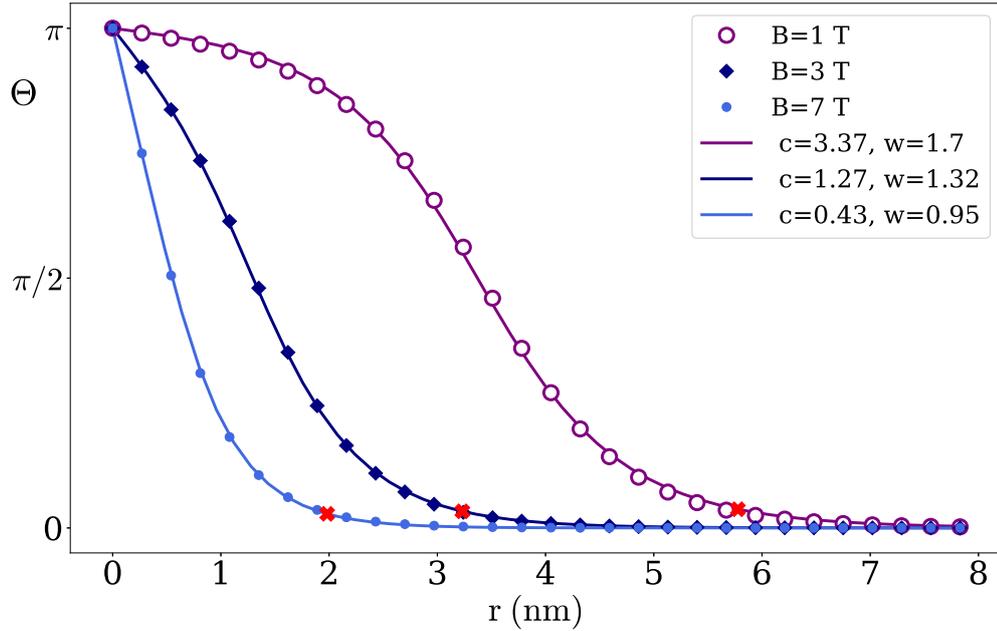


Рис. 2.12: Профили скирмиона в магнитном поле $B = 1, 3$ и 7 Тл и их аппроксимация функцией (2.2). Красные метки обозначают радиус скирмиона.

Оба параметра c и w , наилучшим образом описывающие равновесные значения углов Θ в дискретной модели, убывают с увеличением поля. Радиус скирмиона, обозначенный красной меткой на рисунке, также убывает, когда поле, направленное против магнитного момента в центре скирмиона, увеличивается. За радиус здесь принято значение r при котором $\Theta(r) = 0.1$. Постоянная решетки $a=0.27$ нм.

На рис. 2.13 показана зависимость диаметра скирмиона от внешнего поля для системы PdFe/Ir(111) в дискретной и непрерывной моделях. Соответствующие дискретные магнитные конфигурации в разных полях показаны на вставках. Видно, что с увеличением поля размер скирмиона уменьшается, и дискретная структура решетки должна сильно влиять на его свойства. Тем не менее, расчеты в непрерывной модели, основанные на феноменологическом выраже-

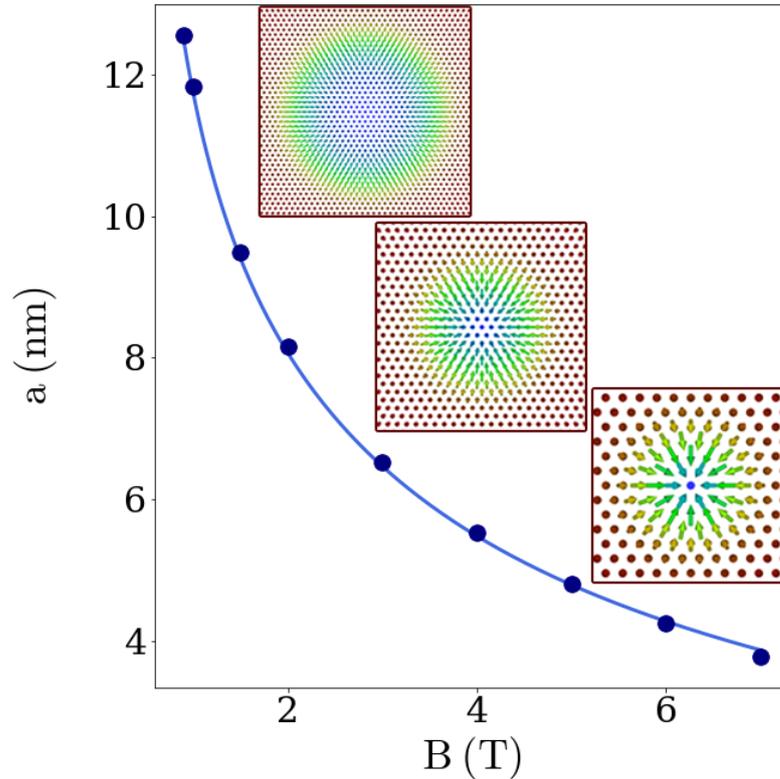


Рис. 2.13: Зависимость диаметра скирмиона от магнитного поля: результаты расчетов (точки) и результат минимизации энергии (1.21) в непрерывной модели с соответствующими дискретной модели параметрами (кривая). На вставках показаны конфигурации скирмионов в магнитном поле $B = 1, 3$ и 7 Тл сверху вниз.

нии для профиля скирмиона [13], достаточно хорошо воспроизводят результаты численных расчетов размера скирмиона в дискретной модели.

Остановимся на некоторых следствиях проведенных расчетов, которые могут наблюдаться экспериментально. Первое связано с наблюдением топологического эффекта Холла в системах с магнитными скирмионами [81, 82]. Топологический эффект Холла связан с рассеянием электронов проводимости на некопланарных скирмионных состояниях вследствие обменного взаимодействия электрона с магнитными моментами топологической структуры. В случае магнитных скирмионов эффект зависит от размера отдельного скирмиона и пропорционален топологическому заряду системы, который определяется концентрацией скирмионов. Если система находится во внешнем магнитном поле,

размер скирмионов и их число убывают с величиной магнитного поля, в результате чего топологический эффект Холла уменьшается. В то же время, обычный эффект Холла, обусловленный силой Лоренца, действующей на электроны проводимости, увеличивается. Обычный и топологический эффект Холла имеют противоположный знак для скирмионов с положительным топологическим зарядом и могут компенсировать друг друга. Для рассматриваемых здесь скирмионов в системе PdFe/Ir(111), как показывают расчеты [70], компенсация может происходить при характерной плотности скирмионов около 10^{11} см⁻². Эти эффекты, могут быть обнаружены экспериментально в сильных магнитных полях.

Другой класс явлений, которые, как следует из проведенных расчетов, можно наблюдать экспериментально, связан с квантово-механическим туннелированием метастабильных скирмионов в ФМ состояние при сверхнизких температурах [71].

Температура, ниже которой туннелирование становится основным механизмом перехода между метастабильным и основным состоянием, определялась на основе теории инстантонов [83]. Частота надбарьерных переходов при этой температуре рассчитывалась на основе ТПС, описанной в предыдущей главе.

На рис. 2.14 на верхней панели пунктирной линией показана зависимость температуры начала туннелирования от внешнего магнитного поля (правая ось), а сплошной – время жизни скирмионного состояния (левая ось). На нижней панели представлена энергия скирмиона и переходного состояния для коллапса скирмиона как функции магнитного поля. В поле $B = 6.4$ Тл время жизни скирмиона при температуре перехода к туннелированию согласно расчетам составляет несколько минут, а при 6.5 Тл оно уменьшается до 10 с. Таким образом, для системы PdFe/Ir(111) согласно нашим расчетам туннелирование скирмионов может наблюдаться, если внешнее магнитное поле составляет около 6 Тл.

Рассмотрим в заключение этого раздела вопрос о влиянии внешнего магнитного поля на связанное состояние скирмиона и немагнитного дефекта атомного масштаба. Как было показано в предыдущем разделе, скирмион отталкивается от немагнитного дефекта и, чтобы создать связанное состояние, он должен преодолеть некоторый энергетический барьер. Однако, если расстояние от дефекта до центра скирмиона примерно равно его радиусу, то образуется связанное со-

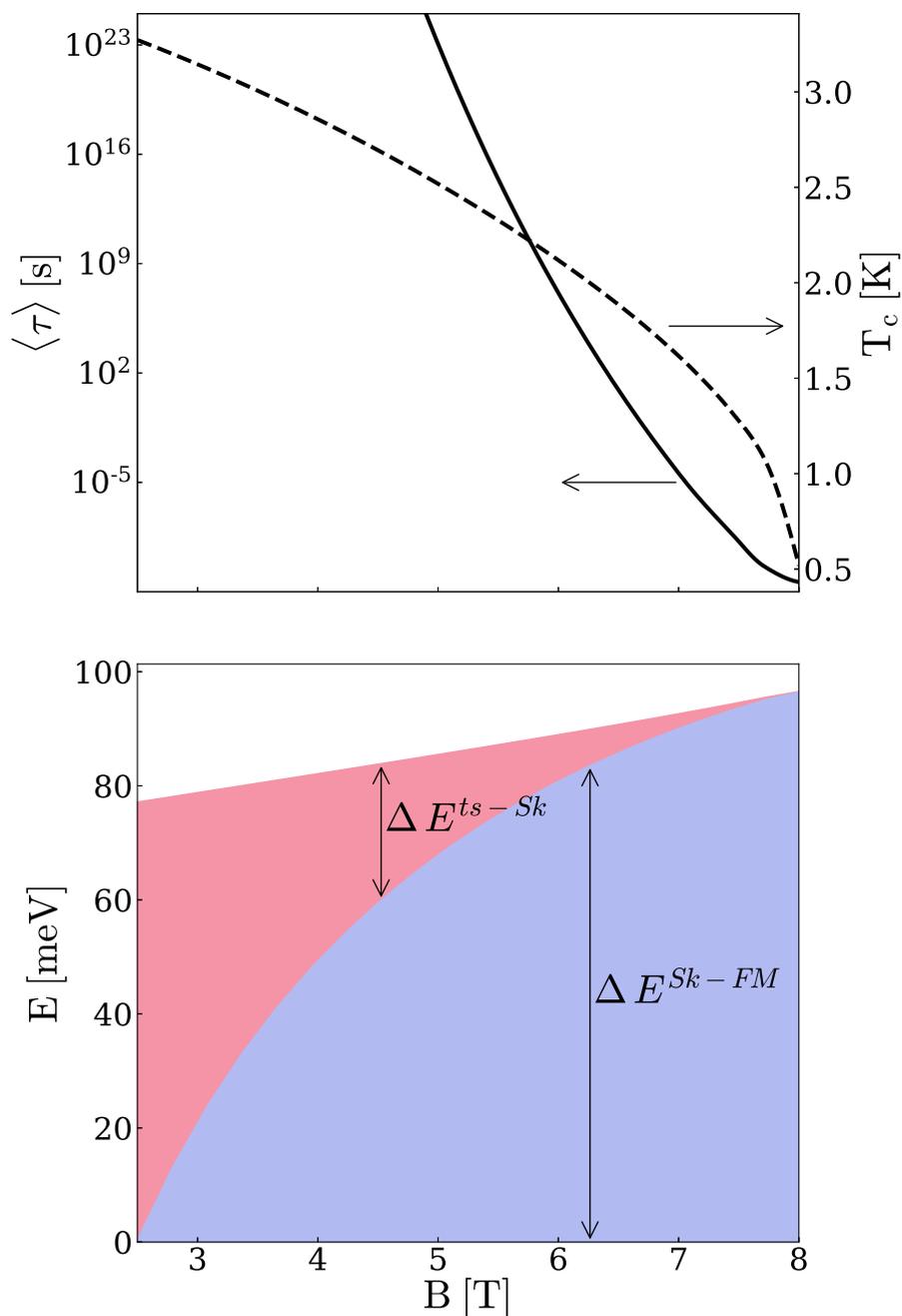


Рис. 2.14: Верхняя панель: температура начала туннелирования, T_c (пунктирная линия, правая ось) и время жизни скирмиона в секундах при этой температуре, τ (сплошная линия, левая ось). Нижняя панель: энергия метастабильного скирмиона по отношению к пространственно однородному ФМ состоянию ΔE^{Sk-FM} и энергетический барьер для коллапса скирмиона ΔE^{ts-Sk} .

стояние скирмион-дефект. Энергетический ландшафт имеет локальный минимум и уже необходимо преодолевать активационный барьер для ухода скирмиона от дефекта (см. рис. 2.7). Равновесные положения дефекта соответствуют ориентации намагниченности в плоскости системы $S_z = 0$ и образуют «кольцо». Соответствующие магнитные конфигурации показаны на рис. 2.15 (а), (с). Такая локализация наблюдалась экспериментально с помощью техники сканирующей туннельной микроскопии [72]. Расчеты в широком диапазоне магнитных полей показали, что для внешнего магнитного поля меньше критического значения B_c существует еще одна возможность локально устойчивой связанной конфигурации, когда дефект находится точно в центре скирмиона, как на рис. 2.15 (b).

Для таких слабых полей намагниченность в центральной части скирмиона практически однородна и противоположна намагниченности в ФМ фазе, однако локальный максимум плотности энергии формируется в центре скирмиона. Согласно проведенному численному моделированию критическое поле составляет $\mu B_c = 0,067J$ для рассматриваемых параметров, соответствующих системе PdFe/Ir(111) [84]. Для полей, больших критического, дефект в центре не является устойчивым положением, и доменная стенка скирмиона притягивается немагнитной дыркой.

Энергетические барьеры для перехода из состояния с дефектом в центре скирмиона в состояние с дефектом на границе были найдены путем расчета ПМПЭ, показанных на рис. 2.16, а. Увеличение внешнего поля приводит к увеличению энергии как начального, так и переходного состояний, но первая растет быстрее, чем вторая. Поэтому энергетический барьер между начальным и конечным состояниями стремится к нулю при $B \rightarrow B_c$, что приводит к неустойчивости центрального положения немагнитного дефекта для высоких полей, см. рис. 2.16, б.

В первом приближении точечный немагнитный дефект можно рассматривать как отсутствие одного магнитного момента. Тогда устойчивые положения дефекта должны соответствовать максимальной плотности энергии внутри скирмиона. Все вклады в энергию метастабильного состояния скирмиона показаны на рис. 2.17 для двух значений магнитного поля ниже и выше критического. Видно, что скирмион стабилизируется взаимодействием ДМ, так как

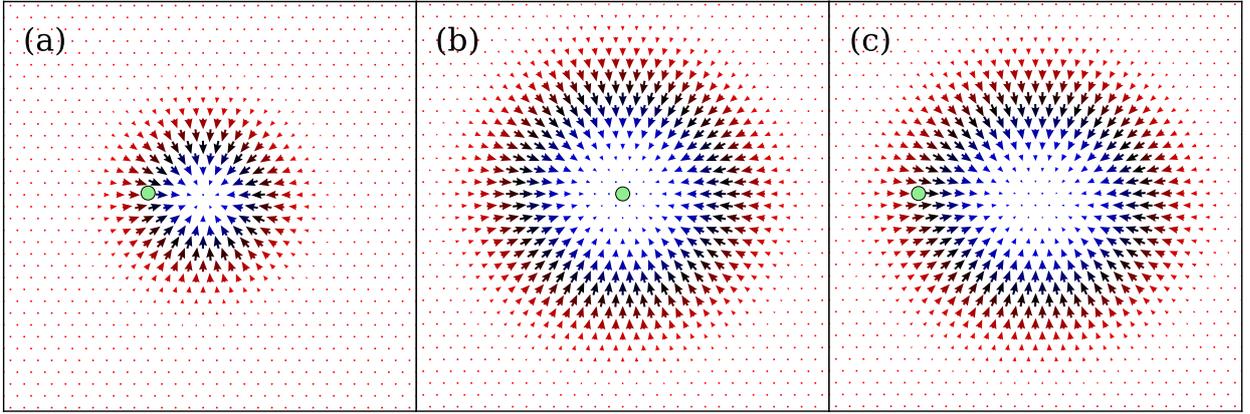


Рис. 2.15: Изолированный скирмион с немагнитным дефектом на границе (а, с) и в центре (b) для $\mu B = 0.093J$ (а) и $\mu B = 0.046J$ (b, с). Состояние с дефектом в центре является метастабильным и исчезает при поле выше критического $\mu B_c = 0.067J$. Состояние с дефектом на границе скирмиона метастабильно до $\mu B = 0.13J$, а скирмион в однородной ФМ фазе локально устойчив вплоть до $\mu B = 0.21J$.

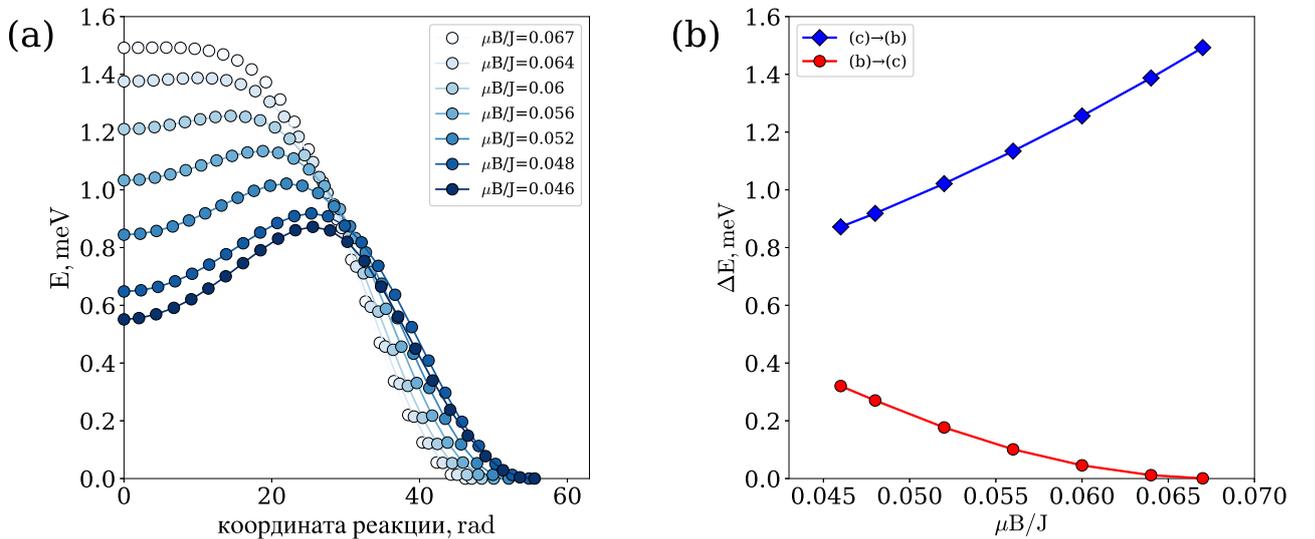


Рис. 2.16: (а) Пути с минимальным перепадом энергии между состояниями с дефектом в центре скирмиона и на его границе для диапазона магнитных полей $0.046J \leq \mu B \leq 0.067J$. Нулевая энергия соответствует скирмиону с дефектом на границе. (b) Энергетические барьеры для переходов из состояния с примесью в центре скирмиона в состояние с дефектом на его границе и обратного перехода в зависимости от магнитного поля.

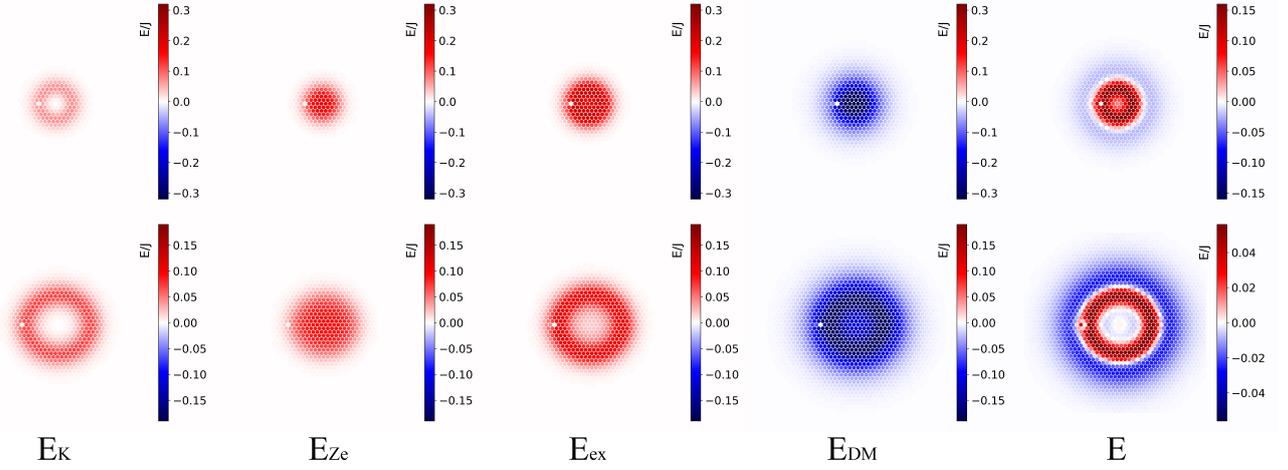


Рис. 2.17: Вклады в энергию на один спин в магнитном поле $\mu B = 0.093$ J (верхний ряд) и $\mu B = 0.046$ J (нижний ряд), столбцы соответствуют различным вкладам в энергию. Положение примеси показано белой точкой.

только этот вклад отрицателен. Дефект на границе скирмиона, действительно, находится в локальном максимуме плотности энергии.

При уменьшении магнитного поля ниже критического значения B_c плотность энергии взаимодействия ДМ в центре скирмиона увеличивается. Тогда вблизи центра появляется второй локальный максимум полной плотности энергии (рис. 2.17, нижний ряд), и удаление магнитного узла в центре скирмиона приводит к большему понижению полной энергии, чем удаление других, близких к центру, магнитных моментов.

Существование двух локальных минимумов энергии ниже порогового значения магнитного поля B_c может привести к тонкой структуре резонансного поглощения энергии, вызванного взаимодействием с током или спиновыми волнами.

Подведем итоги и кратко сформулируем основные **выводы** второй главы. Теория переходного состояния позволяет определять времена жизни магнитных топологических состояний при произвольных температурах. Эти времена служат количественной мерой устойчивости структур, которые могут использоваться в системах трековой магнитной памяти и других спинтронных устройствах. Для скирмиона на магнитной дорожке исследовано два сценария перехода в ФМ состояние: коллапс внутри дорожки и уход через ее границу.

Показано, что активационные барьеры для каждого сценария понижаются при уменьшении ширины дорожки, а то, какой механизм будет основным, зависит от величины внешнего магнитного поля. Рассмотрен вопрос об устойчивости скирмионов в присутствии структурных дефектов атомного масштаба. Найдены барьеры для локализации скирмиона на примеси и распада связанного состояния скирмион-немагнитный дефект. Проведены расчеты устойчивости скирмионных состояний, одновременно учитывающие структурные дефекты и конечную ширину дорожки, на которой находится скирмион. Найдены условия, при которых возможна локализация и отрыв скирмиона от дефекта без его разрушения. Рассмотрен вопрос о внешнем магнитном поле как управляющем параметре для системы с магнитными скирмионами. Получены условия возможного экспериментального наблюдения особенностей топологического эффекта Холла, квантово-механического туннелирования скирмионов в ФМ состоянии, наблюдения тонкой энергетической структуры для скирмионов во внешнем магнитном поле.

Глава 3

Устойчивость и размер магнитных скирмионов

Для использования магнитных скирмионов и других топологических систем в качестве элементов трековой памяти нужно, чтобы их пространственный размер был как можно меньше. Это увеличивает плотность записи информации, скорость передачи данных, снижает энергопотребление, позволяет разрабатывать новые структуры оставаясь на наномасштабе. Вместе с тем, для практической реализации важно, чтобы магнитные состояния были устойчивы при комнатной температуре, а тепловые флуктуации и случайные внешние воздействия не влияли на стабильную работу устройств, в которых они используются. Такие требования, как показывают исследования последних лет, трудно выполнить одновременно, если рассматривать квазидвумерные скирмионные структуры в ферромагнитных материалах. Скирмионы размером несколько нанометров, расчеты которых были представлены во второй главе, экспериментально наблюдались в системах PdFe/Ir(111) в сильных магнитных полях. Устойчивы и экспериментально наблюдаемы они только при низкой температуре порядка 10 К [4, 41, 80, 85]. Стабильные при комнатной температуре скирмионные состояния имеют существенно больший размер и экспериментально наблюдаются в магнитных пленках большей толщины и многослойных структурах [86, 87, 88, 89, 90]. В этих системах важную роль может иметь магнитное диполь-дипольное взаимодействие, которое с одной стороны стабилизирует скирмионы, а с другой – увеличивает их размеры. Это хорошо видно на рис. 1.4, где на рассчитанной энергетической поверхности имеется два минимума, соответствующие скирмионам разного размера. Большие скирмионы стабили-

зируются именно за счет дипольного магнитного взаимодействия. Чтобы избежать увеличения размера скирмионов, используют ферри и антиферромагнитные хиральные среды в качестве носителей скирмионных состояний [91, 92]. Существенный прогресс в этом направлении достигнут и благодаря использованию синтетических антиферромагнетиков, в которых два ФМ слоя разделены немагнитным металлом таким образом, чтобы межслойное обменное взаимодействие между ними было антиферромагнитным. Скирмионы в разных слоях образуют связанное состояние, а поля размагничивания в значительной степени компенсируются. Это позволяет получить структуры размером 10 нм при комнатной температуре [93].

Для ФМ тонкопленочных систем устойчивых скирмионных состояний при комнатной температуре пока не найдено экспериментально. Представляет большой интерес выяснить теоретически, насколько, меняя параметры магнитных материалов, возможно одновременно получить и малый размер структуры, и устойчивость относительно тепловых флуктуаций. Эти вопросы будут рассмотрены в настоящей главе. В первом разделе будет представлена фазовая диаграмма скирмионных состояний, показывающая времена жизни и радиус скирмионов в зависимости от параметров ДМ и анизотропии магнитной среды. Во втором – будет обсуждаться вопрос о роли предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса для поиска устойчивых скирмионов малого размера при комнатных температурах.

3.1 Фазовая диаграмма скирмионных состояний

Будем описывать квазидвумерную магнитную среду на основе дискретной обобщенной модели Гейзенберга (1.22), включающей эффективные параметры обмена J , одноосной анизотропии, ортогональной плоскости системы, K и взаимодействия ДМ D . Магнитное поле будем считать равным нулю, поскольку именно этот случай наиболее интересен для практических приложений. При расчетах будем использовать гексагональную решетку в плоскости, соответствующую системам, в которых скирмионы наблюдались экспериментально [25, 68, 41, 94, 85],

На рис. 3.1 показана фазовая диаграмма системы, полученная путем релак-

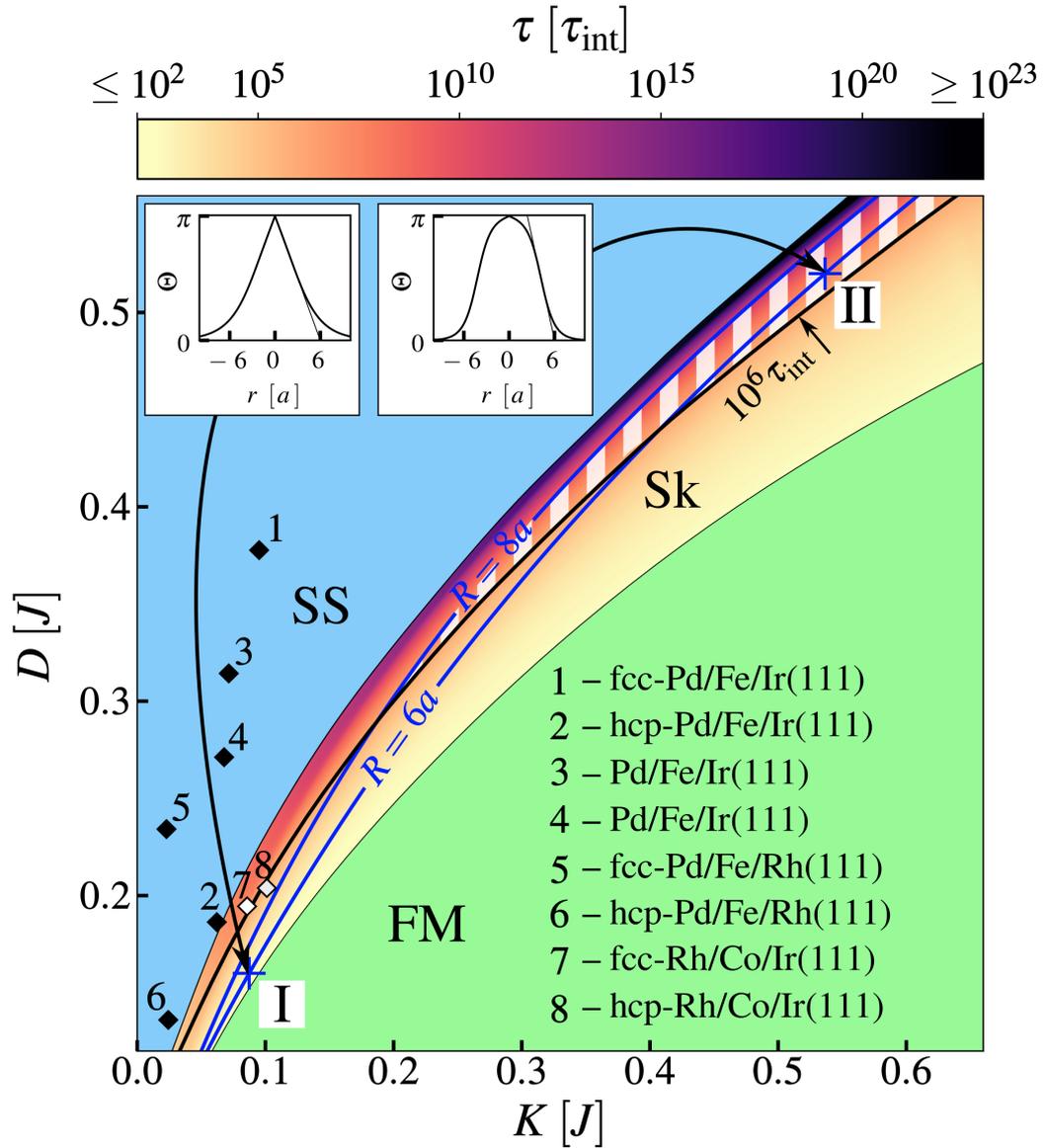


Рис. 3.1: Магнитная фазовая диаграмма для монослоя магнитных моментов на гексагональной решетке.

сация пробного профиля скирмиона до локального энергетического минимума при заданных значениях параметров K/J и D/J . В области SS, обозначенной синим цветом, основное состояние соответствует спиновой спирали, а в области FM (зеленый цвет) единственная устойчивая конфигурация – FM состояние. В секторе, обозначенном Sk, существуют метастабильные изолированные скирмионы в FM окружении. Скирмионные состояния занимают довольно узкую область фазовой диаграммы [35, 95, 96]. Фактически, большинство известных материалов, в которых наблюдаются наноразмерные скирмионы, в отсутствие внешнего магнитного поля находятся в состоянии спиновой спирали и для фор-

мирования скирмионной структуры необходимо включить магнитное поле, перпендикулярное плоскости системы.

Черные и белые ромбы рис. 3.1 указывают на эффективные параметры материала для ультратонких скирмионных систем на основе Fe и Co, имеющиеся в литературе (1 и 2 [27]; 3 [67]; 4 [41]; 5 и 6 [97]; 7 и 8 [85]). Отметим, что в системе Rh/Co/Ir(111) скирмионы размером до 10 нм были обнаружены в отсутствие внешнего магнитного поля [85].

Времена жизни скирмионов были рассчитаны теоретически в рамках гармонического приближения ТПС, изложенного в 1 главе. Расчеты ПМПЭ показали, что механизм исчезновения скирмионов соответствует радиальному коллапсу, рассмотренному во второй главе. Расчет энергии активации для коллапса и предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса позволил оценить времена жизни магнитных скирмионов. Они показаны цветом в секторе Sk в соответствии с цветовой схемой на верхней панели рис.3.1. Времена жизни измерены в единицах собственного времени прецессии $\tau_{\text{int}} = \mu(J\gamma)^{-1}$, где μ и γ - локальный магнитный момент и гиромагнитное отношение соответственно. τ_{int} для обычных 3d магнетиков лежит в фемтосекундном диапазоне. Черная сплошная линия на рисунке соответствует времени жизни $10^6 \tau_{\text{int}}$. При оценке времени жизни магнитных состояний температура задавалась условием $k_B T = 2.6J$, что примерно соответствует комнатной температуре для $J = 10$ мэВ, типичного значения параметра обмена в магнитных пленках толщиной 1-2 атомных слоя [41]. Радиус R равновесных состояний скирмионов был количественно оценен в линейном приближении для формы доменной стенки [98]:

$$R = r_0 - \Theta_0 \left[\frac{d\Theta(r)}{dr} \right]_0^{-1}, \quad (3.1)$$

где $\Theta(r)$ - полярный угол магнитного момента, расположенного на расстоянии r от центра скирмиона, а нижний индекс 0 обозначает точку максимального наклона графика зависимости $\Theta(r)$. Были проведены расчеты для восьми изолиний постоянного R , в диапазоне от $5a$ до $12a$, где a - расстояние до ближайшего соседа в гексагональной решетке. Две изолинии показаны на рис. 3.1 синим цветом. Заштрихованная область на рис. 3.1 соответствует значениям параметров материала, при которых скирмионные состояния имеют радиус $R < 8a$ и

времена жизни $\tau > 10^6 \tau_{\text{int}}$. На вставках показаны профили скирмионов и определение радиуса скирмионов для двух точек, отмеченных I и II, лежащих на одной R -изолинии.

Следует отметить, что только скирмионы, у которых времена жизни больше некоторого характерного лабораторного масштаба времени, могут быть экспериментально обнаружены. Это приводит к эффективному сужению области, в которой скирмионы наблюдаемы, при повышении температуры. Такое сужение часто связывают с зависимостью магнитных характеристик вещества от температуры, но явный учет тепловой активации магнитных переходов в рамках ТПС позволяет объяснить механизм этой зависимости. Например, легко объясняется уменьшение коэрцитивной силы ФМ структур от температуры [99, 21].

Проведенные расчеты, результаты которых представлены на фазовой диаграмме, позволяют провести анализ связи между размером скирмиона R и его устойчивостью, количественной мерой которой является время жизни состояния τ . И R , и τ растут с увеличением взаимодействия ДМ, но уменьшаются при увеличении параметра анизотропии, т.е. обе величины ведут себя одинаково как функции соответствующих параметров материала.

Это согласуется с экспериментально наблюдаемой тенденцией, согласно которой скирмионы большого размера обычно более устойчивы, чем малого. Однако изолинии R и τ пересекаются и можно, двигаясь вдоль изолинии постоянного размера, менять время жизни состояния в широких пределах. Таким образом, устойчивость скирмионов может быть увеличена согласованным изменением параметров материала при сохранении радиуса скирмионного состояния. Действительно, наборы параметров $K_{\text{I}} = 0.09J$, $D_{\text{I}} = 0.16J$ и $K_{\text{II}} = 0.54J$, $D_{\text{II}} = 0.52J$, отмеченные крестиками на фазовой диаграмме рис. 3.1 приводят к одному и тому же равновесному радиусу скирмиона, $R = 6a$. Однако соответствующие оценки времени жизни различаются на пять порядков: $\tau_{\text{I}} = 4.35 \times 10^2 \tau_{\text{int}}$, а $\tau_{\text{II}} = 2,44 \times 10^7 \tau_{\text{int}}$. Из-за пересечения R - и τ -изолиний фактически можно указать область параметров материала, которая соответствует скирмионам с $R < R_{\alpha}$ и $\tau > \tau_{\alpha}$ для заданного промежутка времени τ_{α} и радиуса R_{α} . Такой домен с $\tau_{\alpha} = 10^6 \tau_{\text{int}}$ и $R_{\alpha} = 8a$ выделен штриховкой на рис. 3.1.

Отметим, что магнитный профиль скирмиона не сохраняется на R -

изолиниях. В частности, для набора параметров I он имеет форму стрелки, а для набора II приобретает форму, напоминающую магнитный пузырь (см. вставки на рис. 3.1). При заданном размере скирмиона устойчивость пузырьковидных скирмионов в целом выше, чем у стрелообразных скирмионов. Это наблюдение важно для практической реализации долгоживущих скирмионов нанометрового масштаба при комнатной температуре.

Чтобы выяснить физическую причину различных времен жизни скирмионов одного размера, рассмотрим отдельно результаты расчетов энергии активации коллапса ΔE и предэкспоненциального фактора τ_0 в законе Аррениуса для времени жизни магнитного состояния.

3.2 Энергетические барьеры и предэкспоненциальный фактор

Энергетический барьер для коллапса ΔE находился как разность максимальной энергии вдоль ПМПЭ и энергии скирмиона в равновесном состоянии. Изменение ΔE вдоль изолиний постоянного радиуса скирмиона показано на рис.3.2. Для всех рассмотренных значений R барьер монотонно растет по мере согласованного увеличения K/J и D/J , т.е. когда магнитный профиль скирмиона постепенно меняется от «стрелки» к «пузырьку». Разложение энергии активационного барьера на отдельные компоненты, соответствующие различным взаимодействиям (см. рис.3.2 **b**), показывает, что вклад взаимодействия ДМ всегда положителен, вклад гейзенберговского обмена и магнитной анизотропии – отрицательный. Это согласуется с другими расчетами коллапса скирмионов [40, 100, 96], выполненными для конкретных материалов в присутствии внешнего магнитного поля. Хотя все вклады монотонно возрастают по абсолютной величине вдоль R -изолинии и в значительной степени компенсируют друг друга, баланс между ними изменяется, что приводит к возрастанию барьера.

Возрастание энергетического барьера вдоль R -изолиний можно объяснить, если посмотреть на изменение магнитных состояний вдоль ПМПЭ: сначала происходит симметричное сжатие структуры, а потом, когда остается всего несколько магнитных моментов в неколлинеарной структуре, происходит их

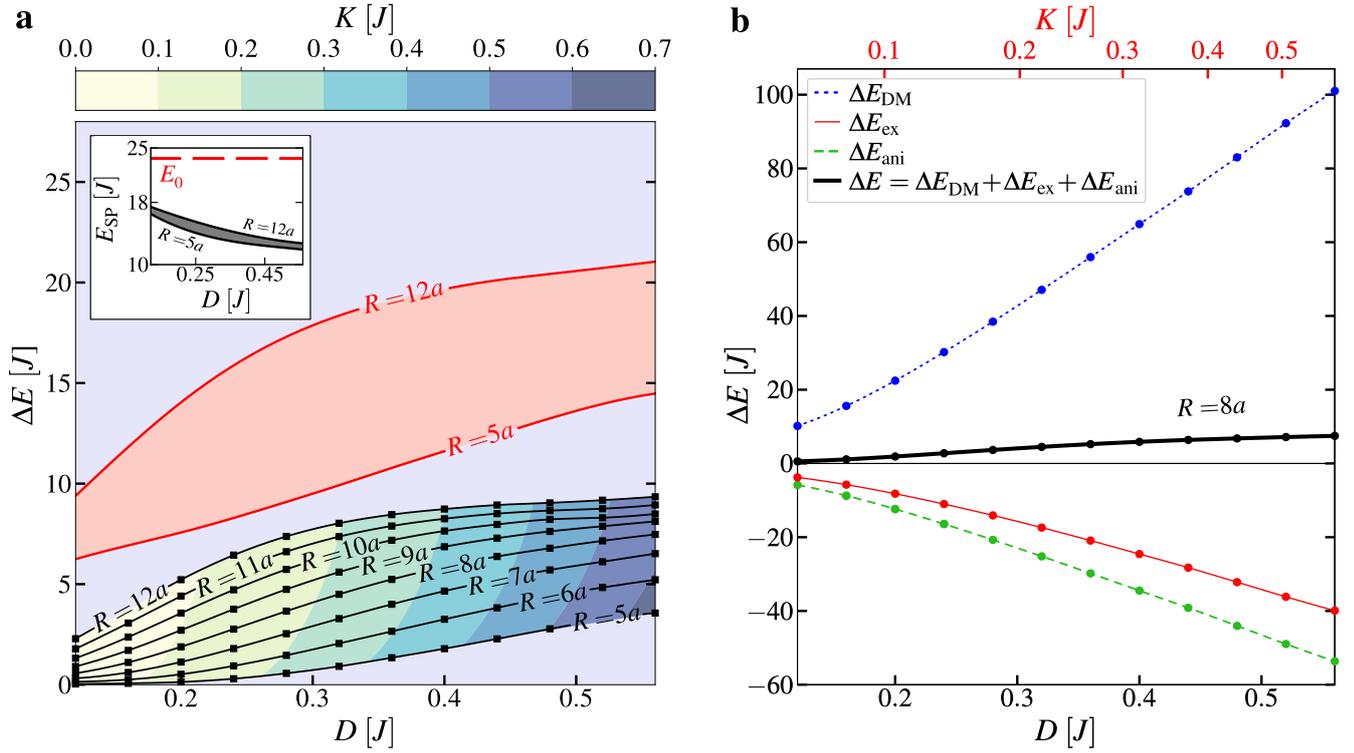


Рис. 3.2: Результаты расчета энергии активации для коллапса скирмиона. а: Изменение энергетического барьера ΔE для коллапса скирмиона в ФМ-состояние (черные сплошные линии) по нескольким изолиниям постоянного радиуса R . Цвет соответствует величине параметра приведенной анизотропии. На вставке показана зависимость энергии в седловой точке относительно ФМ состояния от приведенного параметра взаимодействия ДМ вдоль изолиний постоянного R . б: Вклады разных взаимодействий в энергию активации вдоль изолинии $R = 8a$.

переворот и неколлинеарная структура исчезает [44, 40, 19]. Увеличение числа вовлеченных в процесс переворота магнитных моментов способствуют увеличению соответствующего энергетического барьера. Это согласуется с тем, что скирмионы большего размера имеют более высокий энергетический барьер для коллапса. С другой стороны, общее вращение спинов, участвующих в радиальном коллапсе, можно увеличить без изменения размера скирмиона, просто сделав ядро скирмиона больше. Это изменение магнитного профиля скирмиона, приводящее к увеличению энергетического барьера, действительно реализуется вдоль изолинии радиуса. Поскольку размер ядра скирмиона не может превышать диаметр скирмиона, можно ожидать, что рост барьера остановится на определенном уровне для данного радиуса скирмиона. Рис. 3.2 показывает, что

увеличение барьера действительно становится слабее при больших значениях K/J и D/J , соответствующих пузырьковидным скирмионам, для всех рассмотренных радиусов скирмионов.

Иногда, учитывая что радиус неколлинеарной скирмионной структуры становится в переходном состоянии очень мал, его энергию оценивают по энергии топологического солитона, в системах, где присутствует только обменное взаимодействие [58]. Энергия такого солитона в непрерывной модели не зависит от его размера, а сам размер может быть сделан сколь угодно малым.

Иногда, учитывая что радиус неколлинеарной скирмионной структуры становится в переходном состоянии очень мал, ее энергию оценивают по энергии топологического солитона в системах, где присутствует только обменное взаимодействие [58]. Энергия такого солитона E_0 в непрерывной модели не зависит от его размера, а сам размер может быть сделан сколь угодно малым. В то же время топологический заряд q (2.1) остается равным 1. Разность между энергией E_0 и энергией равновесного состояния скирмиона находится в пределах розовой области для всех радиусов скирмионов от $5a$ до $12a$ на рис. 3.2, а. Для энергии активации коллапса тогда используется оценка $E_0 - E_{\min}$ [101, 13]. Расчеты энергии E_0 в рамках дискретной модели на двумерной гексагональной решетке дают величину $4\sqrt{3}\pi J$ [102], которая существенно больше энергии системы в седловой точке, вычисленной как максимальная энергия вдоль ПМПЭ (см. вставку на рис. 3.2, а). Таким образом, приписывание энергии E_0 реальной структуре в переходном состоянии дает завышенную величину барьера и может привести к ошибкам при количественном предсказании времени жизни скирмиона.

Увеличение энергетического барьера вдоль R -изолиний частично объясняет, почему пузырьковидные скирмионы более устойчивы, чем стрелковидные [96]. Однако как видно на рис. 3.2, даже для самого большого из рассматриваемых здесь скирмионов ($R = 12a$), барьер не превышает $10J$. Объяснить устойчивость скирмионов малого размера при комнатной температуре исключительно за счет такого барьера, учитывая, что $J \approx 10\text{meV}$, невозможно [13]. Здесь дополнительно необходимо исследовать изменение предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса при движении вдоль изолинии постоянного размера.

Результаты расчетов предэкспоненциального фактора τ_0 в законе Аррениуса (1.23), полученные в рамках гармонического приближения ТПС (ГТПС), показаны на рис. 3.3. Префактор τ_0 сильно зависит от параметров материала и показывает устойчивый рост вдоль изолиний радиуса скирмиона при увеличении K/J и D/J . Такое поведение τ_0 усиливает стабилизирующий эффект от роста энергетического барьера для скирмионов, имеющих форму пузырьков. Большое изменение τ_0 при изменении параметров материала согласуется с утверждением о том, что приближение постоянного префактора может быть неприменимо для оценки времени жизни скирмиона [19, 103, 104, 67]. Отметим, что диапазон изменения τ_0 на рис. 3.3 может составлять двадцать порядков величины в пределах выбранной области параметров материала. Эти огромные изменения сопоставимы с данными, полученными экспериментально для скирмионов в системе $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [105].

Анализ результатов, полученных для различных R -изолиний, показывает чувствительность τ_0 к радиусу скирмиона. При фиксированном D/J префактор растет с R , что соответствует увеличению времени жизни больших скирмионов (см. вставку на рис. 3.3). Зависимость τ_0 от R усиливается с увеличением приведенного взаимодействия ДМ D/J . О R -зависимости префактора в законе Аррениуса указывалось в работе [103], но для рассмотренного там случая изменение размера скирмиона было вызвано внешним магнитным полем, а не изменением параметров материала. Резкое изменение префактора связано с энтропийными эффектами [103, 104, 105, 67], которые определяются детерминантами гессианов энергии в седловой точке и в минимуме согласно уравнению (1.43). Детерминанты могут быть вычислены как произведение собственных значений гессиана, которые определяют энергетические спектры магнитных возбуждений в седловой точке и минимуме на энергетической поверхности.

На рис. 3.4 показано, как меняются собственные числа гессиана энергии вдоль одной из R -изолиний. На вставках представлены магнитные конфигурации при смещении вдоль соответствующих собственных векторов. В переходном состоянии спектр магнитных возбуждений лишь незначительно отличается от спектра невозмущенной ФМ-системы, поскольку размер неколлинеарной области в седловой точке составляет всего несколько постоянных решетки (см. вставки на рис. 3.4 **a**). В частности, только несколько мод, локализованных в

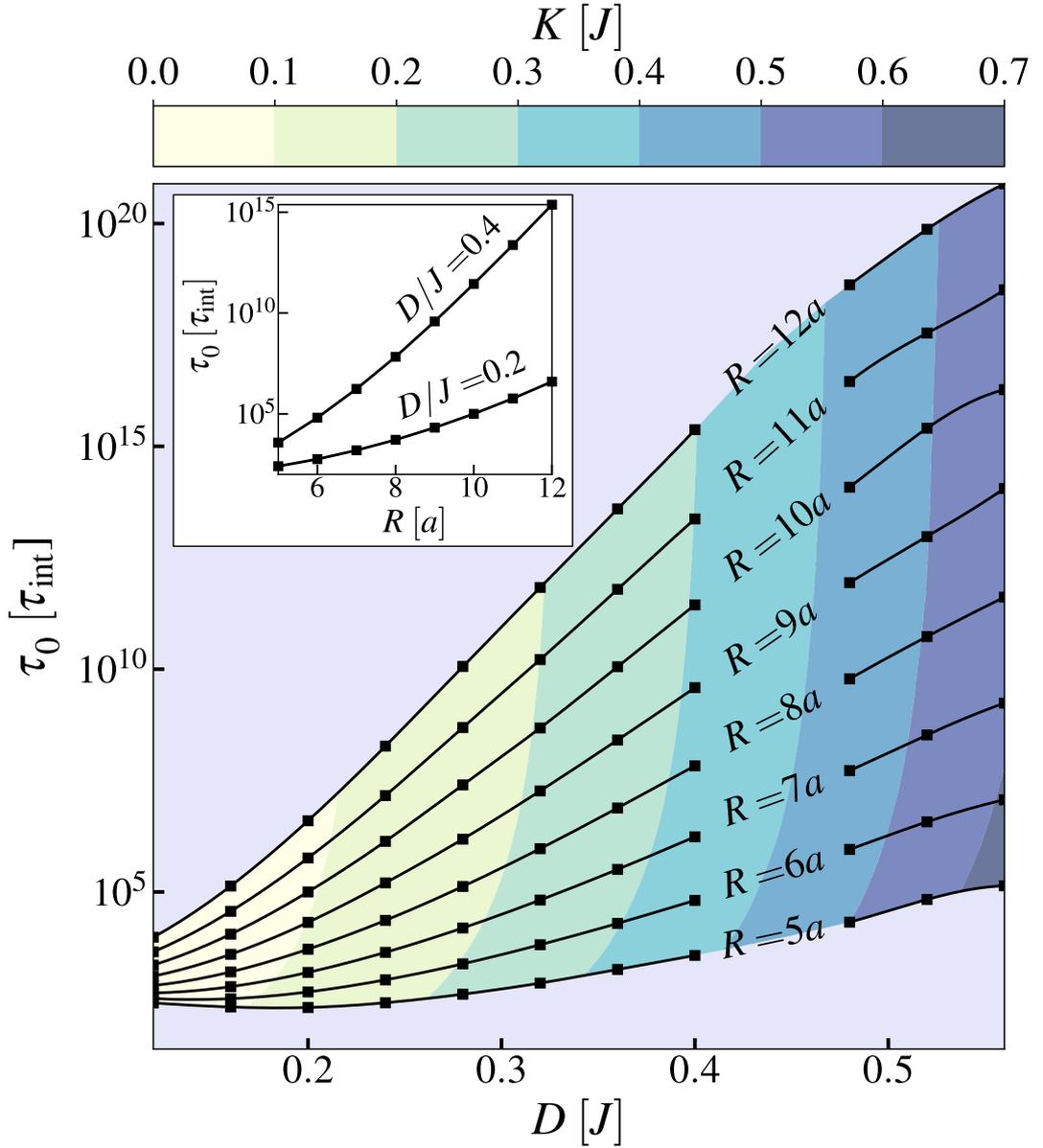


Рис. 3.3: Результаты расчета предэкспоненциального фактора в рамках ГТПС. Изменение предэкспоненциального множителя в законе Аррениуса τ_0 вдоль нескольких изолиний радиуса скирмиона R . Цвет соответствует значению параметра приведенной анизотропии K/J . На вставке показана зависимость τ_0 от R для двух значений D/J .

этой области, находятся в энергетической щели, обусловленной анизотропией, $\varepsilon_{\text{gap}} = 2K$, причем количество таких мод не меняется при изменении параметров материала.

Напротив, присутствие равновесного скирмиона может вызвать значительные изменения в спектре возбуждений системы [106, 107, 108, 109]. Помимо

режимов, соответствующих трансляции скирмиона в плоскости, вращению его ядра и изменению радиуса, называемого «дыхательной» модой скирмиона, в энергетической щели появляется всё больше локализованных мод, описывающих различные деформации скирмиона, при которых равновесный радиус скирмиона остается неизменным (см. рис. 3.4 б). Эти режимы деформации можно описать как периодические модуляции локального радиуса скирмиона вдоль азимутального направления.

При фиксированных параметрах магнитного материала деформация с большим количеством периодов модуляции по периметру скирмиона соответствует большему собственному значению гессиана. С другой стороны, энергия каждой моды деформации монотонно убывает вдоль R -изолинии при увеличении K/J и D/J . В результате отношение детерминантов в (1.43) может измениться очень сильно. Увеличение количества локализованных мод в магнетонной щели и их смягчение, характерные для скирмионного состояния, в переходном состоянии не происходят. Это увеличивает разницу энтропии между состоянием скирмиона и переходным состоянием, которое в свою очередь приводит к большим значениям предэкспоненциального множителя τ_0 для скирмионов пузырьковидной формы.

Перейдем теперь к результатам расчета времен жизни скирмионных состояний. На рис. 3.5 представлено изменение времен жизни τ изолированных скирмионов при движении вдоль изолиний постоянного радиуса. Абсолютные значения для τ были получены при температуре $T = 300$ К и типичных значениях обменного параметра J и величины магнитного момента μ : $J = 10$ мэВ и $\mu = 3\mu_B$, где μ_B - магнетон Бора [41]. Сильное изменение префактора вдоль R -изолинии (рис. 3.3) определяет большие времена жизни скирмиона, которые могут превышать десятки лет при достаточно больших значениях K/J и D/J . Отметим, что диаметр рассматриваемых скирмионов не превышает $24a$, что соответствует 6.5 нм для магнитных пленок, выращенных на поверхности Ir (111) [25]. Следовательно большие времена жизни скирмионов можно получить и при меньших значениях параметров ДМ и анизотропии, увеличивая размер скирмиона, но оставаясь в пределах наномасштабного диапазона.

Чтобы подчеркнуть важность аккуратного расчета предэкспоненциального фактора для стабилизации наноразмерных скирмионов при комнатной темпе-

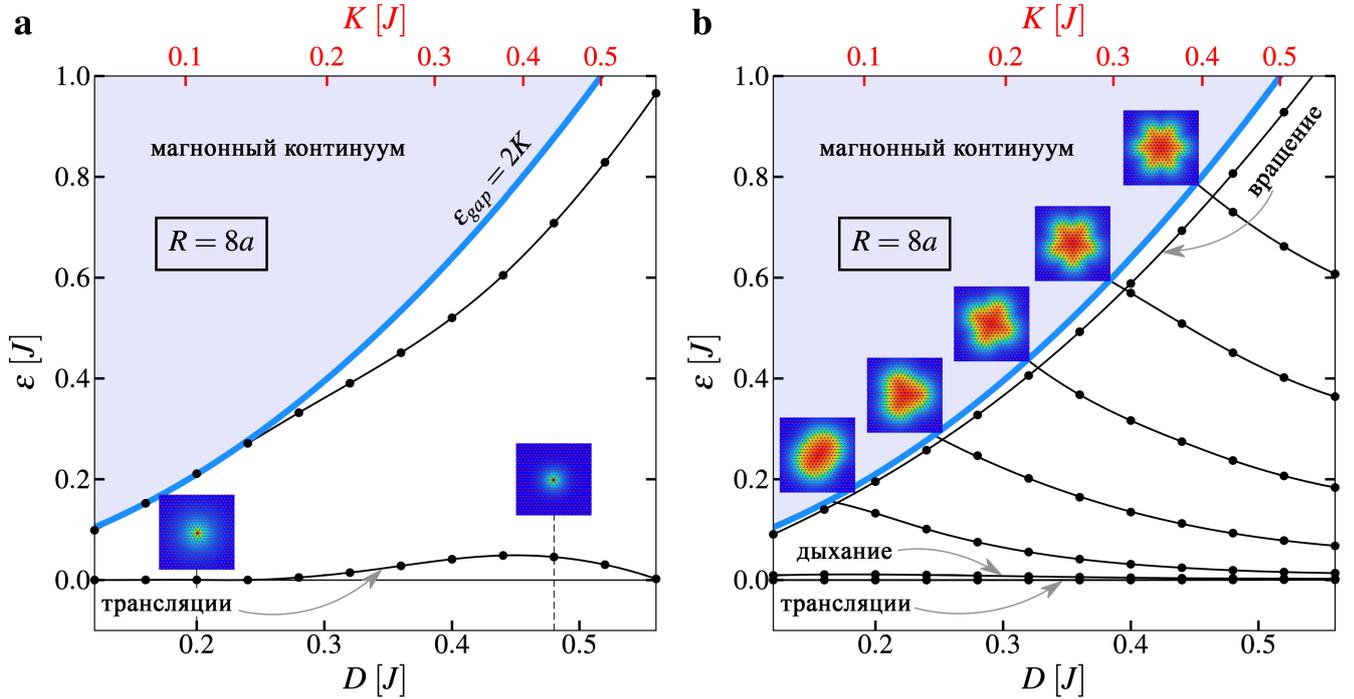


Рис. 3.4: Изменение спектра магнитных возбуждений в переходном состоянии (а) и в скирмионном минимуме (б), вдоль изолинии постоянного радиуса равновесного скирмиона $R = 8a$. Синие линии показывают нижнюю границу непрерывной области спектра, $\varepsilon_{\text{gap}} = 2K$. Собственные значения, соответствующих локализованным модам, показаны черными сплошными линиями. На вставках показаны магнитные конфигурации седловой точки (а), и режимы деформации скирмионов (б). Цвет на вставках указывает на перпендикулярную плоскости системы компоненту магнитных моментов (красный \leftrightarrow вверх, синий \leftrightarrow вниз). Отрицательное собственное значение гессиана в седловой точке на рисунке а не показано.

ратуре, времена жизни были также рассчитаны с использованием обычно применяемого приближения постоянного префактора. Для каждого радиуса скирмиона значение τ_0 , вычисленное при $D/J = 0.12$, использовалось для оценки времени жизни на всей R -изолинии. Для $D/J = 0.12$ величина τ_0 изменяется от 30 пс для $R = 5a$ до 1 нс для $R = 12a$, что фактически находится в диапазоне типичных значений префактора, используемых в литературе для расчета частоты термально активированных магнитных переходов [100, 110, 111, 112, 113]. Значения времени жизни скирмиона, рассчитанные с этими значениями τ_0 , на-

ходятся в розовой области на рис. 3.5. Поскольку в этом случае предполагается, что префактор остается постоянным вдоль каждой R -изолинии, небольшое увеличение времени жизни происходит из-за увеличения энергетического барьера. Это увеличение времени жизни несущественно по сравнению с тем, что предсказывает ГТПС. Относительно небольшое увеличение энергетического барьера, но большое изменение предэкспоненциального множителя дополнительно иллюстрируется графиками Аррениуса для двух точек вдоль изолинии $R = 12a$ (см. вставку на рис. 3.5): графики имеют близкие наклоны, но пересекают вертикальную ось на разных уровнях.

Возможность получить большие времена жизни наноразмерных скирмионов связана с разницей спектров магнитных возбуждений в переходном состоянии и в локальном минимуме, соответствующем равновесному скирмионному состоянию. Сильное изменение предэкспоненциального фактора в выражении для времени жизни скирмионных состояний при движении вдоль изолиний радиуса R имеет место для всех равновесных размеров скирмиона, рассмотренных выше. Однако для скирмионов большего размера возрастает число периодов модуляции радиуса вдоль границы. Это приводит к более сильному изменению τ_0 по R -изолиниям, соответствующим большим радиусам скирмионов (рис. 3.3). Возможность введения большего числа локализованных мод в магнитную щель за счет увеличения размера скирмиона также объясняет чувствительность префактора к радиусу скирмиона.

Возникновение локализованных на скирмионе мод магнитных возбуждений и их нескомпенсированное смягчение являются первопричинами большого изменения префактора вдоль R -изолинии. Чтобы получить оценку этих эффектов, рассмотрим изолированный скирмион как композицию из ядра, внешнего ФМ-домена и доменной стенки (ДС), разделяющей ядро и внешний домен. В этом представлении преобразование формы скирмиона вдоль R -изолинии можно интерпретировать как изменение ширины ДС. При этом более широкие ДС соответствуют скирмионам с профилем намагниченности в виде стрелки, а более тонкие ДС соответствуют скирмионам с профилем в виде пузырьков (см. вставки на рис. 3.1). С другой стороны, деформации скирмионов можно рассматривать, как поперечные флуктуации ДС, параметризованные гармониками Фурье. Пренебрегая кривизной ДС и взаимодействием ДМ, можно записать

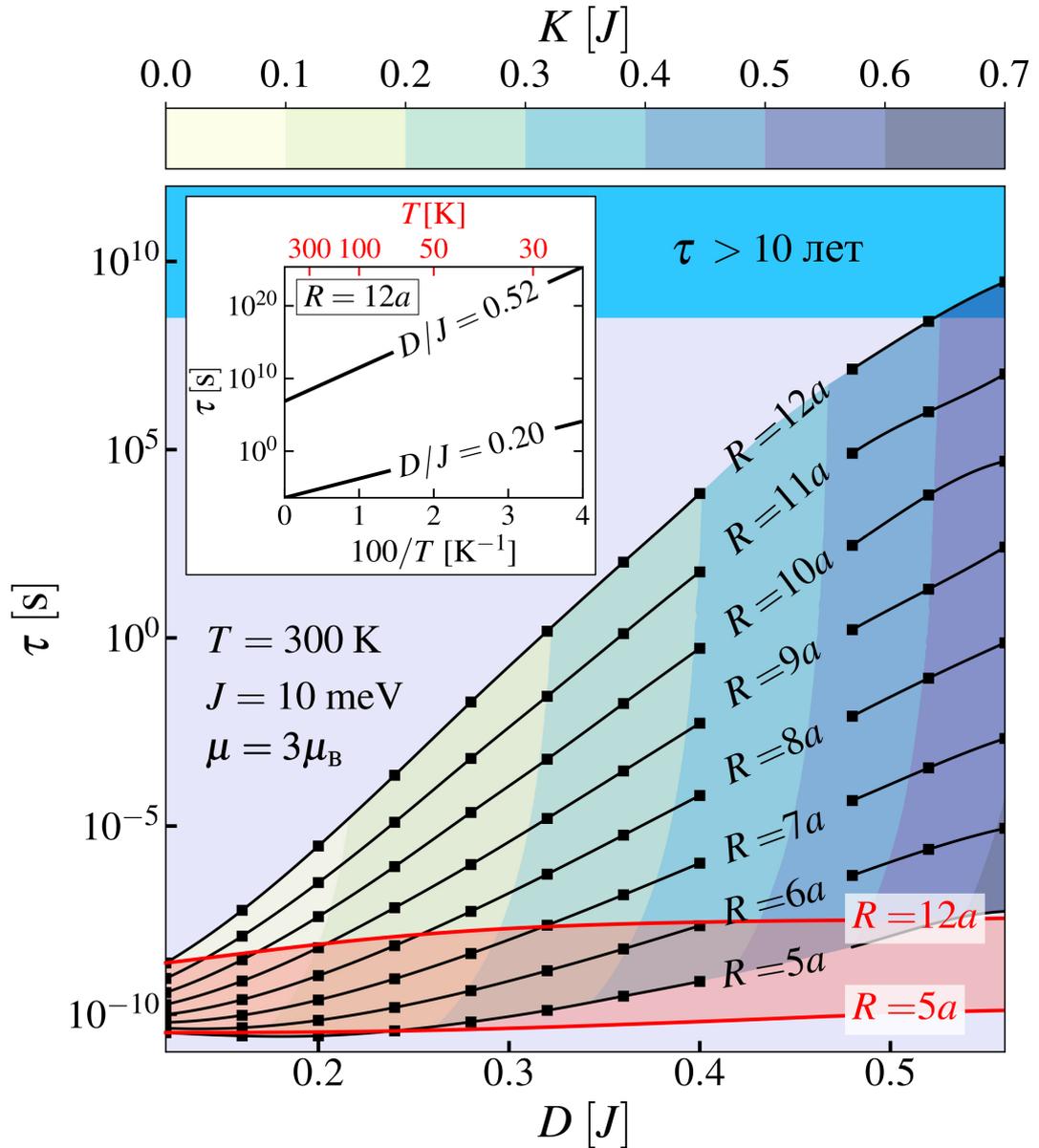


Рис. 3.5: Результаты расчета времени жизни скирмиона. Изменение рассчитанного в ГТПС времени жизни скирмиона τ (черные сплошные линии) вдоль нескольких изолиний постоянного радиуса R . В расчетах использовались следующие значения параметров модели: $T = 300$ К, $J = 10$ мэВ, $\mu = 3\mu_B$. Цвет соответствует распределению параметра приведенной анизотропии K/J . Все рассчитанные значения, обозначенные закрашенными квадратами, соответствуют метастабильным скирмионам. Основное состояние – пространственно однородное ФМ. На вставке показан график Аррениуса для двух значений D/J на изолинии $R = 12a$. Величина времени жизни, рассчитанная в приближении постоянного префактора Аррениуса, находится в розовой области для всех радиусов скирмионов от $5a$ до $12a$. Голубая область соответствует временам жизни скирмионов более десяти лет.

энергию деформации ε_n , связанную с n -й гармоникой, в виде [114]:

$$\varepsilon_n = \frac{6\pi^2 a^2 J}{L^2} n^2, \quad (3.2)$$

где L -длина ДС [102].

Тогда количество гармоник N в магнотной щели определяется наибольшим n , для которого $\varepsilon_n < \varepsilon_{\text{gap}} = 2K$:

$$N \propto \frac{L}{\Delta}, \quad (3.3)$$

где $\Delta \sim a\sqrt{J/K}$ - ширина ДС. N дает качественную оценку количества мод, локализованных на скирмионе с периметром $2\pi R = L$. Оно монотонно увеличивается по мере того, как ДС становится тоньше, что объясняет, почему все больше мод локализуются на скирмионе по мере того, как он постепенно меняет свою форму вдоль R -изолинии, образуя пузырьковидную структуру. Уравнение (3.2) основано на предположении о прямой некиральной ДС и поэтому не описывает смягчения мод магнитных возбуждений на рис. 3.4. Этот эффект, однако, можно получить даже в рамках модели прямой ДС, если включить взаимодействие ДМ в гамильтониан и учесть согласованное увеличение K и D . В частности, энергия мод поперечной деформации ДС действительно уменьшается, когда изменение K и D соответствует движению вдоль изолиний радиуса скирмиона (рис. 2 в [102]).

Из проведенных расчетов следует, что устойчивость наноразмерных скирмионов при комнатной температуре может быть достигнута за счет исключительно большого предэкспоненциального фактора τ_0 , независимо от высоты энергетического барьера ΔE , отделяющего скирмионное состояние от основного, ФМ. Большие значения префактора указывают на существование и важную роль энтропийных эффектов [105, 67, 104, 103]. Таким образом, концепция достижения большого времени жизни скирмионов за счет повышенных энтропийных барьеров, на которую независимо указывалось в работах [104, 103], оказывается основной для скирмионов размером менее 10 нм при комнатной температуре. Главной стратегией для создания больших энтропийных барьеров, стабилизирующих состояние скирмиона, является формирование как можно большего количества локализованных мод магнитных возбуждений, соответ-

ствующих деформациям границы, поскольку эти режимы приводят к нескомпенсированному увеличению энтропии равновесного скирмионного состояния. Для наноразмерных скирмионов при нулевом внешнем магнитном поле достаточное количество локализованных мод реализуется, когда магнитный профиль скирмиона имеет форму пузырька, т.е. когда параметры взаимодействия ДМ D и анизотропии K достаточно велики по сравнению с параметром обмена Гейзенберга J . Этот режим трудно достижим в переходных металлах, если предположить, что J принимает значение порядка 10 мэВ. Однако увеличение D/J и K/J может быть фактически получено за счет уменьшения параметра гейзенберговского обмена. Например, довольно большие значения $D/J = 1.3$ и $K/J = 0.3$ были достигнуты в системе [RhPd/2Fe/2Ir] благодаря относительно низкому значению $J = 2$ мэВ [115]. Отметим, что параметр J следует понимать как эффективную константу для систем с фрустрированным обменом. Эффективный обменный параметр хорошо воспроизводит низкоэнергетические возбуждения системы, но может не описывать состояния, далекие от основного состояния [27], и, следовательно, малое значение J не обязательно означает низкую температуру магнитного упорядочения [116], особенно для анизотропных систем [117].

Для создания устойчивых наноразмерных скирмионов требуется получить системы с заданными значениями эффективных магнитных параметров, описывающих различные взаимодействия в выражении (1.1). Настройка магнитных взаимодействий может быть достигнута за счет различных механизмов. Например, взаимодействие ДМ может быть индуцировано на границах раздела между ферромагнетиком и тяжелым металлом с сильным спин-орбитальным взаимодействием [118] или графеном [119], а так же контролироваться заполнением $3d$ -зоны в слабоферромагнитных изоляторах [120]. Тонкие пленки из $3d$ элементов, помещенные между переходными $4d$ и $5d$ металлами, позволяют независимо, в широком диапазоне, варьировать параметры J , D и K за счет состава слоев, легирования и смешивания на интерфейсах $4d/3d$ и $5d/3d$. Возможность такой локальной настройки магнитных взаимодействий посредством гибридизации на интерфейсах $3d/4d$ и $3d/5d$ была теоретически предсказана на основе расчетов в рамках теории функционала плотности для структуры [Rh_xPd_{1-x}/Fe/Ir] [115].

Имеются данные и о больших вариациях взаимодействия ДМ для систем [Rh/Co/Pt] [121]. Настройка интерфейса магнитных взаимодействий - это локальный эффект, основанный на гибридизации состояний, которая не зависит от особенностей многослойной структуры. Поэтому расчеты должны хорошо описывать ультратонкие пленки и многослойные системы. Возможность варьирования обменных взаимодействий, действительно, была продемонстрирована расчетами ультратонких пленок на основе Co [85]. Таким образом, изменение состава пленочных структур $4d/3d/5d$, которые еще предстоит исследовать экспериментально, может позволить при нулевом поле достичь режима изолированных скирмионов устойчивых при комнатной температуре.

Отметим, что в приведенных выше расчетах использовался простейший вид гамильтониана гейзенберговского типа. Дополнительные члены в гамильтониане, описывающие более сложные взаимодействия, могут повлиять на время жизни скирмионов и других топологических состояний. Например, фрустрация магнитных парных взаимодействий [27], а также обмен более высокого порядка [26] могут увеличить энергетический барьер, защищающий скирмион от коллапса. Обменные взаимодействия за пределами ближайших соседей могут влиять на префактор в законе Аррениуса [19, 122]. Обменные фрустрации и взаимодействия более высокого порядка могут являться дополнительным источником повышения устойчивости скирмионов [27, 26, 19, 122]. Тем не менее, принципы стабилизации скирмионов, полученные выше с использованием простейшего гамильтониана, описывающего киральные скирмионы в нулевом приложенном магнитном поле, являются довольно общими и могут быть применены также к системам с дополнительными магнитными взаимодействиями. Это относится к увеличению времени жизни за счет использования большой разницы между спектрами магнитных возбуждений в переходном и в скирмионном состоянии.

Сформулируем **выводы** третьей главы. Устойчивость скирмионов в ультратонких ФМ пленках относительно тепловых флуктуаций была исследована в рамках ГТПС на основе атомистического спинового гамильтониана. Расчеты показали, что наноразмерные скирмионы могут быть устойчивы вплоть до комнатной температуры, если доменная граница, охватывающая ядро скирмиона, будет достаточно тонкой по сравнению с размером скирмиона, а магнитный профиль будет иметь форму пузырька. Такой профиль обеспечивает большое

количество мод магнитных возбуждений в магнитной щели, тем самым создавая высокий энтропийный барьер для коллапса скирмиона и обеспечивая длительное время жизни скирмиона из-за большой предэкспоненты в законе Аррениуса. Режим высоких энтропийных барьеров для наноразмерных скирмионов может быть достигнут за счет увеличения магнитной анизотропии совместно с взаимодействием ДМ или за счет уменьшения гейзенберговского обменного взаимодействия.

Заключение

Возможность использования скирмионов и других топологически защищенных структур для устройств трековой компьютерной памяти накладывает жесткие условия на свойства соответствующих магнитных состояний. Эти состояния должны иметь малый пространственный размер, быть устойчивы относительно тепловых флуктуаций при комнатных температурах, легко менять пространственное положение под действием малых токов. Кодированную с их помощью информацию необходимо уметь быстро записывать, стирать и считывать. Все эти требования делают ключевой проблемой теоретического расчета времен жизни топологических магнитных состояний при учете тепловых флуктуаций, дефектов пространственной структуры, ограниченной геометрии системы. Именно времена жизни и частоты магнитных переходов являются количественной мерой устойчивости топологических магнитных структур, которую необходимо контролировать при разработке любых приложений.

В диссертации для расчета времен жизни магнитных состояний используется теория переходного состояния (ТПС) для магнитных степеней свободы, которая предполагает построение многомерной энергетической поверхности системы, поиск на ней локальных минимумов и путей с минимальным перепадом энергии между ними (ПМПЭ), расчет энергии активации для магнитных переходов и предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса в гармоническом приближении для формы энергетической поверхности в окрестности минимумов и седловых точек.

Наряду с общим обзором методов поиска ПМПЭ на многомерных энергетических поверхностях в диссертации предложен метод усеченного ПМПЭ, который позволяет находить только часть пути, содержащую седловую точку. Это позволяет существенно сократить объем расчетов, требования к быстродействию и необходимой компьютерной памяти. Метод позволяет проводить

расчеты времен жизни топологических структур микронного масштаба с атомным разрешением.

Предложенные алгоритмы расчета ПМПЭ и предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса используются во второй главе для вычисления времен жизни скирмионов в системе PdFe/Ir на магнитных дорожках разной ширины и в присутствии немагнитных структурных дефектов атомного масштаба. Приведены оценки геометрических размеров системы и дефектов, которые допустимы при создании спинтронных устройств. Показано, что внешнее магнитное поле может служить управляющим параметром, который переключает наиболее вероятные механизмы рождения и исчезновения скирмионов, меняет размер и поверхностную плотность скирмионов, открывает возможность наблюдения квантовомеханического туннелирования скирмионов в ФМ состоянии, приводит к конкуренции топологического и обычного эффектов Холла при рассеянии электронов проводимости на скирмионных состояниях.

В третьей главе показано, что согласованное изменение параметров, описывающих взаимодействие ДМ и одноосную анизотропию, позволяет добиться большого времени жизни скирмиона при сохранении его малых размеров. Проведенные расчеты показали, что устойчивость связана с магнитным профилем скирмиона. Предэкспоненциальный фактор в законе Аррениуса в большей степени ответственен за увеличение времени жизни скирмиона, чем небольшое увеличение энергетического барьера для коллапса скирмиона при согласованном изменении параметров, приводящем к движению вдоль изолинии постоянного размера скирмиона. Это определяет направление поиска материалов, в которых можно ожидать существование наноразмерных топологических структур при комнатных температурах.

Несмотря на прогресс, достигнутый в понимании механизмов устойчивости топологических состояний благодаря применению ТПС, многие вопросы здесь остаются открытыми и требуют дальнейших исследований. Среди них анализ энергетических поверхностей трехмерных структур и переходов между различными топологически стабилизированными структурами в них, исследование магнитного дипольного взаимодействия и расчеты предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса для систем микронного масштаба с дипольным взаимодействием, исследование вопроса о создании материалов с управляемы-

ми магнитными параметрами. Хотя разработанные выше методы, программы и алгоритмы могут быть использованы для теоретического анализа этих вопросов, они остаются за пределами рассмотрения настоящей диссертации.

Благодарности

Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю проф. Уздину В. М. за проявленное терпение в процессе совместной работы. Автор также выражает благодарность Лобанову И.С., Бессараб П. Ф. и проф. Йонссону Х. за плодотворное сотрудничество. Автор благодарит своих родителей за поддержку.

Литература

- [1] Parkin, S. S. Magnetic domain-wall racetrack memory / Stuart S.P. Parkin, Masamitsu Hayashi, Luc Thomas // *Science*. — 2008. — Vol. 320, no. 5873. — P. 190–194.
- [2] Grünberg, P. Layered magnetic structures: facts, figures, future / P. Grünberg // *Journal of Physics Condensed Matter*. — 2001. — Vol. 13, no. 34. — P. 7691–7706.
- [3] Fert, A. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics / Albert Fert // *Reviews of Modern Physics*. — 2008. — Vol. 80, no. 4. — P. 1517–1530.
- [4] Wiesendanger, R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: A new twist for spintronics / Roland Wiesendanger // *Nature Reviews Materials*. — 2016. — Vol. 1, no. 7. — P. 16044.
- [5] Magnetic skyrmions: From fundamental to applications / Giovanni Finocchio, Felix Büttner, Riccardo Tomasello et al. // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2016. — Vol. 49, no. 42. — P. 423001.
- [6] Fert, A. Magnetic skyrmions: Advances in physics and potential applications / Albert Fert, Nicolas Reyren, Vincent Cros // *Nature Reviews Materials*. — 2017. — Vol. 2, no. 7. — P. 17031.
- [7] Bessarab, P. F. Harmonic transition-state theory of thermal spin transitions / Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2012. — Vol. 85, no. 18. — P. 184409.

- [8] Hänggi, P. Reaction-rate theory: Fifty years after Kramers / Peter Hänggi, Peter Talkner, Michal Borkovec // *Reviews of Modern Physics*. — 1990. — Vol. 62, no. 2. — P. 251–341.
- [9] Antczak, G. Jump processes in surface diffusion / Grazyna Antczak, Gert Ehrlich // *Surface Science Reports*. — 2007. — Vol. 62, no. 2. — P. 39–61.
- [10] Bessarab, P. F. Potential energy surfaces and rates of spin transitions / Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Zeitschrift für Physikalische Chemie*. — 2013. — Vol. 227, no. 11. — P. 1543–1557.
- [11] Fert, A. Skyrmions on the track / Albert Fert, Vincent Cros, João Sampaio // *Nature Nanotechnology*. — 2013. — Vol. 8, no. 3. — P. 152–156.
- [12] Coffey, W. T. Crossover formulas in the Kramers theory of thermally activated escape rates-application to spin systems / W. T. Coffey, D. A. Garanin, D. J. McCarthy // *Advances in Chemical Physics*. — 2001. — Vol. 117. — P. 483–765.
- [13] Büttner, F. Theory of isolated magnetic skyrmions: From fundamentals to room temperature applications / Felix Büttner, Ivan Lemesh, Geoffrey S. D. Beach // *Scientific Reports*. — 2018. — Vol. 8, no. 1. — P. 4464.
- [14] E, W. String method for the study of rare events / Weinan E, Weiqing Ren, Eric Vanden-Eijnden // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2002. — Vol. 66, no. 5. — P. 052301.
- [15] Spin torque efficiency and analytic error rate estimates of skyrmion racetrack memory / Dieter Suess, Christoph Vogler, Florian Bruckner et al. // *Scientific Reports*. — 2019. — Vol. 9, no. 1. — P. 4827.
- [16] Comparison of methods for finding saddle points without knowledge of the final states / R. A. Olsen, G. J. Kroes, G. Henkelman et al. // *Journal of Chemical Physics*. — 2004. — Vol. 121, no. 20. — P. 9776–9792.
- [17] Duplication, collapse, and escape of magnetic skyrmions revealed using a systematic saddle point search method / Gideon P. Müller, Pavel F. Bessarab,

- Sergei M. Vlasov et al. // *Physical Review Letters*. — 2018. — Vol. 121, no. 19. — P. 197202.
- [18] Bessarab, P. F. Calculations of magnetic states and minimum energy paths of transitions using a noncollinear extension of the Alexander-Anderson model and a magnetic force theorem / Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2014. — Vol. 89. — P. 214424.
- [19] Lifetime of racetrack skyrmions / Pavel F. Bessarab, Gideon P. Müller, Igor S. Lobanov et al. // *Scientific Reports*. — 2018. — Vol. 8, no. 1. — P. 3433.
- [20] Hoffmann, M. Systematic derivation of realistic spin models for beyond-Heisenberg solids / Markus Hoffmann, Stefan Blügel // *Physical Review B*. — 2020. — Vol. 101. — P. 024418.
- [21] Qualitative insight and quantitative analysis of the effect of temperature on the coercivity of a magnetic system / Mariia Moskalenko, Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *AIP Advances*. — 2016. — Vol. 6, no. 2. — P. 025213.
- [22] New type of stable particlelike states in chiral magnets / Filipp N. Rybakov, Aleksandr B. Borisov, Stefan Blügel, Nikolai S. Kiselev // *Physical Review Letters*. — 2015. — Vol. 115. — P. 117201.
- [23] Efficient optimization method for finding minimum energy paths of magnetic transitions / A. V. Ivanov, D. Dagbartsson, J. Tranchida et al. // *Journal of Physics Condensed Matter*. — 2020. — Vol. 32, no. 34.
- [24] Lobanov, I. S. The lifetime of big size topological chiral magnetic states. Estimation of the pre-exponential factor in the Arrhenius law / I S Lobanov, V M Uzdin. — <https://arxiv.org/abs/2008.06754>.
- [25] Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions / Stefan Heinze, Kirsten Von Bergmann, Matthias Menzel et al. // *Nature Physics*. — 2011. — Vol. 7, no. 9. — P. 713–718.

- [26] Role of higher-order exchange interactions for skyrmion stability / Souvik Paul, Soumyajyoti Haldar, Stephan von Malottki, Stefan Heinze // Nature Communications. — 2020. — Vol. 11, no. 1. — P. 4756.
- [27] Enhanced skyrmion stability due to exchange frustration / S. Von Malottki, B. Dupé, P. F. Bessarab et al. // Scientific Reports. — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 12299.
- [28] Heil, B. Universality of annihilation barriers of large magnetic skyrmions in chiral and frustrated magnets / Benjamin Heil, Achim Rosch, Jan Masell // Physical Review B. — 2019. — Vol. 100, no. 13. — P. 134424.
- [29] Nagaosa, N. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions / Naoto Nagaosa, Yoshinori Tokura // Nature Nanotechnology. — 2013. — Vol. 8, no. 12. — P. 899–911.
- [30] Dzyaloshinsky, I. A thermodynamic theory of "weak" ferromagnetism of antiferromagnetics / I. Dzyaloshinsky // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1958. — Vol. 4, no. 4. — P. 241–255.
- [31] Moriya, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism / Tôru Moriya // Physical Review. — 1960. — Vol. 120, no. 1. — P. 91–98.
- [32] Skyrmion lattice in a chiral magnet / S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al. // Science. — 2009. — Vol. 323. — P. 915–919.
- [33] Skyrmion-Electronics: An Overview and Outlook / Wang Kang, Yangqi Huang, Xichao Zhang et al. // Proceedings of the IEEE. — 2016. — Vol. 104, no. 10. — P. 2040–2061.
- [34] Fert, A. R. Magnetic and transport properties of metallic multilayers / A. R. Fert // Materials Science Forum. — 1991. — Vol. 59-60. — P. 439–480.
- [35] Богданов, А. Н. Термодинамически устойчивые вихри в магнитоупорядоченных кристаллах / А. Н. Богданов и Д.А. Яблонский // ЖЭТФ — 1989. — Т. 95, н. 1. — С. 178–182.

- [36] Wang, X. S. A theory on skyrmion size / X. S. Wang, H. Y. Yuan, X. R. Wang // *Communications Physics*. — 2018. — Vol. 1, no. 1. — P. 1–7.
- [37] Chiral magnetic ordering in two-dimensional ferromagnets with competing Dzyaloshinsky-Moriya interactions / E. Y. Vedmedenko, L. Udvardi, P. Weinberger, R. Wiesendanger // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2007. — Vol. 75, no. 10. — P. 104431.
- [38] Magnetic antiskyrmions above room temperature in tetragonal Heusler materials / Ajaya K. Nayak, Vivek Kumar, Tianping Ma et al. // *Nature*. — 2017. — Vol. 548, no. 7669. — P. 561–566.
- [39] Equilibrium skyrmion lattice ground state in a polar easy-plane magnet / S. Bordács, A. Butykai, B. G. Szigeti et al. // *Scientific Reports*. — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 7584.
- [40] Lobanov, I. S. Mechanism and activation energy of magnetic skyrmion annihilation obtained from minimum energy path calculations / Igor S. Lobanov, Hannes Jónsson, Valery M. Uzdin // *Physical Review B*. — 2016. — Vol. 94, no. 17. — P. 174418.
- [41] Field-dependent size and shape of single magnetic skyrmions / Niklas Romming, André Kubetzka, Christian Hanneken et al. // *Physical Review Letters*. — 2015. — Vol. 114, no. 17. — P. 177203.
- [42] Room-temperature chiral magnetic skyrmions in ultrathin magnetic nanostructures / Olivier Boulle, Jan Vogel, Hongxin Yang et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2016. — Vol. 11, no. 5. — P. 449–454.
- [43] Lemesh, I. Accurate model of the stripe domain phase of perpendicularly magnetized multilayers / Ivan Lemesh, Felix Büttner, Geoffrey S.D. Beach // *Physical Review B*. — 2017. — Vol. 95, no. 17. — P. 174423.
- [44] Bessarab, P. F. Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation / Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Computer Physics Communications*. — 2015. — Vol. 196. — P. 335–347.

- [45] Henkelman, G. Climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths / Graeme Henkelman, Blas P. Uberuaga, Hannes Jónsson // *Journal of Chemical Physics*. — 2000. — Vol. 113, no. 22. — P. 9901–9904.
- [46] Magnetic exchange force microscopy: Theoretical analysis of induced magnetization reversals / Aleksei Ivanov, Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Nanoscale*. — 2017. — Vol. 9, no. 35. — P. 13320–13325.
- [47] GPU-accelerated atomistic energy barrier calculations of skyrmion annihilations / Paul Heistracher, Claas Abert, Florian Bruckner et al. // *IEEE Transactions on Magnetics*. — 2018. — Vol. 54, no. 11. — P. 7206105.
- [48] Golub, G. H. *Matrix computations* / Gene H. Golub, Charles F. Van Loan // The Johns Hopkins University Press, 2013. — 780p.
- [49] Henkelman, G. A dimer method for finding saddle points on high dimensional potential surfaces using only first derivatives / Graeme Henkelman, Hannes Jónsson // *Journal of Chemical Physics*. — 1999. — Vol. 111, no. 15. — P. 7010–7022.
- [50] Adaptive nudged elastic band approach for transition state calculation / P. Maragakis, Stefan A. Andreev, Yisroel Brumer et al. // *Journal of Chemical Physics*. — 2002. — Vol. 117, no. 10. — P. 4651–4658.
- [51] Interfacial plasticity governs strain rate sensitivity and ductility in nanostructured metals / Ting Zhu, Ju Li, Amit Samanta et al. // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. — 2007. — Vol. 104, no. 9. — P. 3031–3036.
- [52] Path optimization with application to tunneling / Dóróthea M. Einarisdóttir, Andri Arnaldsson, Finnbogi Óskarsson, Hannes Jónsson // *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. — 2012. — Vol. 7134 LNCS, no. PART 2. — P. 45–55.

- [53] Truncated minimum energy path method for finding first order saddle points / I.S. Lobanov, M.N. Potkina, H. Jónsson, V.M. Uzdin // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2017. — Vol. 8, no. 5. — P. 586–595.
- [54] Bessarab, P. F. Size and shape dependence of thermal spin transitions in Nanoislands / Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Physical Review Letters*. — 2013. — Vol. 110, no. 2. — P. 020604.
- [55] Rohart, S. Path to collapse for an isolated Néel skyrmion / S. Rohart, J. Miltat, A. Thiaville // *Physical Review B*. — 2016. — Vol. 93, no. 21. — P. 214412.
- [56] Mittal, S. A survey of techniques for architecting processor components using domain-wall memory / Sparsh Mittal // *ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems*. — 2016. — Vol. 13, no. 2. — P. 1–25.
- [57] Perspective: Magnetic skyrmions - Overview of recent progress in an active research field / K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, M. Kläui // *Journal of Applied Physics*. — 2018. — Vol. 124, no. 24. — P. 240901.
- [58] Белавин, А.А. Метастабильные состояния двумерного изотропного ферромагнетика / А. А. Белавин, А. М. Поляков // *Письма в ЖЭТФ*. — 1975. — Т. 22, н.10. — С. 503-506.
- [59] Robust skyrmion shift device through engineering the local exchange-bias field / Z. R. Yan, Y. Z. Liu, Y. Guang et al. // *Physical Review Applied*. — 2020. — Vol. 14, no. 4. — P. 044008.
- [60] Stochastic computing implemented by skyrmionic logic devices / Haoyang Zhang, Daoqian Zhu, Wang Kang et al. // *Physical Review Applied*. — 2020. — Vol. 13, no. 5. — P. 054049.
- [61] Iwasaki, J. Universal current-velocity relation of skyrmion motion in chiral magnets / Junichi Iwasaki, Masahito Mochizuki, Naoto Nagaosa // *Nature Communications*. — 2013. — Vol. 4, no. 1. — P. 1–8.
- [62] Skyrmion propagation along curved racetracks / V. L. Carvalho-Santos, M. A. Castro, D. Salazar-Aravena et al. // *Applied Physics Letters*. — 2021. — Vol. 118, no. 17. — P. 172407.

- [63] Zhou, Y. A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in a junction geometry / Yan Zhou, Motohiko Ezawa // *Nature Communications*. — 2014. — Vol. 5, no. 1. — P. 1–8.
- [64] The effect of confinement and defects on the thermal stability of skyrmions / Valery M. Uzdin, Maria N. Potkina, Igor S. Lobanov et al. // *Physica B: Condensed Matter*. — 2018. — Vol. 549. — P. 6–9.
- [65] Potkina, M. N. Nonmagnetic impurities in skyrmion racetrack memory / M. N. Potkina, I. S. Lobanov, V. M. Uzdin // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2020. — Vol. 11, no. 6. — P. 628–635.
- [66] Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures / J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2013. — Vol. 8, no. 11. — P. 839–844.
- [67] Stability of single skyrmionic bits / J. Hagemeyer, N. Romming, K. Von Bergmann et al. // *Nature Communications*. — 2015. — Vol. 6, no. 1. — P. 8455.
- [68] Writing and deleting single magnetic skyrmions / Niklas Romming, Christian Hanneken, Matthias Menzel et al. // *Science*. — 2013. — Vol. 341, no. 6146. — P. 636–639.
- [69] Thermal stability and topological protection of skyrmions in nanotracks / David Cortés-Ortuño, Weiwei Wang, Marijan Beg et al. // *Scientific Reports*. — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 4060.
- [70] Topological Hall effect for electron scattering on nanoscale skyrmions in external magnetic field / K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, M. N. Potkina et al. // *Physical Review B*. — 2018. — Vol. 98, no. 21. — P. 214407.
- [71] Magnetic skyrmion annihilation by quantum mechanical tunneling / Sergei M. Vlasov, Pavel F. Bessarab, Igor S. Lobanov et al. // *New Journal of Physics*. — 2020. — Vol. 22. — P. 083013.
- [72] Pinning and movement of individual nanoscale magnetic skyrmions via defects / Christian Hanneken, André Kubetzka, Kirsten Von Bergmann,

- Roland Wiesendanger // *New Journal of Physics*. — 2016. — Vol. 18, no. 5. — P. 055009.
- [73] Universality of defect-skyrmion interaction profiles / Imara Lima Fernandes, Juba Bouaziz, Stefan Blügel, Samir Lounis // *Nature Communications*. — 2018. — Vol. 9, no. 1. — P. 4395.
- [74] Müller, J. Capturing of a magnetic skyrmion with a hole / Jan Müller, Achim Rosch // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2015. — Vol. 91, no. 5. — P. 054410.
- [75] Accelerating, guiding, and compressing skyrmions by defect rails / Josep Castell-Queralt, Leonardo González-Gómez, Nuria Del-Valle et al. // *Nanoscale*. — 2019. — Vol. 11, no. 26. — P. 12589–12594.
- [76] Stosic, D. Pinning of magnetic skyrmions in a monolayer Co film on Pt(111): Theoretical characterization and exemplified utilization / Dusan Stosic, Teresa B. Ludermir, Milorad V. Milošević // *Physical Review B*. — 2017. — Vol. 96, no. 21. — P. 214403.
- [77] Energy surface and lifetime of magnetic skyrmions / V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2018. — Vol. 459. — P. 236–240.
- [78] Skyrmions in antiferromagnets: Thermal stability and the effect of external field and impurities / Maria N. Potkina, Igor S. Lobanov, Hannes Jónsson, Valery M. Uzdin // *Journal of Applied Physics*. — 2020. — Vol. 127, no. 21. — P. 213906.
- [79] Iwasaki, J. Current-induced skyrmion dynamics in constricted geometries / Junichi Iwasaki, Masahito Mochizuki, Naoto Nagaosa // *Nature Nanotechnology*. — 2013. — Vol. 8, no. 10. — P. 742–747.
- [80] Minimal radius of magnetic skyrmions: statics and dynamics / A. Siemens, Y. Zhang, J. Hagemester et al. // *New Journal of Physics*. — 2016. — Vol. 18, no. 4. — P. 045021.

- [81] General theory of the topological Hall effect in systems with chiral spin textures / K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lähderanta // *Physical Review B*. — 2018. — Vol. 98, no. 19. — P. 195439.
- [82] Direct observation of topological Hall effect in Co/Pt nanostructured films / M. V. Sapozhnikov, N. S. Gusev, S. A. Gusev et al. // *Physical Review B*. — 2021. — Vol. 103, no. 5. — P. 054429.
- [83] Classical to quantum mechanical tunneling mechanism crossover in thermal transitions between magnetic states / Sergei Vlasov, Pavel F. Bessarab, Valery M. Uzdin, Hannes Jónsson // *Faraday Discussions*. — 2016. — Vol. 195, no. 0. — P. 93–109.
- [84] Potkina, M. N. Fine energy structure of a magnetic skyrmion localized on a nonmagnetic impurity in an external magnetic field / Mariia N. Potkina, Igor S. Lobanov, Valery M. Uzdin // *Physics of Complex Systems*. — 2020. — Vol. 1, no. 4. — P. 165–168.
- [85] Isolated zero field sub-10 nm skyrmions in ultrathin Co films / Sebastian Meyer, Marco Perini, Stephan von Malottki et al. // *Nature Communications*. — 2019. — Vol. 10, no. 1. — P. 3823.
- [86] Room temperature skyrmion ground state stabilized through interlayer exchange coupling / Gong Chen, Arantzazu Mascarague, Alpha T. N'Diaye, Andreas K. Schmid // *Applied Physics Letters*. — 2015. — Vol. 106, no. 24. — P. 242404.
- [87] Tunable room-temperature magnetic skyrmions in Ir/Fe/Co/Pt multilayers / Anjan Soumyanarayanan, M. Raju, A. L. Gonzalez Oyarce et al. // *Nature Materials*. — 2017. — Vol. 16, no. 9. — P. 898–904.
- [88] Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature / C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2016. — Vol. 11, no. 5. — P. 444–448.

- [89] Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets / Seonghoon Woo, Kai Litzius, Benjamin Krüger et al. // *Nature Materials*. — 2016. — Vol. 15, no. 5. — P. 501–506.
- [90] Room-temperature current-induced generation and motion of sub-100 nm skyrmions / William Legrand, Davide Maccariello, Nicolas Reyren et al. // *Nano Letters*. — 2017. — Vol. 17, no. 4. — P. 2703–2712.
- [91] Fast current-driven domain walls and small skyrmions in a compensated ferrimagnet / Lucas Caretta, Maxwell Mann, Felix Büttner et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2018. — Vol. 13, no. 12. — P. 1154–1160.
- [92] Current-driven dynamics and inhibition of the skyrmion Hall effect of ferrimagnetic skyrmions in GdFeCo films / Seonghoon Woo, Kyung Mee Song, Xichao Zhang et al. // *Nature Communications*. — 2018. — Vol. 9, no. 1. — P. 959.
- [93] Room-temperature stabilization of antiferromagnetic skyrmions in synthetic antiferromagnets / William Legrand, Davide Maccariello, Fernando Ajejas et al. // *Nature Materials*. — 2020. — Vol. 19, no. 1. — P. 34–42.
- [94] Electrical detection of magnetic skyrmions by tunnelling non-collinear magnetoresistance / Christian Hanneken, Fabian Otte, André Kubetzka et al. // *Nature Nanotechnology*. — 2015. — Vol. 10, no. 12. — P. 1039–1042.
- [95] Chiral skyrmions in thin magnetic films: New objects for magnetic storage technologies? / N. S. Kiselev, A. N. Bogdanov, R. Schäfer, U. K. Röler // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2011. — Vol. 44, no. 39. — P. 392001.
- [96] Interplay between size and stability of magnetic skyrmions / A.S. Varentsova, M.N. Potkina, S. von Malottki et al. // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2018. — P. 356–363.
- [97] First-principles prediction of sub-10-nm skyrmions in Pd/Fe bilayers on Rh(111) / Soumyajyoti Haldar, Stephan Von Malottki, Sebastian Meyer et al. // *Physical Review B*. — 2018. — Vol. 98, no. 6. — P. 060413.

- [98] Bogdanov, A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals / A. Bogdanov, A. Hubert // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 1994. — Vol. 138, no. 3. — P. 255–269.
- [99] Sharrock, M. P. Time dependence of switching fields in magnetic recording media (invited) / M. P. Sharrock // *Journal of Applied Physics*. — 1994. — Vol. 76, no. 10. — P. 6413–6418.
- [100] Paths to collapse for isolated skyrmions in few-monolayer ferromagnetic films / Dusan Stosic, Jeroen Mulkers, Bartel Van Waeyenberge et al. // *Physical Review B*. — 2017. — Vol. 95, no. 21. — P. 214418.
- [101] Tretiakov, O. A. Vortices in thin ferromagnetic films and the skyrmion number / O. A. Tretiakov, O. Tchernyshyov // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2007. — Vol. 75, no. 1. — P. 012408.
- [102] Toward room-temperature nanoscale skyrmions in ultrathin films, supplementary information / Anastasiia S. Varentcova, Stephan von Malottki, Maria N. Potkina et al. // *npj Computational Materials*. — 2020. — Vol. 6, no. 1. — P. 1–11.
- [103] Skyrmion lifetime in ultrathin films / Stephan Von Malottki, Pavel F. Bessarab, Soumyajyoti Haldar et al. // *Physical Review B*. — 2019. — Vol. 99, no. 6. — P. 060409.
- [104] Thermal stability of metastable magnetic skyrmions: Entropic narrowing and significance of internal eigenmodes / L. Desplat, D. Suess, J. V. Kim, R. L. Stamps // *Physical Review B*. — 2018. — Vol. 98, no. 13. — P. 134407.
- [105] Entropy-limited topological protection of skyrmions / Johannes Wild, Thomas N.G. Meier, Simon Pöllath et al. // *Science Advances*. — 2017. — Vol. 3, no. 9. — P. e1701704.
- [106] Lin, S. Z. Internal modes of a skyrmion in the ferromagnetic state of chiral magnets / Shi Zeng Lin, Cristian D. Batista, Avadh Saxena // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2014. — Vol. 89, no. 2. — P. 024415.

- [107] Schütte, C. Magnon-skyrmion scattering in chiral magnets / Christoph Schütte, Markus Garst // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. — 2014. — Vol. 90, no. 9. — P. 094423.
- [108] Quantum dynamics of skyrmions in chiral magnets / Christina Psaroudaki, Silas Hoffman, Jelena Klinovaja, Daniel Loss // Physical Review X. — 2017. — Vol. 7, no. 4. — P. 041045.
- [109] Spin eigenmodes of magnetic skyrmions and the problem of the effective skyrmion mass / Volodymyr P. Kravchuk, Denis D. Sheka, Ulrich K. Rößler et al. // Phys. Rev. B. — 2018. — Vol. 97, no. 6. — P. 064403.
- [110] Weller, D. Thermal effect limits in ultrahigh-density magnetic recording / Dieter Weller, Andreas Moser // IEEE Transactions on Magnetics. — 1999. — Vol. 35, no. 6. — P. 4423–4439.
- [111] Advances and future prospects of spin-transfer torque random access memory / E. Chen, D. Apalkov, Z. Diao et al. // IEEE Transactions on Magnetics. — 2010. — Vol. 46, no. 6. — P. 1873–1878.
- [112] Bedanta, S. Supermagnetism / Subhankar Bedanta, Wolfgang Kleemann // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2009. — Vol. 42, no. 1. — P. 013001.
- [113] Thermal fluctuations in artificial spin ice / Vassilios Kapaklis, Unnar B. Arnalds, Alan Farhan et al. // Nature Nanotechnology. — 2014. — Vol. 9, no. 7. — P. 514–519.
- [114] Makhfudz, I. Inertia and chiral edge modes of a skyrmion magnetic bubble / Imam Makhfudz, Benjamin Krüger, Oleg Tchernyshyov // Physical Review Letters. — 2012. — Vol. 109, no. 21. — P. 217201.
- [115] Engineering skyrmions in transition-metal multilayers for spintronics / B. Dupé, G. Bihlmayer, M. Böttcher et al. // Nature Communications. — 2016. — Vol. 7, no. 1. — P. 11779.
- [116] B-T phase diagram of Pd/Fe/Ir(111) computed with parallel tempering Monte Carlo / M. Böttcher, S. Heinze, S. Egorov et al. // New Journal of Physics. — 2018. — Vol. 20, no. 10. — P. 103014.

- [117] Bruno, P. Spin-wave theory of two-dimensional ferromagnets in the presence of dipolar interactions and magnetocrystalline anisotropy / Patrick Bruno // Physical Review B. — 1991. — Vol. 43, no. 7. — P. 6015–6021.
- [118] Anatomy of Dzyaloshinskii-Moriya Interaction at Co/Pt interfaces / Hongxin Yang, André Thiaville, Stanislas Rohart et al. // Physical Review Letters. — 2015. — Vol. 115, no. 26. — P. 267210.
- [119] Significant Dzyaloshinskii-Moriya interaction at graphene-ferromagnet interfaces due to the Rashba effect / Hongxin Yang, Gong Chen, Alexandre A.C. Cotta et al. // Nature Materials. — 2018. — Vol. 17, no. 7. — P. 605–609.
- [120] Band filling control of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in weakly ferromagnetic insulators / G. Beutier, S. P. Collins, O. V. Dimitrova et al. // Physical Review Letters. — 2017. — Vol. 119, no. 16. — P. 167201.
- [121] Jia, H. First-principles investigation of chiral magnetic properties in multilayers: Rh/Co/Pt and Pd/Co/Pt / Hongying Jia, Bernd Zimmermann, Stefan Blügel // Physical Review B. — 2018. — Vol. 98, no. 14. — P. 144427.
- [122] Hoffmann, M. Atomistic perspective of long lifetimes of small skyrmions at room temperature / Markus Hoffmann, Gideon P. Müller, Stefan Blügel // Physical Review Letters. — 2020. — Vol. 124, no. 24. — P. 247201.