#### Санкт-Петербургский государственный университет

## Загитов Айнур Ильнурович

# Выпускная квалификационная работа Динамика скирмионных состояний

Уровень образования: бакалавриат Направление 03.03.02 «Физика» Основная образовательная программа CB.5011.2019 «Физика»

> Научный руководитель: профессор, кафедра статистической физики, д.ф. - м.н. Уздин Валерий Моисеевич

Рецензент: профессор, Университет ИТМО, д.ф. - м.н. Попов Игорь Юрьевич

Санкт-Петербург 2023 г.

# Содержание

Введение		3
Глава 1.	Обобщенное уравнение Тиля для "дышащих"	
	скирмионов	5
1.1.	Энергия спиновой системы	6
1.2.	Уравнение ЛЛГ и анзац для скирмиона переменного радиуса	7
1.3.	Эффективное магнитное поле $B_{eff}$	9
1.4.	Вывод обобщенного уравнения Тиля для скирмиона с пере-	
	менным радиусом	9
1.5.	Примесь и потенциал взаимодействия с ней	13
1.6.	Уравнение Тиля для скирмиона постоянного радиуса	14
Глава 2.	Численное моделирование	15
2.1.	Рассчёт градиентов и интеграллов	15
2.2.	Расчёт потенциала взаимодействия с примесью	16
2.3.	Локальный скирмионный минимум	16
2.4.	Расчёт динамики	16
Глава 3.	Сравнительный анализ методов	17
Заключение		21
Список литературы		22

#### Введение

Магнитные скирмионы представляют собой неколлинеарные локализованные структуры, устойчивость которых относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий связывают с топологическими свойствами их магнитных конфигураций. Для этих систем можно определить отличный от нуля "топологический заряд"— целое число, остающееся постоянным при непрерывном изменении намагниченности. Пространственно однородному, например, ферромагнитному состоянию соответствует нулевой топологический заряд. Таким образом, при непрерывных изменениях намагниченности, связанных с тепловыми флуктуациями и случайными возмущениями, переход из скирмионного состояния в ферромагнитное невозможен [1]. Для магнитных моментов, локализованных на узлах дискретной решетки, строго говоря, топологические аргументы неприменимы, и топологическая защита должна проявляться через величину энергетических барьеров, разделяющих топологически различные состояния [2].

Скирмионы были экспериментально обнаружены в квазидвумерных магнитных материалах с антисимметричным обменным взаимодействием Дзялошинского-Мории (ВДМ) [3]. Они могут иметь размер от нанометров до микронов и быть устойчивыми даже при комнатных температурах [3]. Это позволяет рассматривать такие топологические структуры в качестве элементов различных спинтронных устройств [4, 5]. Малый размер и способность быстрого перемещения скирмионов под действием малых спин-поляризованных токов делает их перспективными кандидатами на роль битов информации в устройствах беговой памяти [6].

В то же время малые размеры скирмионных состояний приволят к тому, что их динамика чувствительна к тепловым флуктуациям, структурным и магнитным дефектам, которые невозможно полностью исключить в реальных магнитных образцах на нано и микромасштабах. Влияние таких дефектов на движение топологических солитонов, к которым относятся скирмионы, необходимо учитывать при разработке новых технологий, включающих сверхплотную и быструю магнитную память, моделирование нейронных систем и элементов искусственного интеллекта.

3

Динамику магнитных топологических солитонов можно моделировать на основе уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ)[7]. Однако, несмотря на малый размер скирмионов они могут включать десятки тысяч и даже миллионы магнитных моментов и, если моделировать структуры с атомным разрешением на основе уравнений ЛЛГ, это может оказывается невозможным из-за вычислительных проблем, особенно если необходимо исследовать динамикуу нескольких скирмионов на больших промежутках времени. Аналогичные проблемы возникали при моделировании движения доменных стенок в магнитных системах, которые тоже можно использовать для хранения и передачи информации [6].

Задачу расчета движения доменных стенок можно существенно упростить, если считать, что перемещение доменной стенки, содержащей большое количество магнитных моментов, происходит без изменения формы магнитного профиля. В этом случае задание положения одной выделенной точки доменной стенки однозначно определяет всю магнитную конфигурацию и вместо решения системы уравнений для каждого магнитного момента достаточно решать уравнения движения только для нее. Уравнения для движения жесткой доменной стенки, получающиеся путем подстановки соответствующего анзаца для формы стенки в систему уравнений ЛЛГ были получены в работе А. Тиля [8]. Аналогичный подход может быть реализован и для движения скирмионов. Для квазидвумерных систем положение скирмиона на плоскости задается х и у координатами его центра [1]. При этом движение скирмиона может вызываться спин-поляризованным током [9], неоднородным магнитным полем [10] или градиентом анизотропии [11]. Соответствующие члены, появляющиеся в правой части уравнений движения, аналогичны силам в уравнениях для движения материальной точки [12, 13].

Хотя приближение жесткой формы позволяет описывать широкий класс динамических явлений с топологическими солитонами, оно иногда оказывается недостаточным, особенно в случае, когда необходимо точное определение положения скирмиона с течением времени. Поэтому была развита теория, позволяющая выходить за рамки этого приближения, учитывая температурные эффекты [14], и усреднение по высокочастотным возбужденным состояниям локализованной магнитной структуры [15].

4

Вместе с тем, у скирмионных структур наряду с модами, соответствующими их движению как целого, существуют другие квазинулевые моды и низкочастотные возбуждения [16], которые могут существенно влиять на магнитный профиль и движение, особенно в присутствии неоднородностей.

В данной работе исследовано влияние одной из таких мод, соответствующей изменению радиуса скирмиона, путем включения в используемый анзац дополнительной степени свободы. Будет выведено уравнение, обобщающее уравнение Тиля и исследовано описание движения скирмионов в неоднородной системе с точечными примесями, на основе полного уравнения ЛЛГ и обобщенного уравнения Тиля. Исследуемая система, благодаря наличию примесей и дефектов, имеет неоднородное распределение анизотропии. Размер неоднородности предполагается малым по сравнению с размерами скирмионов, составяляя всего несколько узлов решетки. Влияние таких неоднородностей на динамику скирмионов представляет большой практический интерес [17, 18].

## Глава 1. Обобщенное уравнение Тиля для "дышащих" скирмионов

Будем рассматривать двумерную спиновую систему, описываемую обобщенным гамильтонианом Гейзенберговского типа, который наряду с симметричным обменным взаимодействием включает антисимметричный обмен (т.е. ВДМ), взаимодействие с полем анизотропии и внешним магнитным полем. Если параметры системы однородны, изолированные скирмионы, представляющие собой метастабильные состояния, согласно уравнению ЛЛГ, движутся под действием электрического тока равномерно, сохраняя размер и форму. При наличии "точечных" примесей - областей с отличающейся анизотропией скирмионы могут изменить размер, форму, траекторию движения и скорость. Ниже будет выведено обобщенное уравнение Тиля в предположении, что у скирмиона, вследствие с взаимодействия с примесями, меняется радиус  $\rho$  при сохранении круговой симметрии. В дальнейшем траектории движения, полученные на основе решения уравнения ЛЛГ будет сравниваться с траекториям, полученными из стандартного и обобщенного уравнения Тиля учитывающего изменение радиуса (TR).

#### 1.1 Энергия спиновой системы

В рамках непрерывной модели будем рассматривать двумерное поле направлений вектора намагниченности, задаваемое единичными классическими векторами S(r) (||S(r)|| = 1)

Энергию системы в обобщенной модели Гейзенберга запишем следующим образом:

$$E[S] = \iint_{\Sigma} \left( \frac{J}{2} \left[ \nabla S(r) \right]^2 + DS(r) \cdot \left[ \nabla \times S(r) \right] - K(r) S_z(r)^2 - BS_z(r) \right),$$
(1)

где J – константа обменного взаимодействия, D – длина вектора Дзялошинского-Мории, K(r) > 0 описывает анизотропию типа "легкая ось"в направлении оси z, перпендикулярной плоскости системы. Величина B, задающая взаимодействие с магнитным полем, направленным вдоль оси z, учитывает величину намагниченности. Интегрирование идет по двумерной области  $\Sigma$ . Значения констант J, D, B предполагаются одинаковыми во всех точках  $\Sigma$ , а анизотропия однородна за исключением точек  $r_{imp}$ , в которых находятся примеси:  $K(r) = K_0 + K_{imp}(r_{imp})$ .

Энергию можно представить в виде суммы однородной части и вклада от примесей:

$$E = E_0 + E_{imp} \tag{2}$$

Здесь  $E_0 = E[S](K_0)$  - энергия системы в отсутствие примесей;  $E_{imp}$  - энергия, связанная с измененной в местах расположения примесей анизотропией.

Параметры модели выбираются так, чтобы основное состояние системы соответствовало ферромагнитному. При этом существуют другие локально устойчивые состояния с большей энергией, отделенные от основного энергетическим барьером. Одним из таких метастабильных состояний является скирмион, движение которого под действием тока при наличии примесей с измененной анизотропией, будет исследоваться далее.

На рисунке 1 представлено полученное минимизацией (1) состояние, соответставующее изолированному скирмиону. ( $J = 1, D = 0.32, K_0 =$ 

0.07, B = 0.093)



Рис. 1: Скирмион в двумерной модели

# 1.2 Уравнение ЛЛГ и анзац для скирмиона переменного радиуса

Динамика системы будет определяться эффективным магнитным полем  $B_{eff}$  и плотностью электрического тока j. Считая намагниченность единичной, запишем обобщённое уравнение ЛЛГ в виде:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\gamma S \times B_{eff} + \alpha S \times \frac{\partial S}{\partial t} + \tau \tag{3}$$

где эффективное магнитное поле  $B_{eff} = -\frac{\delta E}{\delta S}$  представляет собой вариационную производную функционала энергии по намагниченности,  $\gamma$  – гиромагнитное отношение,  $\alpha$  – параметр затухания Гильберта,  $\tau$  – вращающий момент, возникающий при протекании спин-поляризованного тока с плотностью тока

 $\mathbf{j}_s$ .

$$\tau = S \times \left[ \left( \mathbf{j}_{s} \cdot \nabla \right) S \times S \right] - \beta \left[ S \times \left( \mathbf{j}_{s} \cdot \nabla \right) S \right];$$

первое слагаемое, вращающего момента, адиабатическое, описывает действие переноса спина в предположении, что магнитные моменты носителей тока находятся в равновесии с магнитной подсистемой, второе, неадиабатическое, учитывает отклонение среднего момента электронов от локального направления намагниченности [19]. В дальнейшем мы будем рассматривать случай, когда радиус скирмиона много больше размера примеси и считать, что  $\alpha$ ,  $\beta$ и  $j_s$  не зависят от координаты. Отметим, что использование уравнения ЛЛГ для моделирования движения скирмионов и других топологических солитонов в средах со структурными дефектами и в условиях ограниченной геометрии образца является стандартным теоретическим методом [9]. Однако, он предполагает решение уравнений для каждого магнитного момента, образующего магнитную структуру. Если система достаточно большая и содержит несколько скирмионов, соответствующие расчеты очень трудоемки и для моделирования реальных структур, представляющих практический интерес для разработки нано и микроустройств, целесообразно развить сокращенное описание системы, зависящее от небольшого числа переменных. Именно это будет сделано далее.

Перейдем от описания динамики отдельных магнитных моментов к описанию скирмиона как целого в предположении, что скирмион сохраняет свою форму, но положение его центра и радиус могут меняться. Это приближение аналогично использованному в работе Тиля [8] при описании движения доменных стенок под воздействием тока.

Используем следующий анзац:

$$S(r,t) = S_0 \left( \frac{1}{\rho(t)} \left( r - R(t) \right) \right).$$
 (4)

Здесь  $S_0 = S_0(r)$  это векторное поле направлений намагниченности, определяющее состояние системы со скирмионом в локальном минимуме энергии в отсутствие примеси, R = R(t) – координата центра скирмиона на плоскости,  $\rho = \rho(t)$  – радиус скирмиона.

Для скорости изменения S имеем:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial R_x} \dot{R}_x + \frac{\partial S}{\partial R_y} \dot{R}_y + \frac{\partial S}{\partial \rho} \dot{\rho}, \qquad (5)$$

где трансляционные  $\frac{\partial S}{\partial R_x}$ ,  $\frac{\partial S}{\partial R_y}$  и дыхательные  $\frac{\partial S}{\partial \rho}$  моды выражены через  $S_0(r)$ .

$$\begin{bmatrix} \frac{dS}{dR_x} \end{bmatrix} (r) = -\frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{\partial S_0}{\partial x} \end{bmatrix} (r'); \quad \begin{bmatrix} \frac{dS}{dR_y} \end{bmatrix} (r) = -\frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{\partial S_0}{\partial y} \end{bmatrix} (r')$$
$$\begin{bmatrix} \frac{dS}{d\rho} \end{bmatrix} (r) = -\frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{\partial S_0}{\partial x} \cdot x + \frac{\partial S_0}{\partial y} \cdot y \end{bmatrix} (r')$$

Здесь  $r' = R + \rho \cdot r$ . Точки над  $R_x$ ,  $R_y$  и  $\rho$  обозначают производные по времени.

## **1.3** Эффективное магнитное поле $B_{eff}$

Эффективное поле, аналогично (2), можно разбить на два вклада:  $B_{eff} = -\frac{\delta E_0}{\delta S} - \frac{\delta E_{imp}}{\delta S}$ 

Прямое вычисление вариационной пройзводной позволяет получить:

$$\frac{\delta E_0}{\delta S} = -J\left(\frac{\partial^2 S}{(\partial x)^2} + \frac{\partial^2 S}{(\partial y)^2}\right) - 2D\left(D_x\frac{\partial S}{\partial x} + D_y\frac{\partial S}{\partial y}\right) - (2K_0S_z + B)e_z,$$

где

$$D_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad D_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

В свою очередь

$$\frac{\delta E_{imp}}{\delta S} = -2K_{imp}(r)S_z e_z.$$

## 1.4 Вывод обобщенного уравнения Тиля для скирмиона с переменным радиусом

Для дальнейших вычислений удобно избавиться от векторного произведения  $S \times B_{eff}$ . Для этого векторно домножим уравнение (3) слева  $S \times$ . Без ограничения общности будем считать, что  $B_{eff}$  ортогонально S, и воспользуемся условием нормировки ||S(r)|| = 1:

$$S \times \frac{\partial S}{\partial t} + \alpha \frac{\partial S}{\partial t} = -\gamma \frac{\delta E}{\delta S} + \tau \times S$$

$$\tau \times S = -\left[ (\mathbf{j}_s \cdot \nabla) S \times S \right] + \beta (\mathbf{j}_s \cdot \nabla) S$$
(6)

Чтобы получить аналог уравнения Тиля, мы должны подставить (5) в (6), спроецировать его на трансляционные и "дыхательную" моды и проинтегрировать по всей системе  $\Sigma$ .

На первом шаге, сразу после подстановки (5) в (6) получим:

$$S \times \left(\frac{dS}{dR_x}\dot{R}_x + \frac{dS}{dR_y}\dot{R}_y + \frac{dS}{d\rho}\dot{\rho}\right) + \alpha \left(\frac{dS}{dR_x}\dot{R}_x + \frac{dS}{dR_y}\dot{R}_y + \frac{dS}{d\rho}\dot{\rho}\right) = -\gamma \frac{\delta E}{\delta S} - \left[(\mathbf{j}_s \cdot \nabla)S \times S\right] + \beta (\mathbf{j}_s \cdot \nabla)S$$

Далее спроецируем полученное на моды  $\frac{dS}{dR_i}$ , где  $R_i \in \{R_x, R_y, \rho\}$ :

$$\left( \left[ S \times \frac{dS}{dR_x} \right] \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{R}_x + \left( \left[ S \times \frac{dS}{dR_y} \right] \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{R}_y + \left( \left[ S \times \frac{dS}{d\rho} \right] \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{\rho} + \alpha \left( \left( \frac{dS}{dR_x} \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{R}_x + \left( \frac{dS}{dR_y} \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{R}_y + \left( \frac{dS}{d\rho} \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \dot{\rho} \right) = -\gamma \left( \frac{\delta E}{\delta S} \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) - \left( \left[ (\mathbf{j}_s \cdot \nabla) S \times S \right] \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) + \beta \left( (\mathbf{j}_s \cdot \nabla) S \cdot \frac{dS}{dR_i} \right) \right)$$

Проинтегрируем каждое из трёх полученных уравнений по  $\Sigma$  и получим систему:

$$(V + \alpha Q) \begin{pmatrix} \dot{R}_x \\ \dot{R}_y \\ \dot{\rho} \end{pmatrix} = -\gamma \tilde{W} - \gamma U + \tilde{T}$$

Где V и Q матрицы (3х3), компоненты которых можно вычислить по формулам:

$$V_{ij} = \iint_{\Sigma} \left[ S \times \frac{dS}{dR_j} \right] \cdot \frac{dS}{dR_i} dr; \quad Q_{ij} = \iint_{\Sigma} \frac{dS}{dR_j} \cdot \frac{dS}{dR_i} dr \quad (R_i, R_j \in \{R_x, R_y, \rho\});$$

Верхний левый моном матрицы V диагонален, при этом диагональные элементы этого монома одинаковы и равны топологическому заряд скирмиона.  $\tilde{W}$  это столбец из 3х элементов, связанных с проекцией одной из компонент эффективного магнитного поля  $\frac{\delta E_0}{\delta S}$  на моды, он вычисляется по формуле:

$$\tilde{W} = \begin{pmatrix} \tilde{W}_x^J + \tilde{W}_x^D + \tilde{W}_x^K \\ \tilde{W}_y^J + \tilde{W}_y^D + \tilde{W}_y^K \\ \tilde{W}_\rho^J + \tilde{W}_\rho^D + \tilde{W}_\rho^K \end{pmatrix}; \quad \tilde{W}_i^j = \iint_{\Sigma} \tilde{H}_j \cdot \frac{dS}{dR_i} dr \quad (\tilde{H}_i, \tilde{H}_j \in \{H_J, H_D, H_K\})$$

где векторные поля  $\tilde{H}_J$ ,  $\tilde{H}_D$ ,  $\tilde{H}_K$  равны:

$$\tilde{H}_J = -J\left(\frac{\partial^2 S}{(\partial x)^2} + \frac{\partial^2 S}{(\partial y)^2}\right); \quad \tilde{H}_D = -2D\left(D_x\frac{\partial S}{\partial x} + D_y\frac{\partial S}{\partial y}\right)$$
$$\tilde{H}_K = -\left(2K_0S_z + B\right)e_z$$

*U* представляет собой столбец из 3х элементов, имеющий смысл потенциала взамодействия с примесью. Он вычисляется по следующей формуле:

$$U = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} \frac{\delta E_{imp}}{\delta S} \cdot \frac{dS}{dR_{x}} dr \\ \iint_{\Sigma} \frac{\delta E_{imp}}{\delta S} \cdot \frac{dS}{dR_{y}} dr \\ \iint_{\Sigma} \frac{\delta E_{imp}}{\delta S} \cdot \frac{dS}{d\rho} dr \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dE_{imp}}{dR_{x}} \\ \frac{dE_{imp}}{dR_{y}} \\ \frac{dE_{imp}}{d\rho} \end{pmatrix}$$

 $\tilde{T}$  — также столбец из 3х элементов, связанных с проекциями  $\tau$  на выбранные моды. Они вычисляется следующим образом:

$$\tilde{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{j}_s \cdot (\tilde{A}_x - \beta C_x) \\ \mathbf{j}_s \cdot (\tilde{A}_y - \beta C_y) \\ \mathbf{j}_s \cdot (\tilde{A}_\rho - \beta C_\rho) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{A}_{i} = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} \left[ \frac{dS}{dR_{x}} \times S \right] \cdot \frac{dS}{dR_{i}} dr \\ \\ \iint_{\Sigma} \left[ \frac{dS}{dR_{y}} \times S \right] \cdot \frac{dS}{dR_{i}} dr \end{pmatrix} \quad C_{i} = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} \left( \frac{dS}{dR_{x}} \cdot \frac{dS}{dR_{i}} \right) dr \\ \\ \iint_{\Sigma} \left( \frac{dS}{dR_{y}} \cdot \frac{dS}{dR_{i}} \right) dr \end{pmatrix}$$

И наконец, подставим анзац (5), сделаем замены переменных в интеграллах и получим:

$$(V + \alpha Q) \begin{pmatrix} \dot{R}_x \\ \dot{R}_y \\ \dot{\rho} \end{pmatrix} = -\gamma (U(R, \rho) - W(\rho)) + \begin{pmatrix} \mathbf{j}_s \cdot (A_x + \beta C_x) \\ \mathbf{j}_s \cdot (A_x + \beta C_y) \\ \mathbf{j}_s \cdot (A_x + \beta C_z) \end{pmatrix}$$
(7)  

$$V_{ij} = \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_j] \cdot G_i dr; \quad Q_{ij} = \iint_{\Sigma} G_j \cdot G_i dr \quad (i, j \in \{x, y, \rho\});$$

$$A_i = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_x] \cdot G_i dr \\ \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_y] \cdot G_i dr \end{pmatrix}; \quad C_i = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} G_x \cdot G_i dr \\ \iint_{\Sigma} G_y \cdot G_i dr \end{pmatrix}$$

$$W(\rho) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho} \omega_x^J + \omega_x^D + \rho \omega_x^K \\ \frac{1}{\rho} \omega_y^J + \omega_y^D + \rho \omega_y^K \\ \frac{1}{\rho} \omega_p^J + \omega_\rho^D + \rho \omega_\rho^K \end{pmatrix}; \quad \omega_i^j = \iint_{J} H_j \cdot G_i dr$$

$$H_J = -J \left( \frac{\partial^2 S_0}{(\partial x)^2} + \frac{\partial^2 S_0}{(\partial y)^2} \right); \quad H_D = -2D \left( D_x \frac{\partial S_0}{\partial x} + D_y \frac{\partial S_0}{\partial y} \right)$$

$$H_K = -(2K_0 S_{0z} + B \cdot) e_z; \quad U(R, \rho) = \begin{pmatrix} \frac{dE_{imp}}{dR_y} \\ \frac{dE_{imp}}{dR_y} \\ \frac{dE_{imp}}{dR_y} \end{pmatrix}$$

## 1.5 Примесь и потенциал взаимодействия с ней

Локальные примеси удобно моделировать быстро затухающими гаусовыми функциями:

$$K_{imp}(r) = \sum_{l} k_l \exp\left(-\frac{(r-a_l)^2}{\sigma^2}\right),\tag{8}$$

где  $a_l$  определяют положения центров примесей,  $k_l$  – их силу и  $\sigma$  – характерный радиус. Энергию примеси после подстановки анзаца и замены переменных в интегралле можно записать следующим образом:

$$E_{imp} = -\iint_{\Sigma} \rho^2 K_{imp}(r') S_{0z}^2(r) dr$$

где  $r' = R + \rho \cdot r$ Откуда получаем:

$$\frac{dE_{imp}}{dR_i} = -\iint_{\Sigma} \rho^2 \frac{dK_{imp}}{dr_i} (r') S_{0z}^2(r) dr \quad (i \in \{x, y\})$$
$$\frac{dE_{imp}}{d\rho} = -\iint_{\Sigma} \left[ \rho^2 \left( \frac{dK_{imp}}{dr_x} (r') x + \frac{dK_{imp}}{dr_y} (r') y \right) + 2\rho K_{imp}(r') \right] S_{0z}^2(r) dr$$

Подставим в эти уравнения модельный вид примеси (8) и в итоге получим:

$$\frac{dE_{imp}}{dR_i} = -\rho^2 \sum_l \iint_{\Sigma} \Omega_{li}(r') S_{0z}^2(r) dr$$
(9)

$$\frac{dE_{imp}}{d\rho} = -\sum_{l} \iint_{\Sigma} \left[ \rho^2 \left( \Omega_{lx}(r')x + \Omega_{ly}(r')y \right) + 2\rho \Psi_l(r') \right] S_{0z}^2(r) dr$$
(10)

где

$$\Psi_l(r) = k_l \exp\left(-\frac{(r-a_l)^2}{\sigma^2}\right); \quad \Omega_{lx}(r) = -\frac{2}{\sigma^2}k_l \exp\left(-\frac{(r-a_l)^2}{\sigma^2}\right)(x-a_{lx})$$
$$\Omega_{ly}(r) = -\frac{2}{\sigma^2}k_l \exp\left(-\frac{(r-a_l)^2}{\sigma^2}\right)(y-a_{ly})$$

## 1.6 Уравнение Тиля для скирмиона постоянного радиуса

Для сравнения обобщённого метода Тиля и стандартного, мы должны помимо обобщённого уравнения Тилля получить ещё и стандартное, для этого мы должны были бы ввести стандартный анзац (11) и повторить вывод подобно тому, как это делалось выше

$$S(r,t) = S_0 (r - R(t))$$
(11)

Где  $S_0 = S_0(r)$  это векторное поле, определяющее состояние системы со скирмионом в локальном минимуме при отсутствии примеси, R = R(t) – координата центра скирмиона.

Вместо этого достаточно просто из всех входящих в уравнение (7) матриц и столбцов выбросить лишние строки, столбцы и везде приравнять  $\rho = 1$ . Тогда получится искомое стандартое уравнение Тиля:

$$(V + \alpha Q) \begin{pmatrix} \dot{R}_x \\ \dot{R}_y \end{pmatrix} = -\gamma (U(R) - W) + \begin{pmatrix} \mathbf{v}_s \cdot (A_x + \beta C_x) \\ \mathbf{v}_s \cdot (A_x + \beta C_y) \end{pmatrix}$$
(12)

$$V_{ij} = \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_j] \cdot G_i dr \quad Q_{ij} = \iint_{\Sigma} G_j \cdot G_i dr \quad (i, j \in \{x, y\});$$

$$A_i = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_x] \cdot G_i dr \\ \iint_{\Sigma} [S_0 \times G_y] \cdot G_i dr \end{pmatrix} \quad C_i = \begin{pmatrix} \iint_{\Sigma} (G_x \cdot G_i) dr \\ \iint_{\Sigma} (G_y \cdot G_i) dr \end{pmatrix}$$

$$W = \begin{pmatrix} \omega_x^J + \omega_x^D + \omega_x^K \\ \omega_y^J + \omega_y^D + \omega_y^K \end{pmatrix} \quad U(R) = \begin{pmatrix} \frac{dE_{imp}}{dR_x} \\ \frac{dE_{imp}}{dR_y} \end{pmatrix}$$

## Глава 2. Численное моделирование

#### 2.1 Рассчёт градиентов и интеграллов

Расчёты динамики скирмионных состояний под воздействием тока были проведены на основе уравнений ЛЛГ, Тиля и обобщенного уравнения Тиля – TR. Все градиенты:  $\frac{\partial S_0}{\partial x}, \frac{\partial S_0}{\partial y}$  и интеграллы  $\iint_{\Sigma} F(r) dr$  рассчитывались на плоской квадратной решётке с постоянной решетки h = 1. Размеры области  $\Sigma$  по осям x и y обозначены ниже соответственно  $x_s$  и  $y_s$ . Использовались периодические граничные условия. Координаты узлов решетки в области  $\Sigma$ записываются следующим образом:

• 
$$r^{mn} = (m, n)$$
 если  $(0 < m < x_s), (0 < n < x_s)$ 

• 
$$r^{mn} = (m - x_s, n)$$
 если  $m >= x_s$ 

• 
$$r^{mn} = (x_s + m, n)$$
 если  $m < 0 \ (m, n \in Z)$ )

Для градиентов использовалось приближение центральных финитных дифференциалов по соседним четырём точкам:

$$\frac{\partial S_0(r^{mn})}{\partial x} \approx \frac{1}{3} \left( \frac{1}{4} S_0(r^{(m-2)n}) - 2S_0(r^{(m-1)n}) + 2S_0(r^{(m+1)n}) - \frac{1}{4} S_0(r^{(m+2)n}) \right)$$
$$\frac{\partial S_0(r^{mn})}{\partial y} \approx \frac{1}{3} \left( \frac{1}{4} S_0(r^{m(n-2)}) - 2S_0(r^{m(n-1)}) + 2S_0(r^{m(n+1)}) - \frac{1}{4} S_0(r^{m(n+2)}) \right)$$

Интегралы рассчитывались по формуле Симпсона (для корректного рассчёта по этой формуле  $x_s$  и  $y_s$  должны быть нечётными):

$$I_x(m) = \frac{1}{3} \left[ F(m,0) + 2\sum_{n=1}^{\frac{y_s}{2} - \frac{3}{2}} F(m,2n) + 4\sum_{n=1}^{\frac{y_s}{2} - \frac{1}{2}} F(m,2n-1) + F(m,y_s-1) \right]$$
$$\iint_{\Sigma} F(r) dr \approx \frac{1}{3} \left[ I_x(0) + 2\sum_{m=1}^{\frac{x_s}{2} - \frac{3}{2}} I_x(2m) + 4\sum_{m=1}^{\frac{x_s}{2} - \frac{1}{2}} I_x(2m-1) + I_x(x_s-1) \right]$$

#### 2.2 Расчёт потенциала взаимодействия с примесью

Численный расчёт потенциала взаимодействия с примесью (9, 10) можно упростить, если учесть локальный характер взаимодействия. Эффективный размер примеси  $\exp\left(-\frac{(r-a_l)^2}{\sigma^2}\right)$  определяется параметром  $\sigma$ . Быстро убывающие экспоненты входят в подинтегральные выражения:

$$\Omega_{li}(r')S_{0z}^{2}(r)dr; \quad \left[\rho^{2}\left(\Omega_{lx}(r')x + \Omega_{ly}(r')y\right) + 2\rho\Psi_{l}(r')\right]S_{0z}^{2}(r)dr,$$

что позволяет уменбшить область интегрирования. На каждом шаге рассчёта динамики достаточно интегрировать не по всей системе, а лишь вблизи точки, где аргумент экспоненты близок к нулю:  $r' - a_l = 0 \Rightarrow r_0 = \frac{1}{a}(a_l - R) + R_0$ .

#### 2.3 Локальный скирмионный минимум

Чтобы задать начальное состояние скирмиона на решётке нужно выбрать начальное затравочное состояние в виде, например, локально-вихревое распределение магнитных моментов, задать энергетические константы, при которых возможен скирмион соответствует минимуму на энергетической поверхности (в данной работе использовались: J = 1, D = 0.32,  $K_0 = 0.07$ , B = 0.093) и провести минимизацию функционала энергии, например, методом градиентного спуска:

$$S_0=S_{k-1}-\kappa S_{k-1}rac{\delta E}{\delta S_{k-1}},$$
где  $S_k$  – состояние системы полученное

на k ом шаге минимизации,  $\kappa$  - малый параметр, также на каждом шаге величины магнитных моментов нормировались:  $S_k(r) \to \frac{S_k(r)}{||S_k(r)||}$ 

#### 2.4 Расчёт динамики

Все рассматриваемые в этой работе уравнения, описывающие динамику (7, 12, 3) являются уравнениями первого порядка по времени. Для их решения использовался классический метод Рунге-Кутта четвёртого порядка. Прибли-

жённое значение в последующие моменты времени уравнения вида:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f(t, r)$$

вычисляется по итерационной формуле:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Вычисление нового значения проходит в четыре стадии:

$$k_1 = f(t_n, r_n), \quad k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, r_n + \frac{h}{2}k_1)$$
$$k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, r_n + \frac{h}{2}k_2), \quad k_4 = f(t_n + h, r_n + hk_3)$$

Из уравнения ЛЛГ в отличие от уравнения Тиля и TR траекторию центра скирмиона и динамику его радиуса нельзя получить явно. Однако, в каждый момент времени их можно вычислить приближенно, используя следующие формулы:

$$R(t) = \frac{\iint_{\Sigma'} S_z(r, t) \cdot r dr}{\iint_{\Sigma'} S_z(r, t) dr}$$

где  $\Sigma'$  - область двумерного пространства  $\Sigma$ , где перпендикулярная к плоскости проекция спинов  $S_z$  отрицательна (на ферромагнитной области  $S_z > 0$ )

$$\rho(t) = \sqrt{\frac{2\iint_{\Sigma}(S_z(r,t)-1)\cdot(r-R(t))^2dr}{\iint_{\Sigma}(S_z(r,t)-1)dr}}$$

# Глава 3. Сравнительный анализ методов

Для того, чтобы продемонстрировать новые, по сравнению со стандартным подходом Тиля возможности введённого в (4) анзаца, предполагающего возможность изменения радиуса скирмиона, рассмотрим движение скирмиона вблизи щели из двух анизотропных примесей (Рис. 2, Рис. 3) (анизотропия этих примесей  $k_1 = k_2 = 5K_0$ , а характерный размер  $\sigma = 0.1\rho_0$ , где  $\rho_0$  радиус равновесного скирмиона в отсутствии примесей) На (Рис. 2) изображены траектории движения центра скирмиона при различных значениях диссипативного параметра  $\alpha$ . На Рис. (3) изображены траектории движения центра скирмиона при различных значениях спин поляризованного тока  $j_s$ 

На этих рисунках о видно, что моделирование на основе уравнения TR даёт результат хорошо согласующийся с результатом, полученным из точного уравнения ЛЛГ в большем диапазоне параметров чем стандартое уравнение Тиля.



**Рис. 2:** Траектории центра скирмиона, рассчитанные при разных диссипативных параметрах  $\alpha$  (левый верхний график соотвествует  $\alpha = 0.01$ , правый верхний  $\alpha = 0.1$ , нижний левый  $\alpha = 0.3$ , нижний правый  $\alpha = 0.5$ ). Красными линиями изображены траектории, посчитанные с помощью уравнения ЛЛГ, зелёными с помощью обобщенного уравнения Тиля TR и синими с помощью стандартного уравнения Тиля. Единицей измерения координаты тут является радиус скирмиона.



**Рис. 3:** Траектории центра скирмиона, рассчитанные при разных значениях спинполяризованного тока  $j_s$  (левый верхний график соотвествует  $j_s = 0.001$  (усл. ед.), правый верхний  $j_s = 0.007$  (усл. ед.), левый нижний  $j_s = 0.009$  (усл. ед.), правый нижний  $j_s = 0.011$  (усл. ед.)). Красными линиями изображены траектории, посчитанные с помощью уравнения ЛЛГ, зелёными с помощью обобщенного метода TR и синими с помощью стандартного уравнения Тиля. Единицей измерения координаты тут является радиус равновесного скирмиона.

И при этом видно, что существенные различия в траекториях начинают появляться на определённом критическом расстоянии от примеси. И если метод Тиля даёт хороший результат в этой критической точке, хороший результат так же наблюдается на остальной части траектории. На этом критическом расстоянии скирмион выбирает один из локальных минимумов функционала энергии, к которому он будет стремиться, и тот из методов Тиля, который позволяет выбрать этот минимум правильно, оказывается выйгрышным.

Рассмотрим взаимодействие скирмиона с одной анизотропной примесью (рис. 4)



**Рис. 4:** Графики энергии в зависимости от расстояния до примеси (левые), траектории центра скирмиона (по центру) и радиуса скирмиона в зависимости от расстояния до примеси (справа) при разных скоростях спинового дрейфа ( $j_s = 0.01$  (усл. ед.) сверху,  $j_s = 0.05$  (усл. ед.) по центру,  $j_s = 0.07$  (усл. ед.) снизу)

По графикам зависимости энергии от расстояния видно, что, хотя и не сильно, энергия рассчитанная по TR лучше согласуется с данными расчетов

на основе уравнений ЛЛГ чем согласно стандартному уравнению Тиля. Похожие результаты были получены в работе [20], только в ней энергия считалась не вдоль траектории, а на каждом расстоянии от примеси отдельно производилась минимизация энергии. Именно это небольшое отличие сказывется при прохождении скирмионом критических точек (Рис. 2, Рис. 3) и при выборе локального минимума. Так-же на графиках видно, что динамика радиуса скирмиона полученная при рассчёте по TR близка к ЛЛГ, при чём чем меньше скорость скирмиона тем соотвествие лучше. Это можно объяснить следующим образом: при маленьких скоростях на каждой точке траектории своего центра скирмион успевает полностью отрелаксировать и это отрелаксированное состояние уравнение TR способно приблизить с хорошей точностью, но при увеличении скорости скирмион успевает отрелаксировать только частично, при этом скорость релаксации получается разной при рассчёте динамики с использованием уравнения ЛЛГ и TR.

#### Заключение

Подведем некоторые итоги. В работе был введён новый анзац для моделирования скирмионного состояния, (4), который позволил обобщить уравнение Тиля – TR (7). Был проведён сравнительный анализ траекторий движения скирмионов, полученных на основе уравнений TR, ЛЛГ (3) и стандартного метода Тиля (12). Для этого было проведёно численное моделирование динамики скирмиона вблизи изолированной примеси и щели из анизотропных примесей (Рис. 2, Рис. 3). Для рассмотренных моделей построены графики зависимости энергии от расстояния до примеси (Рис. 4). Показано, что при уменьшении скорости скирмиона стандартное уравнение Тиля лучше описывает движение, поскольку радиус скирмиона успевает релаксировать к равновесному состоянию.

## Список литературы

- N. Nagaosa, Y. Tokura, Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature Nanotech.* 8, 899 (2013)
- [2] И. С. Лобанов, М. Н. Поткина, В. М. Уздин, Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор). Письма в ЖЭТФ, 113 (12), 833 (2021)
- [3] R. Wiesendanger Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: A new twist for spintronics. *Nat. Rev. Mater.*, **1**, P. 16044 (2016).
- [4] G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri, M. Kläu, Magnetic skyrmions: from fundamental to applications. *J Phys. D: Appl. Phys.*, 49, 423001 (2016).
- [5] A. Fert, N. Reyren, V. Cros, Magnetic skyrmions: Advances in physics and potential applications. *Nat. Rev. Mater.*, **2**, 17031 (2017).
- [6] S.S.P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. *Science*, **320**, N 5837, P. 190-194 (2008).
- [7] Г. В. Скроцкий, Еще раз об уравнении Ландау-Лифшица. УФН, 144 (4), 681 (1984).
- [8] A. A. Thiele, Steady-state motion of magnetic domains, *Phys. Rev. Lett.* 30 (6) 230 (1973)
- [9] J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, Current-induced skyrmion dynamics in constricted geometries. *Nat. nanotech.*, **8** (10), 742 (2013).
- [10] S. L. Zhang, W. W. Wang, D. M. Burn, H. Peng, H. Berger, A. Bauer, C. Pfleiderer, G. van der Laan, and T. Hesjedal, Manipulation of skyrmion motion by magnetic field gradients. *Nat. commun.*, 9, 2115 (2018).
- [11] X. Wang, W.L. Gan, J. C. Martinez, F. N. Tan, M. B. A. Jalil, and W. S. Lew, Efficient skyrmion transport mediated by a voltage controlled magnetic anisotropy gradient, *Nanoscale* 10, 733 (2018).

- [12] A. Brataas, A. D. Kent, and H. Ohno, Current-induced torques in magnetic materials. *Nat. Mater.* **11**, 372, (2012).
- [13] I. A. Ado, O. A. Tretiakov, M. Titov, Microscopic theory of spin-orbit torques in two dimensions. *Phys. Rev. B* **95**, 094401 (2017).
- [14] M. Weiβenhofer, L. Rózsa, and U. Nowak, Skyrmion dynamics at finite temperatures: beyond Thiele's equation. *Phys. Rev. Lett.* **127**, 047203 (2021).
- [15] D. J. Clarke, O. A. Tretiakov, G.-W. Chern, Y. B. Bazaliy, O. Tchernyshyov, Dynamics of a vortex domain wall in a magnetic nanostrip: Application of the collective-coordinate approach. *Phys. Rev. B* 78, 134412, (2008).
- [16] S. Z. Lin, C. D. Batista, and A. Saxena, "Internal modes of a skyrmion in the ferromagnetic state of chiral magnets. *Phys. Rev. B* **89**, 024415, (2014).
- [17] C. Reichhardt, C. J. O. Reichhardt, and M. V. Milošević, Statics and dynamics of skyrmions interacting with disorder and nanostructures. *Rev. Mod. Phys.* 94, 035005 (2022).
- [18] C. Hanneken, A. Kubetzka, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Pinning and movement of individual nanoscale magnetic skyrmions via defects. *New J. Phys.* 18, 055009 (2016).
- [19] А. К. Звездин, К. А. Звездин, А. В. Хвальковский, Обобщенное уравнение Ландау–Лифшица и процессы переноса спинового момента в магнитных наноструктурах. УФН, 51, 436 (2008).
- [20] J. Müller, A. Rosch, Capturing of a magnetic skyrmion with a hole. *Phys. Rev. B* 91, 054410, (2015).