

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(СПбГУ)

Кафедра статистической физики
Направление «Физика»



УСТОЙЧИВОСТЬ И ДИНАМИКА МАГНИТНЫХ СКИРМИОНОВ

Магистерская диссертация студента

_____ **Поткиной Марии Николаевны**

Научный руководитель:

_____ д. ф.-м. н., проф. **Уздин В.М.**

Рецензент:

_____ д. ф.-м. н., проф. **Попов И.Ю.**

Санкт-Петербург
2017

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	3
2. Магнитные скирмионы как элементы памяти нового поколения	4
3. Проблема оценки топологической устойчивости магнитных скирмионов	5
4. Геодезический метод подталкивания упругой лентой	7
5. Активационные барьеры для рождения и аннигиляции скирмионов в ограниченном образце	9
6. Устойчивость магнитных скирмионов, локализованных на дефектах	15
7. Заключение	23
Список литературы	24

1. Введение

Магнитные скирмионы, представляющие собой локализованные спиновые структуры с топологическим зарядом, благодаря малым размерам и высокой подвижности являются одними из наиболее перспективных систем для создания сверхплотной и сверхбыстрой магнитной памяти. Для их использования в качестве элементов памяти важна информация об устойчивости скирмионных состояний, особенно в случае, когда собственные размеры скирмионов сравнимы с характерными расстояниями между ними или размером области их локализации [1,2,3]. Большую роль играет и взаимодействие скирмионов с дефектами структуры и примесями, которые невозможно исключить на наномасштабе. Вместе с тем искусственно введенные дефекты могут использоваться для управления динамическими свойствами скирмионов в устройствах магнитной памяти.

Устойчивость скирмионных состояний в условиях пространственного ограничения размерами образца и в присутствии немагнитных дефектов в настоящей работе исследуется в рамках теории переходного состояния для магнитных степеней свободы [4,5]. Энергетическая поверхность системы строится на основе гамильтониана гейзенберговского типа, включающего обменное взаимодействие между ближайшими соседями, энергию анизотропии, взаимодействие Дзялошинского-Мория и зеемановскую энергию взаимодействия со внешним полем.

Расчеты проводятся на двумерной треугольной решетке. Вдоль одного из направлений используются периодические граничные условия, вдоль другого предполагается наличие свободных границ. Таким образом, можно изучать устойчивость скирмионных состояний на «дорожке», представляющей собой полосу конечной ширины в зависимости от соотношения собственного размера скирмиона и ширины дорожки.

На многомерной энергетической поверхности, рассматриваемой как функция углов, задающих направление всех магнитных моментов, составляющих систему, определяются локальные минимумы, отвечающие скирмионному и однородному ферромагнитному состояниям и, «геодезическим методом подталкивания упругой лентой» [5] строится путь с минимальным перепадом энергии между ними. Максимум вдоль пути определяет седловую точку первого порядка на энергетической поверхности и активационные барьеры между состояниями. Сам путь с минимальным перепадом энергии, обладая максимальным статистическим весом по отношению к близким к нему путям, задает наиболее вероятный сценарий аннигиляции скирмионного состояния [4].

2. Магнитные скирмионы как элементы памяти нового поколения

Прогресс, достигнутый в развитии вычислительных возможностей современных компьютеров и электронных устройств, в значительной степени связан с разработкой технологий магнитной памяти. В последние годы были предложены новые принципы организации памяти, внедрение которых может привести к качественному скачку в достижении высокой плотности записи и скорости обмена информацией. Это так называемая трековая память (racetrack memory), когда информация записывается в виде последовательности магнитных доменов, движущихся по наноразмерной проволоке под действием коротких импульсов спин-поляризованного тока [6]. При этом механического перемещения считывающей головки относительно области, где записана информация, как в обычных считывающих устройствах, не происходит, что должно существенно увеличить скорость считывания информации и долговечность устройства. Однако обычные магнитные домены оказываются недостаточно устойчивыми относительно действия тока и требуют большой плотности тока для их перемещения [7]. В связи с этим в последнее время особое внимание уделяется хиральным локализованным магнитным структурам, таким как скирмионы, стабильность которых связывают с топологическими особенностями их структуры. Эти системы имеют малый размер, вплоть до нанометров, и могут перемещаться токами очень малой плотности [8]. В 2016 году удалось получить скирмионы при комнатной температуре [9]. Для использования их в качестве элементов памяти необходимо знать пределы их устойчивости при конечной температуре. Действительно, когда размеры системы уменьшаются, необходимо принимать во внимание ее неконтролируемое взаимодействие с тепловым резервуаром и, следовательно, знание активационных барьеров для разрушения структуры имеет принципиальное значение. С другой стороны, для записи информации, необходимо создавать новые скирмионы и уничтожать существующие. Чем меньшим воздействием этого можно достичь, тем меньше энергии потребуется и тем более эффективной окажется разрабатываемая магнитная память. Следовательно, и здесь нужно уметь оценивать активационную энергию, необходимую для рождения и уничтожения скирмиона. Кроме того, когда размер элемента достигает нескольких нанометров, приходится учитывать и дефекты атомного размера. На этом масштабе даже очень ровная граница будет выглядеть шероховатой, а дефекты кристаллической структуры могут повлиять на упорядочение и динамику скирмионов. Поэтому вопрос устойчивости должен рассматриваться вместе с влиянием таких факторов, как существование границ образца, их неидеальности и структурных дефектов атомного масштаба. Именно эти задачи будут решаться в настоящей работе.

3. Проблема оценки топологической устойчивости магнитных скирмионов

Устойчивость магнитных скирмионов относительно температурных флуктуаций и внешних воздействий обычно связывают с топологическими свойствами их структуры. Для скирмионов в тонкой магнитной пленке, которые будут изучаться в дальнейшем, можно ввести топологический заряд [10]

$$q = \frac{1}{4\pi} \int d^2r \vec{m} \left| \frac{\partial m}{\partial x} \times \frac{\partial m}{\partial y} \right|$$

Здесь ось z выбрана перпендикулярно поверхности пленки, а m - единичный вектор в направлении намагниченности. В случае непрерывного распределения намагниченности топологический заряд показывает, сколько раз вектор намагниченности перенесенный в начало координат, покрывает единичную сферу. Для однородного ферромагнитного состояния $q=0$, а для скирмионного состояния (например, изображенного на рис.1 на дискретной решетке) $|q|=1$. При непрерывном изменении направления намагниченности в рамках континуальной модели топологический заряд не меняется и, таким образом, невозможно перевести одно состояние в другое путем непрерывной деформации намагниченности. Невозможность изменения топологического заряда в континуальной модели делает скирмионы устойчивыми относительно произвольных флуктуаций и об этом говорят, как о «топологической защите» состояния.

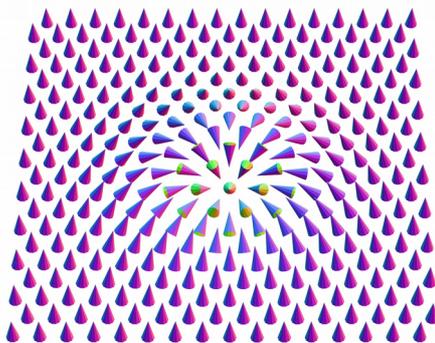


Рис. 1 Рассчитанное скирмионное состояние на дискретной решетке, соответствующее локальному минимуму энергии для модели гейзенберговского типа (см. ниже: (1) на стр. 9. Параметры $J=5.88$ meV, $K=0.51$ meV, $D_{ij}=1.52$ meV, $B=3$ Т, $\mu=3\mu_B$).

В реальных системах магнитные моменты определены на дискретной решетке и топологические аргументы, строго говоря, неприменимы. Вместо этого, можно говорить об активационных барьерах, разделяющих скирмионное и ферромагнитное состояние и именно эти барьеры определяют устойчивость и времена жизни скирмионов при конечной температуре. Практически во всех экспериментальных [11, 12] и теоретических [13, 14, 15] работах утверждается, что частота магнитных переходов ν (обратно пропорциональная

времени жизни магнитного состояния τ) для скирмионов при конечных температурах описывается законом Аррениуса:

$$v = v_0 \exp \left| -\frac{E_a}{k_B T} \right|$$

Однако оценки для величины активационного барьера E_a и частоты попыток v_0 отличаются для одних и тех же систем в разных работах настолько, что говорить о достоверном их определении пока трудно. Достаточно сказать, что оценки v_0 для скирмиона в системе Pd/Fe/Ir(111) отличаются в работах [13] и [15] почти на 10 порядков ($1.5 \cdot 10^{17}$ и $2.5 \cdot 10^7$ соответственно), что аномально много, даже учитывая, что оценки проводились для разных магнитных полей (2 Т в [13] и 3.9 Т [15]). Трудности в определении активационных энергий и частоты попыток связаны с фундаментальной проблемой «редких событий». Дело в том, что характерные времена жизни скирмионных состояний на 10-12 порядков больше периода осцилляций индивидуальных магнитных моментов, образующих скирмион. Поэтому стохастическое моделирование на основе решения уравнения Ландау-Лифшица со случайными полями возможно только в очень ограниченном диапазоне высоких температур и магнитных полей, когда скирмион не стабилен [13,15]. Эта область, кроме того, не очень интересна для практического использования скирмионов. Получить точные значения энергетического барьера и частоты попыток на основе такого моделирования не удастся. Моделирование на основе стандартного метода Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса в предположении, что шаг Монте-Карло пропорционален шагу по времени [15], может дать только приближенную качественную оценку для времен жизни, причем ее точность трудно даже оценить. Поэтому интерпретация имеющихся экспериментальных данных на основе алгоритмов Монте-Карло в условиях разницы характерных времен описания и экспериментального наблюдения встречает принципиальные трудности. Тем не менее именно различие временных масштабов осцилляций отдельных моментов и времен жизни скирмионных состояний позволяет использовать статистическую теорию переходного состояния (ТПС) для магнитных степеней свободы для расчета устойчивости [4,5,17].

ТПС предполагает построение для магнитных систем многомерных энергетических поверхностей как функции «медленных» переменных, определяющих адиабатическую эволюцию магнитных состояний и построение на этих поверхностях путей с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ), соединяющих разные состояния. В качестве переменных могут быть взяты, например, углы, задающие направление магнитных моментов. Тогда размерность энергетической поверхности для магнитных структур равна удвоенному числу спинов, составляющих систему и для скирмиона может составлять несколько сотен или даже тысяч. Построение ПМПЭ в многомерном пространстве и поиск седловых точек, задающих

активационные барьеры, представляет собой сложную вычислительную задачу. Эта задача гораздо более сложная, чем поиск минимумов, соответствующих устойчивым или метастабильным состояниям. Тем не менее для ее решения разработаны специальные алгоритмы, в том числе для поиска ПМПЭ для магнитных систем. Алгоритм, который был использован в данной работе, называемый "геодезический метод подталкивания упругой лентой" (Geodesic Nudged Elastic Band method – GNEB), кратко изложен в следующем разделе [5].

4. Геодезический метод подталкивания упругой лентой

Метод для нахождения ПМПЭ на многомерной энергетической поверхности позволяет найти седловую точку первого порядка, в которой все собственные числа гессиана за исключением одного положительны и только одно отрицательно. ПМПЭ, соединяющий устойчивые магнитные состояния, показывает как изменяется ориентация магнитных моментов в процессе магнитных переходов, тогда как величина магнитных моментов фиксирована (как в модели гейзенберговского типа, которая будет использоваться далее) или находится с помощью отдельных самосогласованных расчетов (как в моделях коллективизированного магнетизма). Поэтому энергетическая поверхность, на которой нужно найти ПМПЭ в пространстве, задаваемом трехмерными векторами магнитных моментов всех атомов, представляет собой многообразие. Кривизна конфигурационного пространства учитывается (1) путем использования геодезических при расчетах расстояний и смещений системы на энергетической поверхности в процессе оптимизации и (2) проектированием пути и магнитных сил на касательную плоскость многообразия, определяемого всеми возможными ориентациями магнитных векторов.

Алгоритм GNEB-метода состоит в следующем.

1 Находятся минимумы на многомерной энергетической поверхности, которые соответствуют начальной $M^I = (m_1^I, m_2^I, \dots, m_N^I)$ и конечной $M^F = (m_1^F, m_2^F, \dots, m_N^F)$ конфигурации магнитных моментов на пути. Здесь через m_j^I и m_j^F обозначены вектора магнитных моментов на j -узле в начальном и конечном состояниях. В качестве таких состояний могут служить скирмионное и ферромагнитное состояние или скирмион, локализованный на дефекте структуры, и скирмион вдали от дефекта. Поиск минимумов может осуществляться любым стандартным алгоритмом.

2. Задается начальный путь, представляющий собой цепочку состояний между M^I и M^F на энергетической поверхности. Простой путь для определения промежуточных состояний $M^V = (m_1^V, m_2^V, \dots, m_N^V)$ вдоль геодезической на пути сводится к равномерному вращению каждого момента от начального к конечному состоянию

$$m_i^v = m_i^I \cos \omega_i^v + (k_i \times m_i^I) \sin \omega_i^v$$

Здесь m_i^v представляет собой вектор i -го магнитного момента в v -й реплике системы; $\omega_i^v = (v - 1)\omega_i / (Q - 1)$, где ω_i - угол между m_i^I и m_i^F , Q – число реплик в цепочке вдоль пути, а единичный вектор k_i определяется как

$$\vec{k}_i = \frac{m_i^I \times m_i^F}{|m_i^I \times m_i^F|}$$

Каждая реплика соединяется с соседней искусственной пружиной. Жесткость пружины является параметром алгоритма, но алгоритм достаточно стабильно работает при изменении жесткости в довольно широких пределах.

3. Для каждой реплики полагаются равными нулю скорости V^v на многомерной энергетической поверхности. Это задает начальное состояние для итерационной процедуры.
 4. Рассчитывается энергия каждой реплики $E(M^v)$.
 5. Для каждой реплики рассчитывается касательная к пути и проектируется на касательное подпространство.
 6. Для каждой реплики рассчитывается поперечная компонента сил (антиградиента энергии).
 7. Рассчитывается расстояние вдоль геодезической между соседними репликами.
 8. Для каждой реплики рассчитывается параллельная компонента сил, действующих со стороны искусственно введенных «пружин».
 9. Рассчитывается полная сила, действующая на каждую реплику, как сумма поперечной составляющей реальных сил, спроектированных на касательное подпространство, и продольной составляющей сил со стороны «пружин».
 10. Осуществляется оптимизация пути с использованием алгоритма Верле. Для этого рассматривается движение каждой реплики на многомерной энергетической поверхности под действием найденных, как указано выше, сил. Если проекция скорости на направление силы меняет знак, скорость полагается равной нулю и итерационный процесс продолжается. Эта процедура повторяется до тех пор, пока поперечная составляющая силы не станет меньше заданного параметра, определяющего точность расчета.
- Полученная при этом последовательность реплик определяет ПМПЭ, а максимум энергии вдоль ПМПЭ задает активационный барьер.
- Для более точного расчета положения седловой точки использовался алгоритм «climbing image» [16], перемещающий реплику с максимальной энергией вдоль ПМПЭ в направлении точки перевала.

6. Активационные барьеры для рождения и аннигиляции скирмионов в ограниченном образце

Энергетическая поверхность системы строится на основе гамильтониана гейзенберговского типа

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{i,j} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \mu \sum_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_i - K \sum_i S_{i,z}^2 \quad (1)$$

Здесь J - постоянная обменного взаимодействия, вектор \mathbf{D}_{ij} , направленный перпендикулярно отрезку, соединяющему узлы i и j , определяет взаимодействие Дзялошинского-Мория, \mathbf{B} - внешнее магнитное поле. K - константа анизотропии. Трехмерные вектора единичной длины \mathbf{S}_i , направленные вдоль магнитных моментов, расположены в узлах двумерной треугольной решетки. Величина моментов μ предполагается одинаковой на всех узлах решетки: $\mu = 3 \mu_B$. Суммирование $\langle i,j \rangle$ в (1) предполагается по ближайшим соседям на решетке. Численные значения параметров $B=0.093J$, $K=0.07J$, $D_{ij}=0.32J$, $J=7$ мэВ взяты из работы [15] и соответствуют экспериментально наблюдаемым скирмионам в системе Pd/Fe/Ir(111) [12].

Для моделирования скирмиона на «дорожке» конечной ширины вдоль горизонтального направления в решетке использовались периодические граничные условия, вдоль вертикального предполагалось наличие свободных границ. На рис. 2 представлены рассчитанные скирмионные конфигурации, соответствующие локальным минимумам на энергетической поверхности для дорожки шириной $D=70$, 25 и 14 атомных рядов.

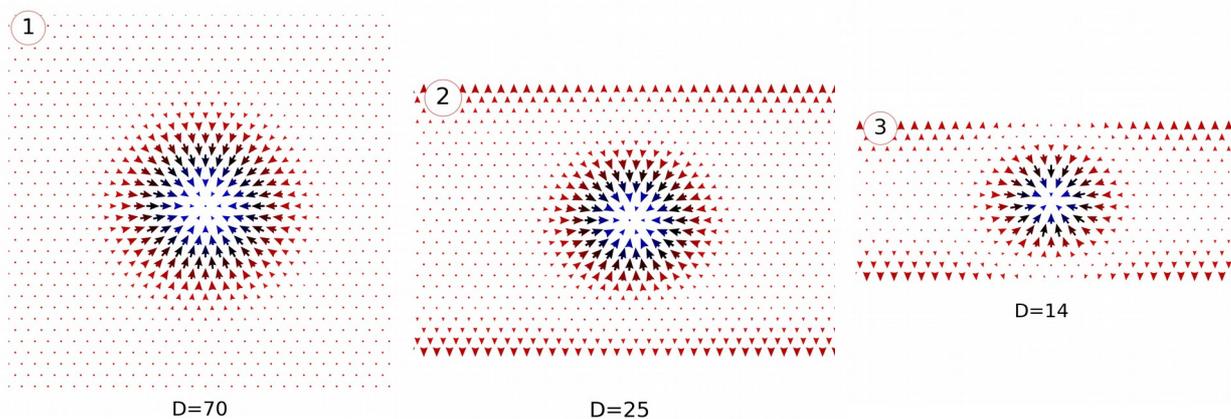


Рис. 2 Скирмионные состояния при различных ширинах дорожки.

Видно, что размер скирмиона уменьшается вместе с шириной дорожки, на которой он локализован. На границах самой дорожки, вследствие потери пространственной однородности магнитные моменты отклоняются от направления, ортогонального поверхности. Когда размер скирмиона становится близок к ширине дорожки,

неколлинеарная структура на границе существенно искажается, что приводит к изменению полной энергии системы.

Для дорожек разной ширины были построены ПМПЭ, соответствующие аннигиляции скирмиона. Размер системы по горизонтали составлял 50 атомных слоев, поэтому размерность энергетической поверхности, на которой строился ПМПЭ, составляла, как правило, несколько тысяч.

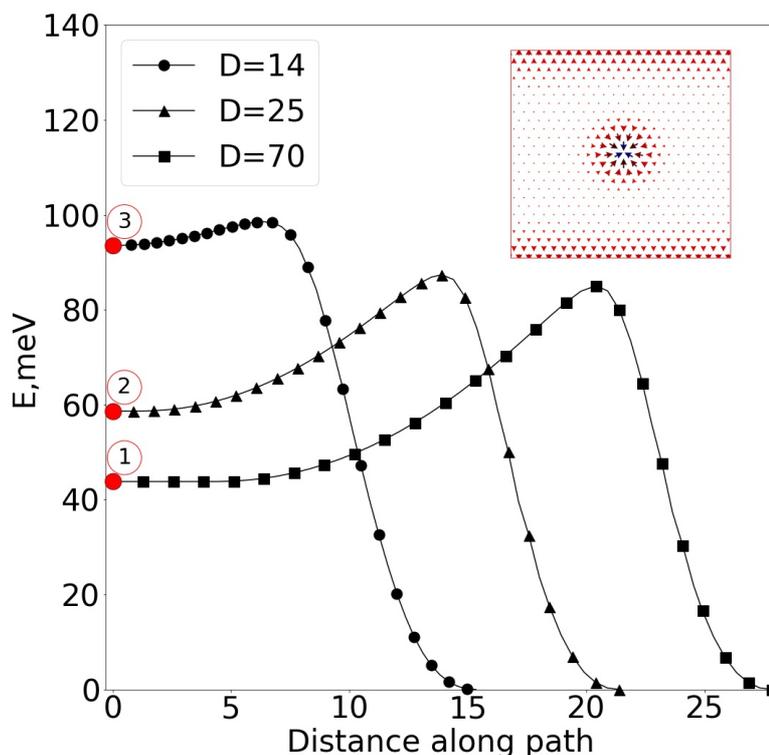


Рис. 3 ПМПЭ для аннигиляции скирмиона внутри дорожки при разных ширинах дорожки. На вставке – магнитная конфигурация в седловой точке.

Рассматривались два механизма аннигиляции скирмиона: внутри дорожки и через границу. На рис. 3 показаны ПМПЭ для первого механизма. Цифры соответствуют конфигурациям, показанным на рис. 2. При уменьшении ширины дорожки энергия скирмиона растет относительно ферромагнитного состояния. Энергия в седловой точке также растет, но гораздо медленнее, поскольку в седловой точке размер неколлинеарной структуры значительно меньше, как видно на вставке на рис. 3. В результате барьер для аннигиляции скирмиона уменьшается, а для рождения – увеличивается при уменьшении ширины дорожки. ПМПЭ для ухода через границу образца показаны на рис. 4. Здесь зависимости аналогичны аннигиляции внутри образца, но активационные барьеры несколько меньше. Когда ширина дорожки существенно превосходит собственный размер скирмиона, процесс аннигиляции через границу можно разбить на два этапа: перемещение к границе, практически не требующее энергии, и перемещение сквозь границу, которое происходит почти так же как и

на более узкой дорожке. Это хорошо видно в случае $D=70$, когда барьер имеет длинный горизонтальный участок, соответствующий движению скирмиона как целого.

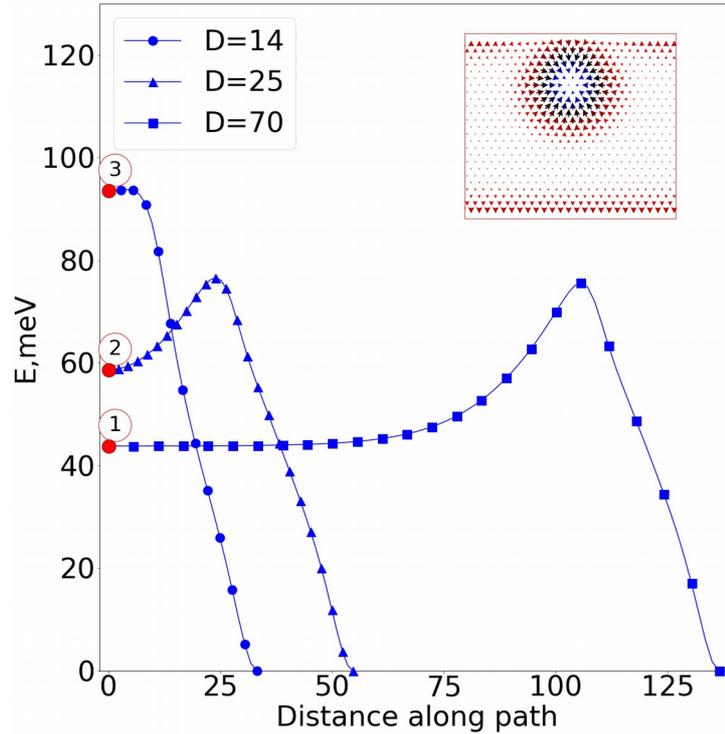


Рис. 4 ПМПЭ для аннигиляции скирмиона с уходом за границу образца при разных ширинах дорожки. На вставке – магнитная конфигурация в седловой точке.

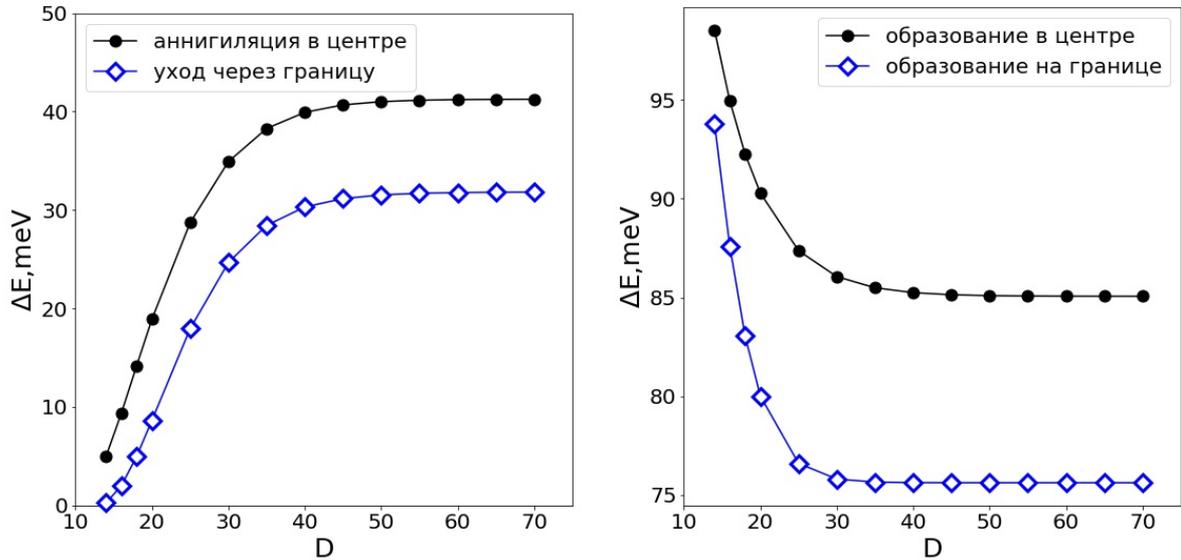


Рис. 5 Барьеры для аннигиляции (слева) и образования (справа) скирмионов на «дорожке» в зависимости от ширины дорожки D . Показаны зависимости для двух разных механизмов: аннигиляция и нуклеация внутри образца (кружки) и через границу образца (ромбы).

На рис. 5 представлены активационные барьеры для рождения и уничтожения скирмионов внутри образца и на границе дорожки как функции ширины дорожки D . Когда ширина дорожки велика по сравнению с собственным размером скирмиона, зависимости от D нет, но барьер для ухода через границу и рождения на границе ниже, чем в центре дорожки.

Аналогичный результат, соответствующий случаю большого D , при моделировании скирмионов в тонком слое Co на подложке тяжелого металла был получен в [3]. При уменьшении D , как было видно и на рис. 3 и 4, барьеры изменяются так, что барьер для аннигиляции и нуклеации на границе остается ниже, чем в центре дорожки.

Представляет интерес выяснить, какое из взаимодействий, входящих в (1), ответственно за изменение барьера при сужении дорожки.

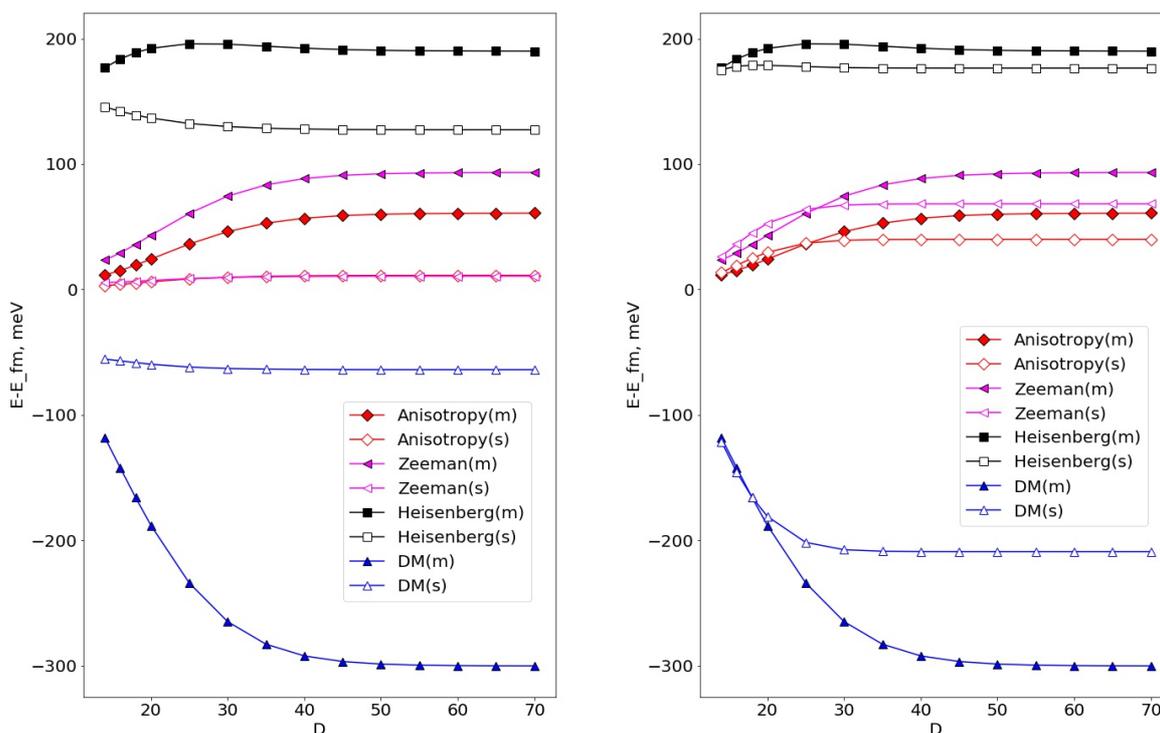


Рис. 6 Вклады разных взаимодействий в энергию в минимуме (m , цветные символы) и в седловой точке (s , белые символы) в зависимости от ширины дорожки D . Слева графики для аннигиляции внутри дорожки, справа – через границу.

Вклады разных взаимодействий представлены на рис. 6. Из графиков видно, что быстрый рост энергии Дзялошинского-Мория в скирмионном минимуме при уменьшении ширины трека является главной причиной, по которой уменьшается барьер для исчезновения, определяемый разностью между энергией в седловой точке и энергией в минимуме. На рис. 7 показана полная энергия в минимуме и седловой точке для разных механизмов аннигиляции.

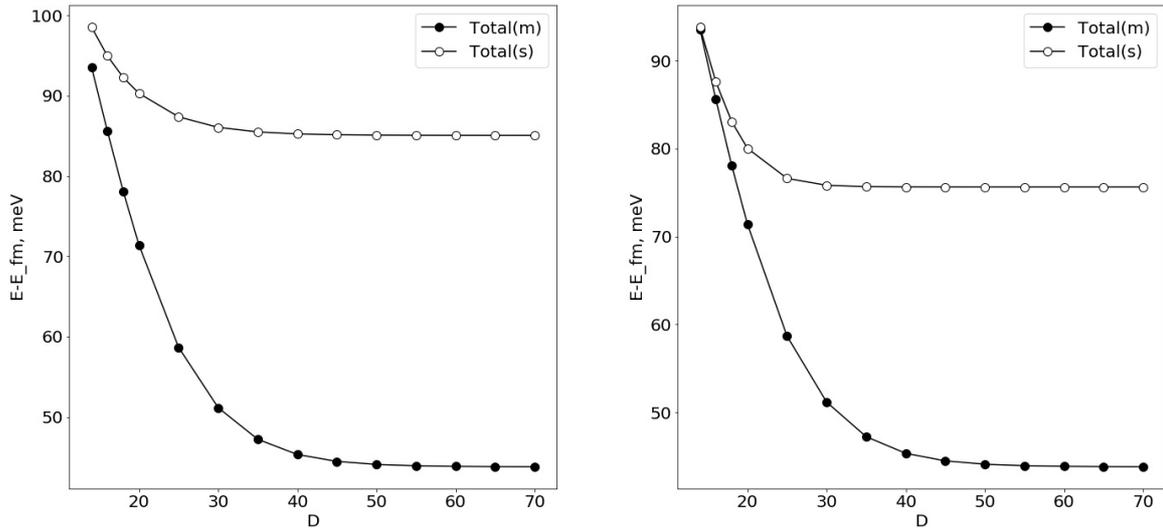


Рис. 7 Полная энергия в минимуме (m, черные символы) и в седловой точке (s, белые символы) в зависимости от ширины дорожки D . Слева графики для аннигиляции внутри дорожки, справа – через границу.

Рассмотрим теперь дорожку переменной ширины с плавным сужением, изображенную на рис. 8. Приближение скирмиона к границе, как было показано выше, увеличивает его энергию. Поэтому можно ожидать, что для прохождения через узкое место потребуется преодоление энергетического барьера. Этот барьер может быть найден тем же методом, что и барьер для аннигиляции, если взять в качестве минимумов на энергетической поверхности состояние скирмиона слева и справа от сужения. Действительно, расчеты показали, что при подходе к узкому месту энергия скирмиона увеличивается, когда его размер становится сравним с областью локализации. Однако, оказалось, что механизм прохода меняется в зависимости от ширины дорожки в наиболее узком месте d . При уменьшении d , барьер сначала увеличивается, а собственный размер скирмиона в процессе перехода – уменьшается (рис. 8a). Когда d становится меньше диаметра скирмиона (12 атомных слоев), он превращается в доменную стенку (рис. 8b). При этом энергия получающейся структуры понижается и становится меньше энергии скирмиона в широкой области, а при дальнейшем сужении – и энергии системы без скирмиона. Соответствующие барьеры вдоль ПМПЭ представлены на рис. 9. Отметим, что идея создания логических элементов на основе превращения скирмионов в доменные стенки и обратно на трек с переменной шириной была предложена в [18]. Моделирование такого процесса с помощью уравнения Ландау-Лифшица при наличии спин-поляризованного электрического тока представлено в [23].

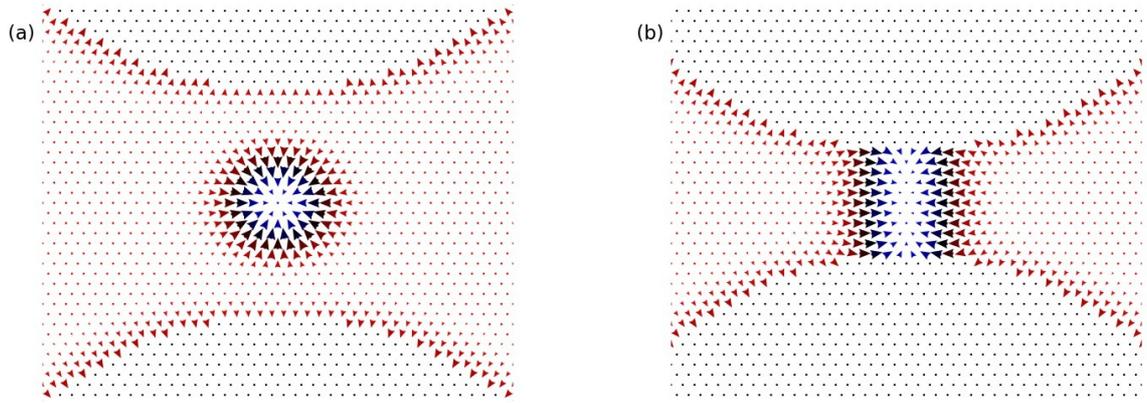


Рис. 8 (а) скирмионное состояние в узкой части трека при $d=23$ соответствует максимуму энергии, (б) доменная стенка при $d=11$ соответствует промежуточному минимуму энергии вдоль пути при переходе скирмиона через узкий участок трека.

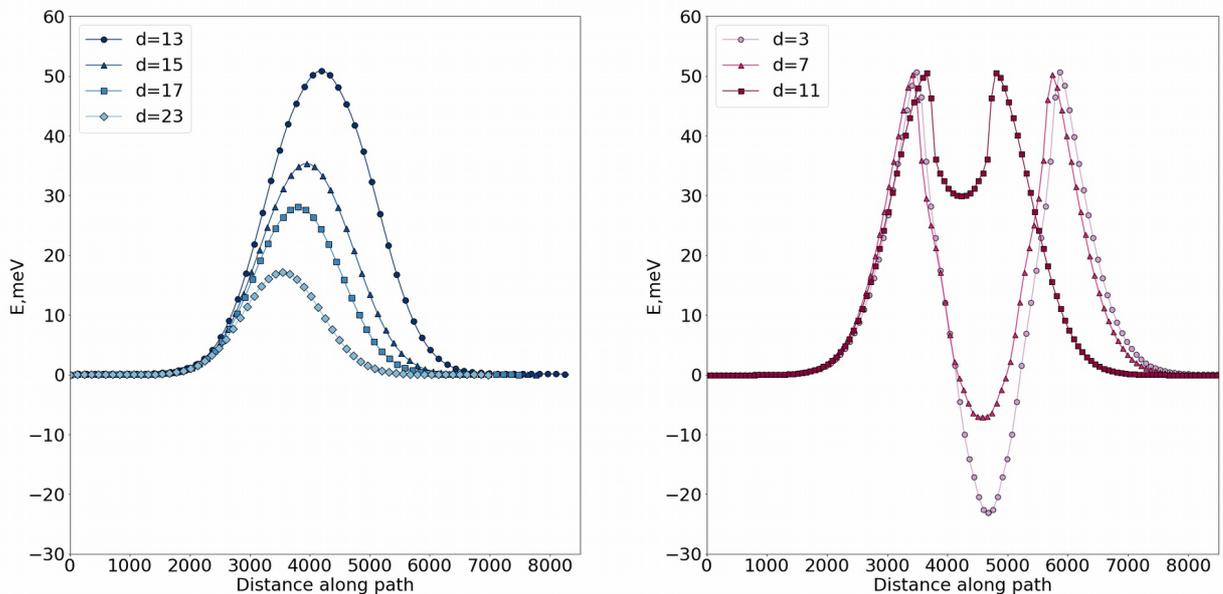


Рис. 9 Пути с минимальным перепадом энергии для движения скирмиона по треку с сужением в 13, 15, 17, 23 атомных слоя (слева) и с промежуточным минимумом, соответствующим доменной стенке, при ширине сужения 3, 7, 11 атомных слоя (справа).

На рис. 10 показана зависимость барьера для прохода через сужение трека и для аннигиляции скирмиона на границе от величины d . Несмотря на то, что барьер для аннигиляции меньше в области перехода к доменной стенке, при наличии спин-поляризованного тока такие переходы возможны.

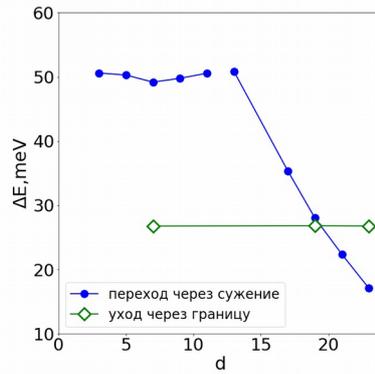


Рис. 10 Барьеры для движения скирмиона по треку с сужением и для исчезновения скирмиона через границу трека в зависимости от ширины сужения.

5. Устойчивость магнитных скирмионов, локализованных на дефектах

Дефекты магнитной и кристаллической структуры, такие, как немагнитные включения, области с измененной анизотропией или магнитные атомы другого сорта, существенно влияют на структуру скирмионов, их динамику и устойчивость [11]. Так в экспериментах по созданию и уничтожению скирмионов при протекании электрического тока с иглы туннельного микроскопа во внешнем магнитном поле отмечалось, что, как правило, скирмионы образуются вблизи дефектов кристаллической структуры [12]. Известно также, как из эксперимента, так и из моделирования на основе уравнений Ландау-Лифшица, что скирмионы могут локализоваться вблизи дефектов, и в этом случае для их перемещения требуются дополнительные усилия, чтобы оторвать их от дефекта [20]. В связи с этим большой интерес представляет анализ устойчивости скирмионов в присутствии дефектов, а также совместное влияние дефектов и конечных размеров образца на их свойства. Эта задача решается в настоящем разделе работы.

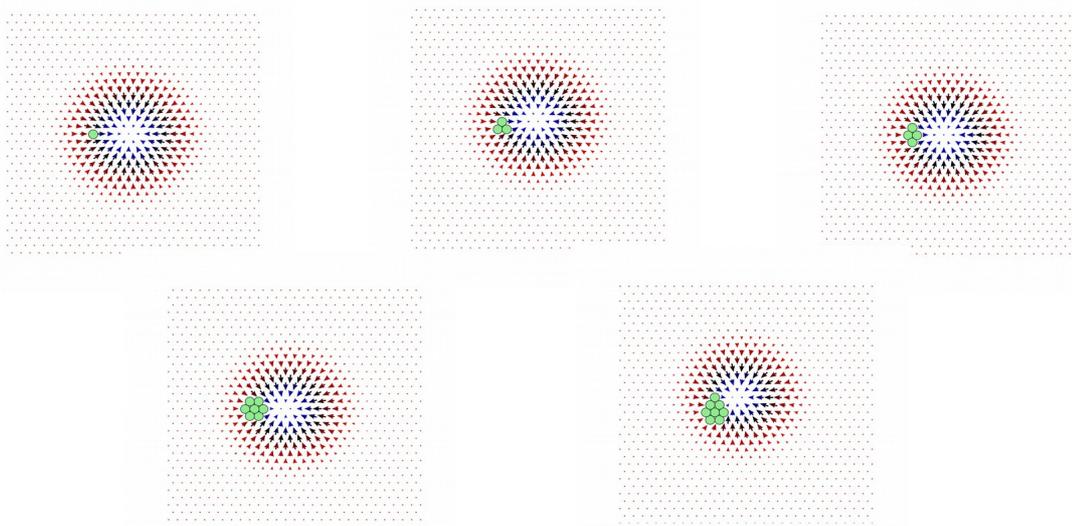


Рис. 11 Расположение скирмиона на немагнитных дефектах разных размеров, при котором достигается минимум энергии системы.

Рассматривается простейший немагнитный дефект, представляющий собой 1, 3, 4, 7, 8 немагнитных атомов или вакансий, образующих компактную группу на двумерной треугольной решетке. На рис. 11 показано взаимное расположение скирмиона и дефекта, отвечающее минимуму энергии. Минимум достигается при положении дефекта в кольцевой области, где перпендикулярная к плоскости поверхности составляющая магнитных моментов равна нулю. Такое расположение наблюдалось и экспериментально методами туннельной микроскопии с разрешением по спину для скирмионов в бислое PdFe на поверхности Ir (111) [21]. Энергия скирмиона на примеси, как показывает расчет, ниже, чем вдали от дефекта, что объясняет экспериментально наблюдаемую локализацию.

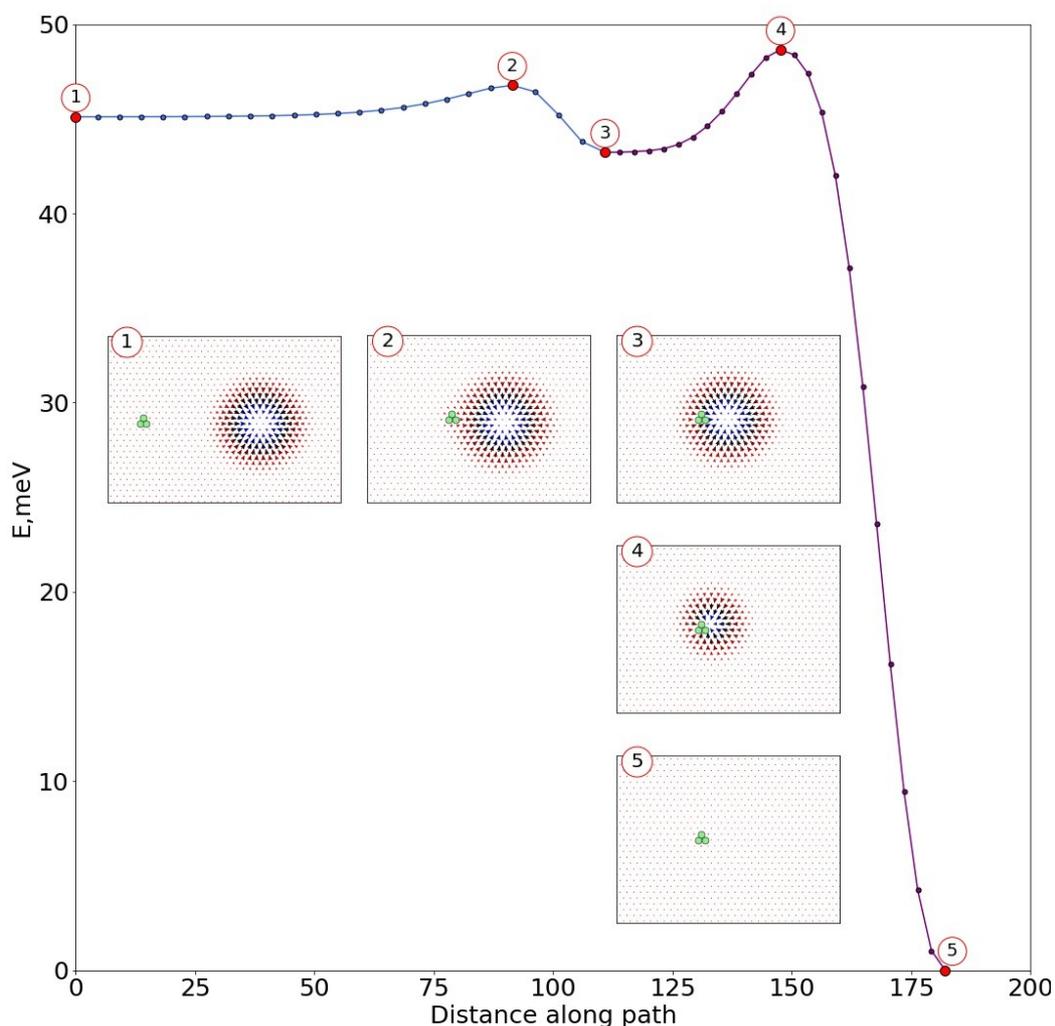


Рис. 12 Кривая 1-2-3 представляет собой ПМПЭ между скирмионом, локализованным на 3-атомном немагнитном дефекте, и скирмионом вдали от дефекта. График 3-4-5 представляет собой ПМПЭ между скирмионом, локализованным на дефекте, и состоянием без скирмиона. На вкладках показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ. Состояния 2 и 4 соответствуют седловым точкам. Скирмион локализован внутри дорожки шириной $D=41$ атом.

Когда известны устойчивые состояния – локализованный на дефекте скирмион и скирмион, находящийся далеко от немагнитного дефекта – методом GNEB можно найти ПМПЭ между этими состояниями и активационный барьер, который нужно преодолеть для локализации и делокализации на дефекте. Соответствующий ПМПЭ 1-2-3 показан на рис. 12 вместе с магнитными конфигурациями вдоль пути. На том же рисунке показан ПМПЭ для аннигиляции скирмиона, локализованного на дефекте. Сравнение с данными, представленными на рис. 5 показывают, что немагнитный дефект сильно уменьшает активационный барьер для аннигиляции скирмиона.

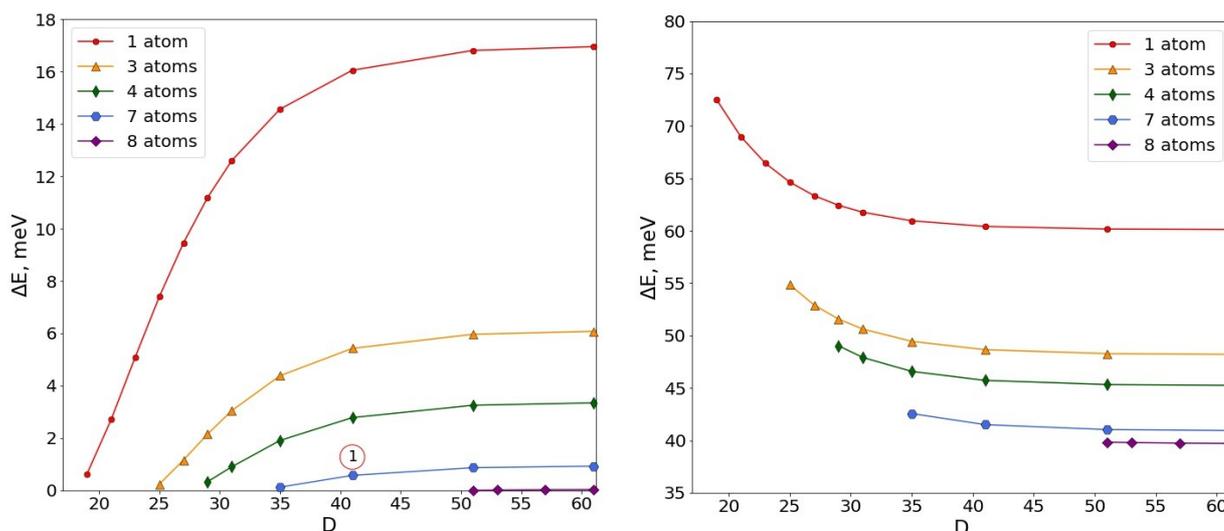


Рис. 13 Энергетический барьер для аннигиляции (слева) и образования (справа) скирмиона на примесях разного размера в зависимости от ширины трека D .

Когда действуют оба фактора: и близость границы образца и немагнитные дефекты, барьеры для аннигиляции понижаются еще больше и предельная ширина трека в которой скирмион может существовать, зависит от размера немагнитных дефектов внутри. На рис. 13 показаны энергетические барьеры для аннигиляции и рождения скирмионов в треках разной ширины на немагнитных дефектах различного размера. Для состояния обозначенного на рис. 13 цифрой (1) при $D=41$ барьер для исчезновения скирмиона на дефекте из 7 атомов составляет меньше 1 meV. Без такого дефекта на дорожке той же ширины он был равен 42 meV (см. рис. 5). На рис. 14 показаны начальное состояние, седловая точка и конечное состояние для перехода (1) на примеси.

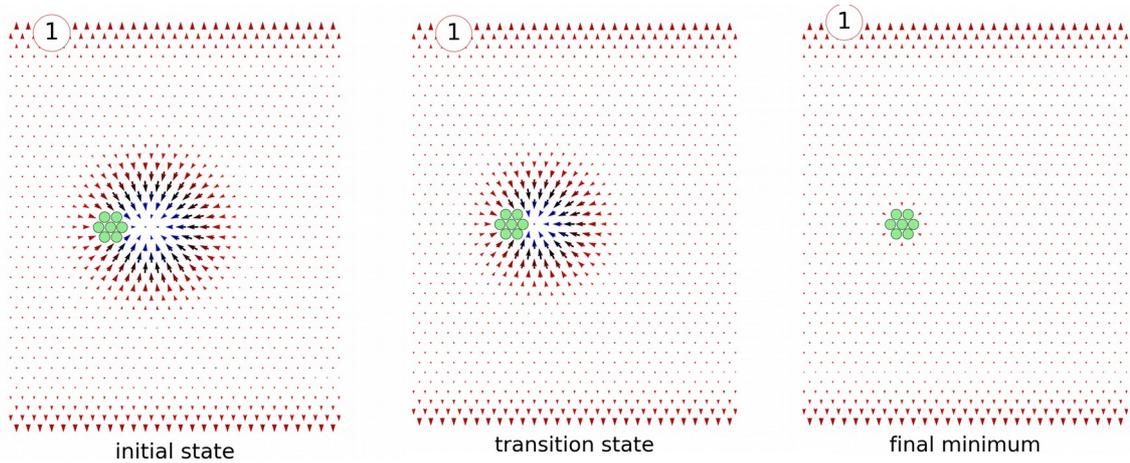


Рис. 14 Аннигиляция скирмиона на семиатомном дефекте при ширине трека $D = 41$ атом. Начальный минимум, переходное состояние и конечный минимум.

Рассмотрим теперь вопрос о барьере для локализации скирмиона на дефекте и уходе с дефекта. На рис. 15 эти барьеры приведены для разных размеров дефекта в зависимости от ширины трека D . Барьер, как для ухода скирмиона с примеси, так и для обратного процесса, растет с увеличением размера примеси. Барьер для присоединения практически не зависит от D , а для ухода – увеличивается при уменьшении D . Следовательно, в более узких треках локализация сильнее. Однако, с уменьшением ширины трека сам скирмион может стать неустойчивым относительно аннигиляции.

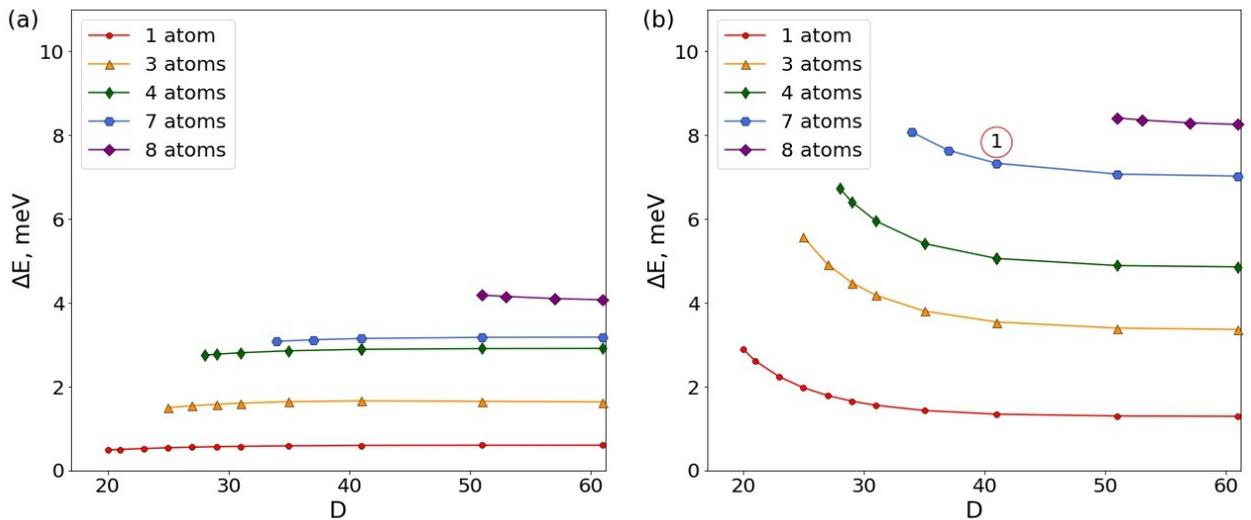


Рис. 15 Энергетический барьер для присоединения (a) и ухода (b) скирмиона с дефекта разного размера в зависимости от ширины дорожки, где локализован скирмион D .

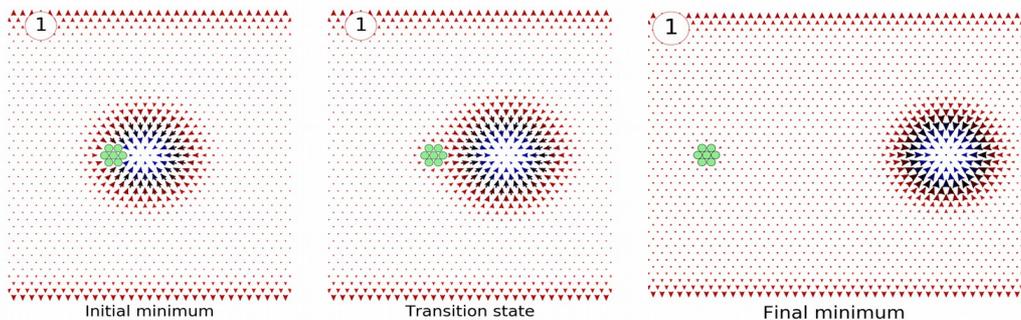


Рис. 16 Уход скирмиона с семиатомной примеси при ширине трека 41 атом: начальный минимум, переходное состояние и конечный минимум.

На рис. 16 показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ: начальное состояние, седловая точка, конечное состояние для ухода скирмиона с дефекта, включающего 7 атомов. Соответствующая точка на рис. 15,b обозначена цифрой (1).

На рис. 17 представлены барьеры для ухода с дефекта и аннигиляции на дефекте как функции ширины трека. Можно сделать вывод, что для малых дефектов (1 и 3 атома) ширина трека влияет на то, какой процесс будет более вероятным: при большой ширине скирмион скорее оторвется, при малой аннигилирует. Если дефект большой, то барьер для аннигиляции меньше, чем для ухода, и при случайных воздействиях, например за счет тепловых флуктуаций, скирмионы будут аннигилировать, не отрываясь от дефекта.

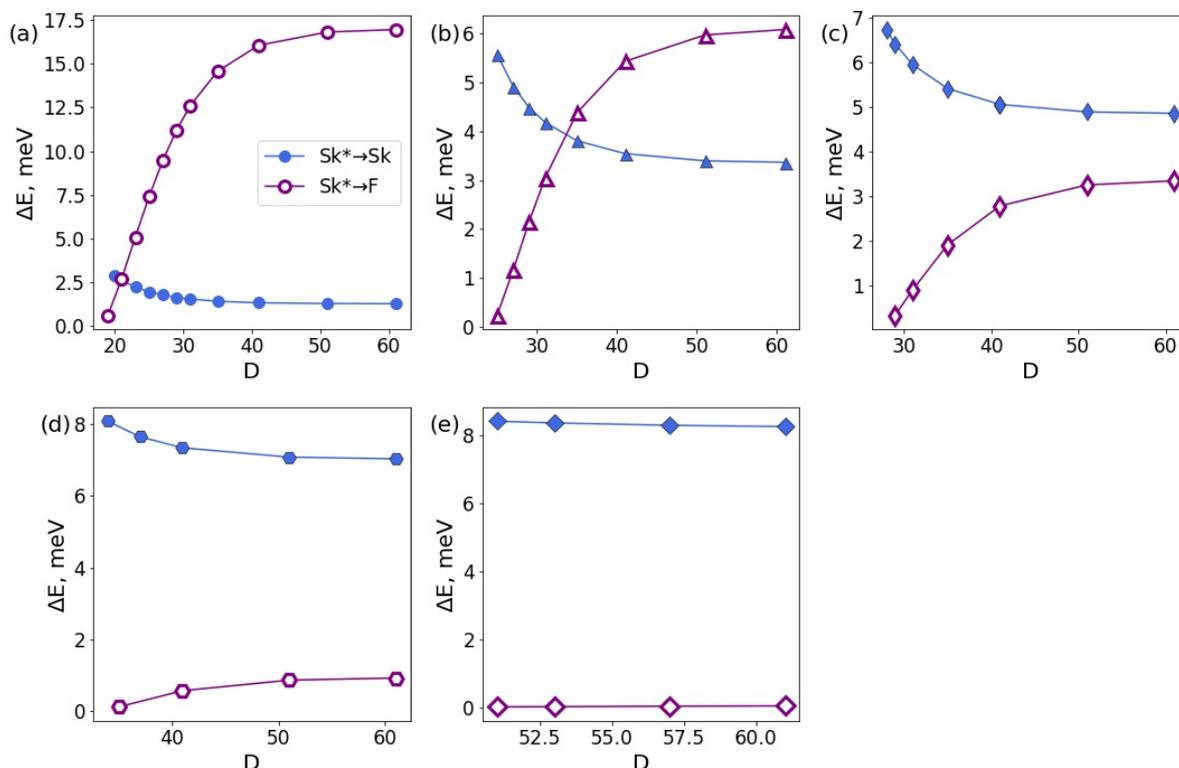


Рис. 17 Зависимость от ширины дорожки энергетических барьеров для ухода скирмиона с дефекта (цветные символы) и для аннигиляции скирмиона (белые символы) для различных размеров примеси: а) 1 атом, б) 3 атома, с) 4 атома, d) 7 атомов, е) 8 атомов.

Для приложений скирмионов в устройствах спинтроники, таких как трековая память, необходимо с достаточной точностью управлять движением скирмиона по треку. Как было показано выше (см. также [22, 3]), между скирмионом и свободными границами трека существует отталкивание. Однако при параметрах, определяемых свойствами образца, а также выбранных внешних условиях (магнитное поле, температура) потенциал отталкивания может оказаться недостаточным для обеспечения устойчивости скирмиона. Локализация скирмионов на примесях представляется полезным свойством для решения этой проблемы. Трек из немагнитных дефектов, расположенных на некотором расстоянии друг от друга (рис.18), позволяет локализовать скирмион в узкой полосе и таким образом представляет альтернативу беговому треку с геометрией полосы. Задача состоит в нахождении оптимального расстояния между соседними дефектами, при котором барьер для перемещения по треку меньше барьера исчезновения и отрыва от дефектов и ухода с трека.

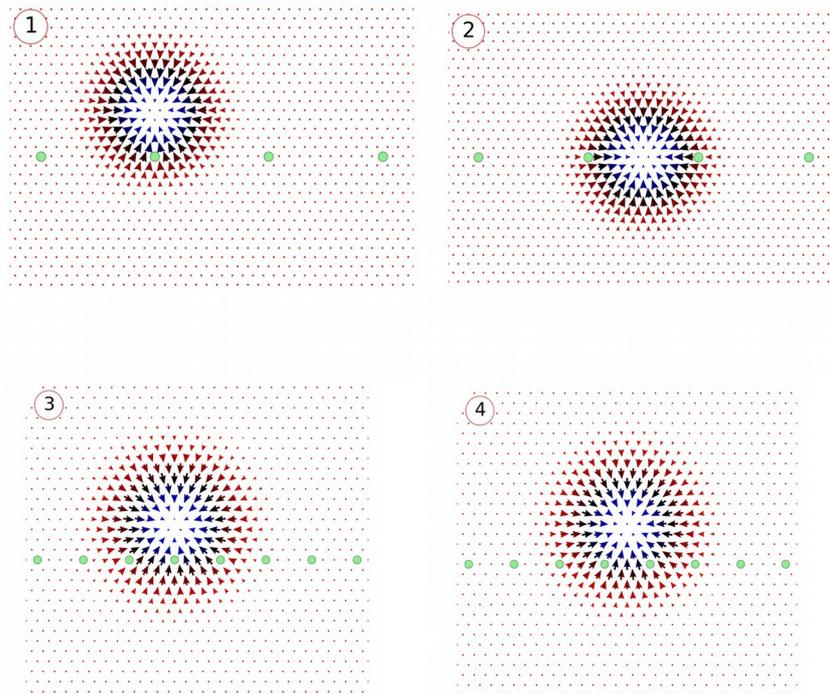


Рис. 18 Начальный и конечный минимумы для скирмиона на треке при расстоянии между дефектами $d= 11$ атомов (1,2) и $d = 4$ атома (3,4).

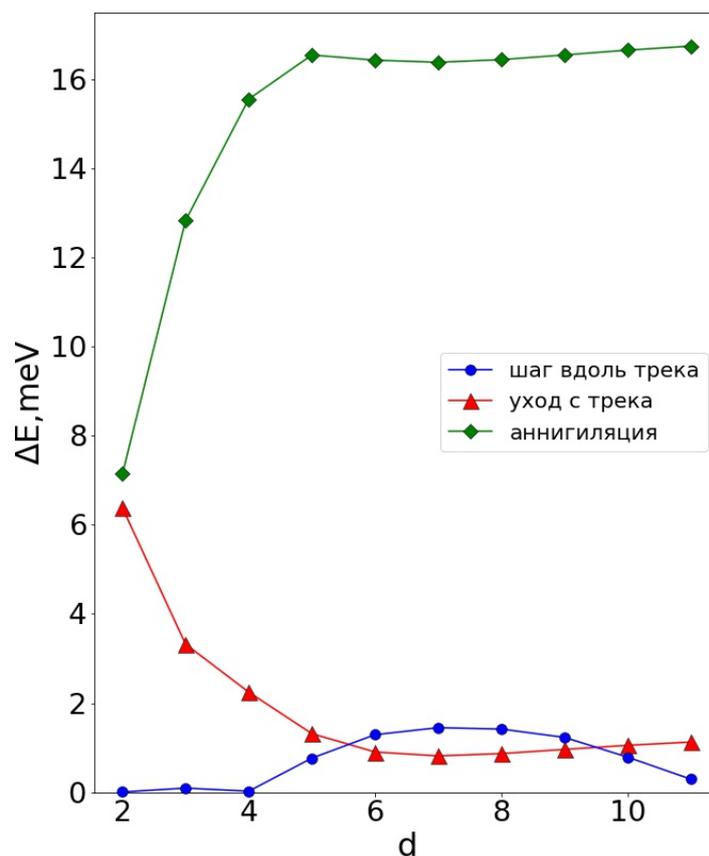


Рис. 19 Энергетический барьер для перехода от одного минимума к другому для скирмиона, локализованного на треке из немагнитных дефектов, ухода скирмиона с дорожки и аннигиляции скирмиона в зависимости от расстояния между дефектами.

Зависимость барьеров, отвечающих каждому из перечисленных процессов, от расстояния между дефектами d , показанная на рис. 19, позволяет подобрать условия, при которых скирмион останется локализованным на дорожке из дефектов даже если границы образца находятся далеко и отталкивающим потенциалом с их стороны можно пренебречь.

Предыдущие расчеты проводились для скирмионов небольшого радиуса. Если размер скирмиона возрастает, то влияние на него точечного дефекта будет меньше. Поэтому представляет интерес вопрос о том, как меняется взаимодействие с примесями при увеличении размера скирмиона. Размером скирмиона можно управлять внешним полем, направленным перпендикулярно поверхности. В рассматриваемых выше системах поле было направлено против намагниченности в центре скирмиона и с его увеличением радиус скирмиона уменьшался [23]. При понижении поля радиус скирмиона увеличивается и наряду с минимумом, соответствующим положению дефекта в кольцевой области на границе скирмиона, появляется второй локальный минимум: дефект в центре скирмиона (рис. 20). Изменение магнитного поля меняет энергетическую поверхность таким образом, что

максимум переходит в минимум. Было найдено критическое значение поля, когда происходит такой переход $B_c=0,067$ J/ μ .

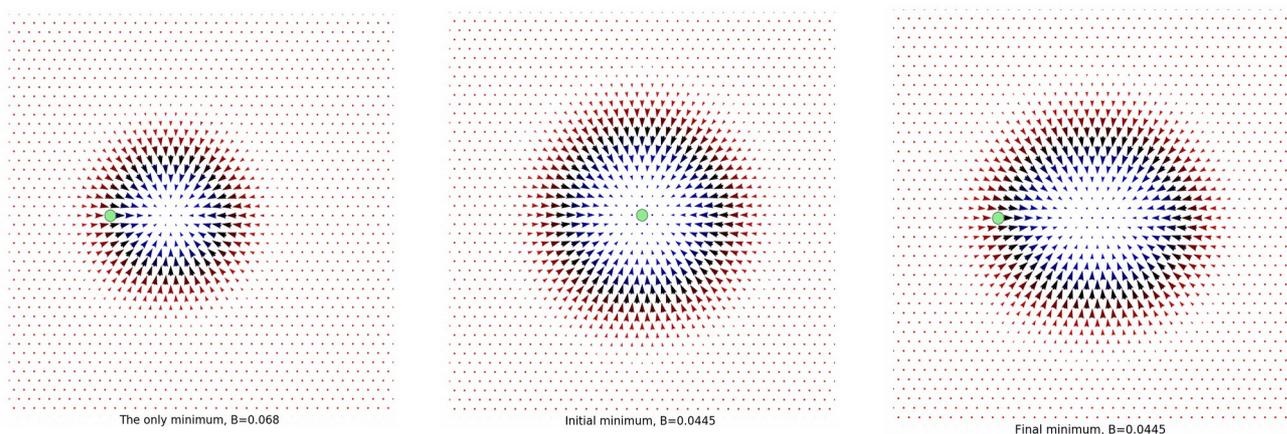


Рис. 20 Дефект в кольцевой области $S_z=0$ является единственным минимумом при поле $B > B_c$. Дефект в центре и в кольцевой области $S_z=0$ являются локальными минимумами при поле $B < B_c$.

На рис. 21 приведены ПМПЭ для системы в разных магнитных полях и показано, как при изменении внешнего магнитного поля формируется второе (метастабильное) положение немагнитного дефекта, соответствующее локальному минимуму энергии.

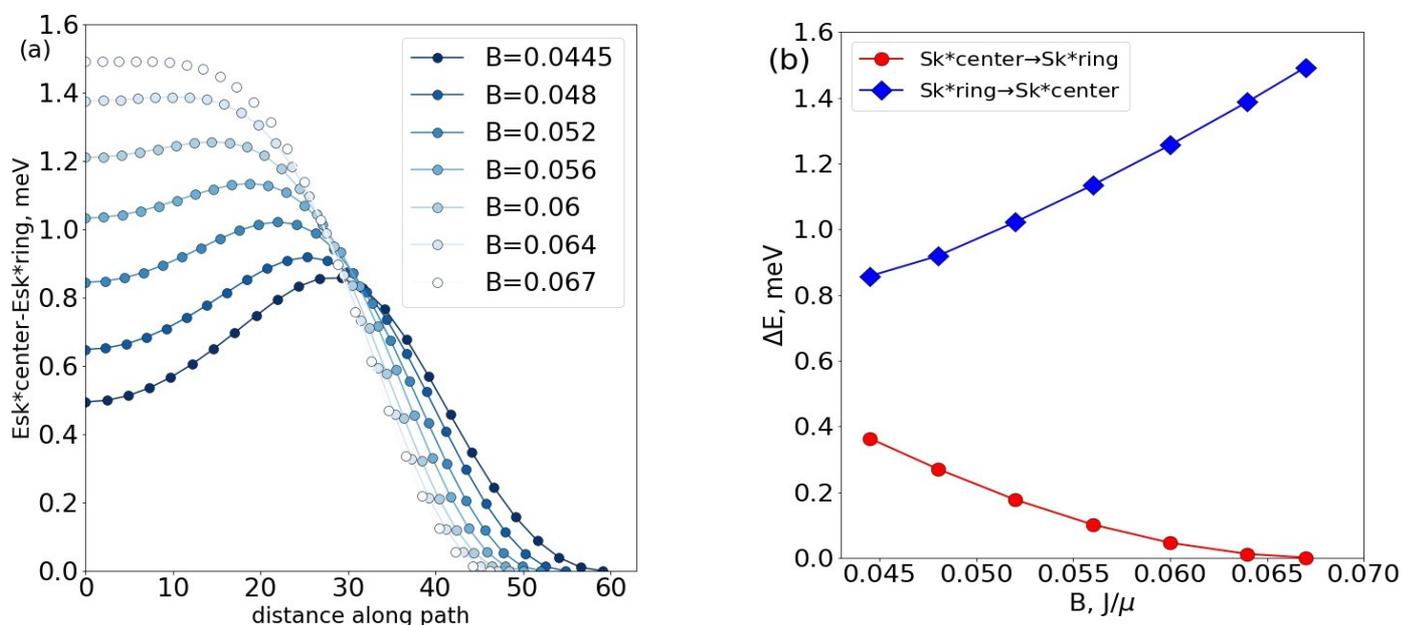


Рис. 21 (а) ПМПЭ между скирмионом с немагнитным дефектом в центре и скирмионом с дефектом в кольце $S_z=0$ в диапазоне полей (0,0445, 0,067) J/ μ . Энергия отсчитывается от состояния скирмиона с дефектом в кольце $S_z=0$. (б) Зависимость барьеров от магнитного поля.

7. Заключение

Для количественного исследования устойчивости магнитных состояний скирмионов была использована теория переходного состояния для магнитных степеней свободы. На многомерной энергетической поверхности системы находились ПМПЭ, максимумы вдоль которых определяли активационные барьеры для соответствующих переходов: аннигиляция и нуклеация скирмионов на треке конечной ширины, локализация и отрыв скирмиона от примеси, проход скирмиона через сужение на треке и др.

Для системы Pd/Fe/Ir(111), в которой экспериментально наблюдались скирмионы [15,11,12], было получено, что активационные барьеры как для аннигиляции, так и для нуклеации скирмиона на границе образца меньше, чем в центре при всех значениях ширины дорожки. Таким образом, способ записи и удаления скирмионов на границе представляется более энергетически выгодным для приложений в будущих устройствах памяти на основе скирмионов.

Был исследован случай дорожки с сужением и найдены активационные барьеры, необходимые для прохода через узкое место. При этом для достаточно узких дорожек предсказан механизм прохода скирмиона, сопровождающийся превращением его в доменную стенку и обратно. Этот механизм может стать основой для работы логических элементов в будущем [18].

Исследован вопрос о влиянии немагнитных дефектов на устойчивость скирмионных состояний, а также совместное влияние дефектов и конечных размеров образца на их свойства. Получено объяснение наблюдаемой экспериментально локализации скирмионов на дефектах [21] и того факта, что под действием тока иглы туннельного микроскопа скирмионы рождаются, как правило, вблизи дефектов [12].

На основе эффекта локализации скирмионов на немагнитных дефектах предложена альтернативная идея реализации бегового трека в виде дорожки из дефектов. Исходя из найденных барьеров для передвижения, аннигиляции и ухода с трека, определено оптимальное расстояние между примесями.

Для скирмионного состояния, локализованного на примеси, при уменьшении магнитного поля было обнаружено появление второго локального энергетического минимума, соответствующего расположению примеси в центре скирмиона.

Результаты работы были представлены на международном симпозиуме «Нанофизика и наноэлектроника», Нижний Новгород 12-17 марта, 2017 г. (устный доклад) [24], международном симпозиуме «Hysteresis modeling and micromagnetics», Барселона, 29-31 мая, 2017 (устный доклад) [25]. На международном симпозиуме MISM 2017, Москва, 1-5 июля доклад с результатами работы принят в качестве приглашенного.

Список литературы

1. Magnetic skyrmions: from fundamental to applications / Finocchio G. [et all] // J Phys. D: Appl. Phys. 2016. **49**, 423001
2. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures / Sampaio J. [et all] // Nat. Nanotech. 2013. **8**, 839
3. Thermal stability and topological protection of skyrmions in nanotracks / Cortes-Ortuno D. [et all] [Электронный ресурс] URL: <https://arxiv.org/abs/1611.07079> (дата обращения: 8.03.2017).
4. Bessarab P. F., Uzdin V. M., Jónsson H. Harmonic transition-state theory of thermal spin transitions, // Phys. Rev. B **85**, 2012. 184409
5. Bessarab P. F., Uzdin V. M., Jónsson H. Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation // Computer Physics Communications. 2015. Vol 196.
6. Parkin S. S. P., Hayashi M., Thomas L. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory // Science. 2008. **320**, 190
7. Direct Observation of Domain-Wall Configurations Transformed by Spin Currents / Kläui M. [et all] // Phys. Rev. Lett. 2005. **95**, 026601
8. Fert A., Cros V., Sampaio J. Skyrmions on the track // Nat. Nanotech.. 2013. **8**, 152
9. Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets / Woo S. [et all] // Nat. Mater. 2016. **15**. 501
10. Nagaosa N., Tokura Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions // Nat. Nanotech.. 2013. **8**, 899
11. Wiesendanger R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics // Nature reviews. Materials. 2016. **1**, 16044
12. Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions / Romming N. [et all] // Science. 2016. **341**, 636
13. Complex magnetic phase diagram and skyrmion lifetime in an ultrathin film from atomistic simulations/ Rozsa, L. [et al] // Phys. Rev. B 2016. **93**, 024417
14. Rohart S., Miltat J., Thiaville A. Path to collapse for an isolated Néel skyrmion // Phys. Rev. B **93**, 2016. 214412
15. Stability of single skyrmionic bits / Hagemester, J. [et al] // Nat. Commun. 6:8455 2015. doi:10.1038/ncomms9455.
16. G. Henkelman and H. Jónsson, A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // J. Chem. Phys. 2000 **113**, 9901
17. Lobanov I.S., Jónsson H., Uzdin V.M. Mechanism and activation energy of magnetic skyrmion annihilation obtained from minimum energy path calculations // Phys. Rev. B. 2016. **94**, 174418

18. Zhang X., Ezawa M., Zhou J. Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions // *Sci. rep.* 2015. **5**, 9400 doi:10.1038/srep09400
19. Zhou Y., Ezawa M. A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in a junction geometry// *Nat. Comm.* 2014. **5**, 4652, doi:10.1038/ncomms5652
20. Müller J., Rosch A. Capturing of a magnetic skyrmion with a hole // *Phys. Rev. B* 2015. **91**, 054410
21. Pinning and movement of individual nanoscale magnetic skyrmions via defects / Hanneken C. [et all] // *New J. Phys.* 2016. **18**, 055009
22. Skyrmion-skyrmion and skyrmion-edge repulsions in skyrmion-based racetrack memory / Zhang X.[et all] // *Sci. rep.* 2015. **5**, 7643, doi:10.1038/srep07643
Romming N., Kubetzka A., Hanneken Ch. Field-Dependent Size and Shape of Single Magnetic Skyrmions // *Phys. Rev. Lett.* 2015. **114**, 177203
23. Romming N., Kubetzka A., Hanneken Ch. Field-Dependent Size and Shape of Single Magnetic Skyrmions // *Phys. Rev. Lett.* 2015. **114**, 177203
24. М. Н. Поткина, И. С. Лобанов, В. М. Уздин «Устойчивость магнитных скирмионов в пространственно ограниченных системах», сборник трудов международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника», том 1, с. 226, Нижний Новгород, 12-17 марта, 2017 г.
25. Valery M. Uzdin, Maria N. Potkina, Igor S. Lobanov, Hannes Jónsson "The effect of confined geometry and defects on the thermal stability of skyrmions", Abstracts of 11th Symposium on Hysteresis Modeling and Micromagnetics (HMM 2017), Barselona, May, 29th to 31st 2017. [Электронный ресурс] URL: <https://sites.google.com/site/hmmbcn2017/program/abstracts>