

Санкт-Петербургский государственный университет

Рандин Константин Вячеславович

Выпускная квалификационная работа

**Частоты магнитных переходов в
хиральных цепочках конечной длины**

Уровень образования: бакалавриат

Направление: 03.03.02 «Физика»

Основная образовательная программа: СВ.5011.2020
«Физика»

Научный руководитель:

Д.Ф.-М.Н., ПРОФЕССОР КАФЕДРЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Уздин В.М.

Рецензист:

Д.Ф.-М.Н., ПРОФЕССОР УНИВЕРСИТЕТА ИТМО
Попов И.Ю.

И.О.заведующего кафедрой:

Д.Ф.-М.Н., ПРОФЕССОР КАФЕДРЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
АКСЁНОВА Е.В.

Санкт-Петербург

2024 г.

Содержание

1. Введение	2
2. Теоретическая модель	4
3. Численное моделирование перемагничивания конечной магнитной цепочки	7
4. Результаты и обсуждение	11
5. Заключение	16

1. Введение

Магнитные цепочки, состоящие из отдельных атомов, представляют собой уникальные физические системы, интересные не только с точки зрения фундаментального магнетизма, но и благодаря приложениям в спинтронике [1], а также для создания новых технологий магнитной памяти [2]. Активное изучение таких систем было стимулировано, в частности, благодаря открытию большой энергии магнитной анизотропии атомов *Co* на поверхности *Pt* [3].

Для исследования равновесных магнитных конфигураций магнитных цепочек, наряду с точными квантовомеханическими расчетами, используются методы, основанные на модельных гамильтонианах, а также первопринципные расчеты методом функционала плотности [4]. Расчет процессов перемагничивания при учете тепловых флуктуаций намагниченности возможен на основе численного решения уравнения Ландау-Лившица-Гильберта со стохастическим членом, зависящим от температуры или методов Монте-Карло (МК) [5]. Однако, принимая во внимание, что частота осцилляций отдельных магнитных моментов около положения равновесия на 9-12 порядков больше частот магнитных переходов между локальными магнитными состояниями системы, как целого, оказывается, что методы молекулярной динамики и МК для расчета времен жизни магнитных конфигураций даже относительно небольших систем при температурах, представляющих практический интерес, неэффективны.

Вместо этого может быть использована статистическая теория переходного состояния (ТПС) для магнитных степеней свободы [6, 7]. Этот подход может основываться на обобщенной модели Гейзенберга, включающей помимо симметричного обменного взаимодействия антисимметричный обмен Дзялошинского-Мории [8], энергию магнитной анизотропии и взаимодействия со внешним магнитным полем. Энергия дальнегодействующего дипольного взаимодействия также может быть учтена, но для одномерных цепочек, которые будут рассматриваться ниже, ее вклад в полную энергию оказывается пренебрежимым. В рамках ТПС строится энергетическая поверхность системы, как функционал от всех переменных однозначно задающих магнитную конфигурацию. Минимумы на этой поверхности соответствуют локально устойчивым основному или метастабильным состояниям, а пути с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ) между ними - наиболее вероятным сценариям перехода между соответствующими состояниями. Максимум энергии вдоль ПМПЭ, соответствующий седловой точке на энергетической поверхности, определяет энергию активации перехода, а форма поверхности вблизи начального локально равновесного состояния и седловой точки определяет предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса для времен жизни магнитных состояний в гармоническом приближении ТПС. Оценки времен жизни квазидвумерных скирмионных состояний

при произвольных температурах и магнитных полях показали возможность использования ТПС для магнитных систем вплоть до микронного масштаба при выполнении расчетов с атомным разрешением [9]

В данной работе рассматриваются одномерные цепочки магнитных атомов, на поверхности тяжелого металла с большим спин-орбитальным взаимодействием. Параметры модельного гамильтониана выбираются в соответствии с результатами расчетов методом функционала плотности, имеющимися для этой системы [10]. Исследуется устойчивость магнитных состояний цепочки конечной длины и анализируются процессы спонтанного перемагничивания, вызванного тепловыми флуктуациями. Будет рассмотрен вопрос о зависимости механизмов перемагничивания от длины цепочки и параметров системы.

2. Теоретическая модель

Для описания одномерного состояния магнитных цепочек будем использовать обобщенный гамильтониан Гейзенберга [10] :

$$H = H_{exch} + H_{DMI} + H_{MAE} + H_{ext}, \text{ где} \quad (1)$$

В этом выражении $H_{exch} = -J \sum_i (s_i \cdot s_{i+1})$ соответствует энергии обменного взаимодействия; $H_{DMI} = -\mathbf{D} \sum_i [s_i \times s_{i+1}]$ – взаимодействию Дзялошинского-Мории (вДМ); $H_{MAE} = \sum_i \left[-K (s_i^y)^2 + E \left((s_i^z)^2 - (s_i^x)^2 \right) \right]$ – энергии магнитной анизотропии; $H_{ext} = -\mu \sum_i (s_i \cdot B)$ описывает вклад в энергию от внешнего магнитного поля.

Параметры J, D, K, E – энергетические константы, приведённые на один атом, s_i – единичные вектора вдоль магнитного момента на узле i момента. Ось x направлена вдоль оси цепочки, ось y совпадает с осью легкого, а ось z – трудного намагничивания. Геометрия системы показана на рис. 1.

Прежде, чем переходить к расчетам в решеточной модели, рассмотрим соответствующую непрерывную модель, что позволит получить аналитические результаты для локально устойчивых магнитных состояний системы. Для этого перепишем гамильтониан (1) в терминах непрерывной переменной $\theta(x)$ – функции угла поворота вектора магнитного момента при движении доменной стенки вдоль оси цепочки.

Сначала запишем (1) через угол θ_i в дискретной модели:

$$H = -J \sum_i \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + K' \sum_i \sin^2 \theta_i + D_z \sum_i \sin(\theta_{i+1} - \theta_i), \quad (2)$$

где $K' = K + E$

Если перемагничивание цепочки реализуется, как непрерывное движение доменной стенки вдоль неё [11], то удобно рассматривать систему в локальной системе координат, в которой магнитный момент i лежит в плоскости $x'oy$. Перепишем проекции магнитных моментов и параметры модели в этой системе координат:

$$\begin{aligned} s^x &= s'^x \cos \varphi_i, \\ s^y &= s'^y, \\ s^z &= -s'^x \sin \varphi_i, \\ K' &= K + E \cos(2\varphi_i), \\ D_z &= D'_z \cos \varphi_i. \end{aligned} \quad (3)$$

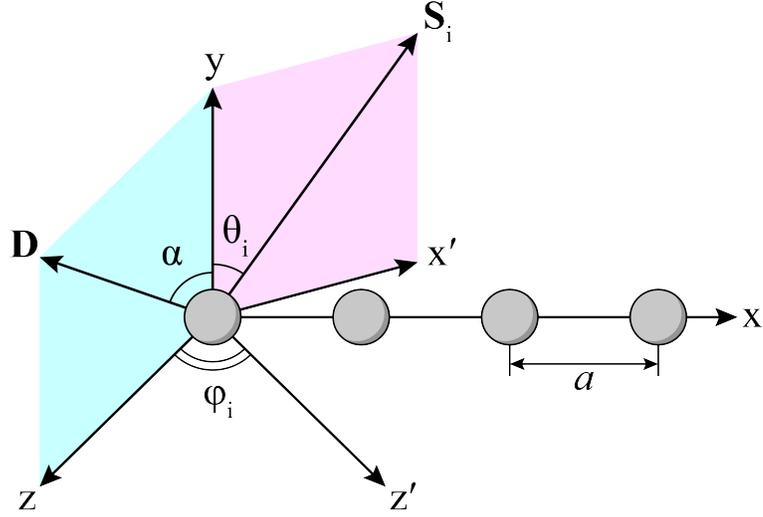


Рис. 1. Описание геометрии задачи. Атомы в цепочке расположены вдоль оси x на расстоянии a друг от друга. Вектор Дзялошинского-Мории расположен в плоскости $(Y o Z)$ и повёрнут на угол $\alpha = 138^\circ$. Вектора магнитных моментов s_i располагаются в плоскости $(X' o Y)$ и составляют угол θ_i с осью Y .

Дискретный шаг угла заменяем на непрерывный, уменьшая постоянную решётки a :

$$\theta_{i+1} - \theta_i \rightarrow d\theta; \quad \theta = ia \quad (4)$$

Теперь энергия системы записывается в виде функционала от $\theta(x)$:

$$E[\theta] = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{Ja^2}{2} (\partial_x \theta)^2 + Da \partial_x \theta + K \sin^2 \theta \right) dx \quad (5)$$

Проварьируем функционал и выпишем соответствующее уравнение Эйлера-Лагранжа:

$$-Ja^2 \partial_x^2 \theta + 2K \sin \theta \cos \theta = 0 \quad (6)$$

Введём $t = \frac{2K}{Ja^2}$ – безразмерный параметр, решим уравнение:

$$\theta''(x) - t \sin \theta \cos \theta = 0 \text{ с граничными условиями} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \theta(-\infty) = \pi \\ \theta(+\infty) = 0 \end{cases}$$

– соответствует вращению доменной стенки по часовой стрелке, или:

$$\begin{cases} \theta(-\infty) = 0 \\ \theta(+\infty) = \pi \end{cases} \quad (8)$$

– вращение против часовой стрелки.

Решение этого уравнения записывается в виде

$$\theta_{\pm}(x) = \arccos\left(\pm th\left(\sqrt{t}x\right)\right). \quad (9)$$

Верхний и нижний знаки соответствуют вращению по и против часовой стрелки соответственно. Значение функционала $E[\theta]$ на этих функциях равно

$$E[\theta_{\pm}] = \sqrt{8KJ} \pm \pi D \cos\beta. \quad (10)$$

Отметим, вДМ должно оказывать значительное влияние на энергетические характеристики магнитной системы, хотя явно не входит в выражение (9).

Теперь рассмотрим вопрос о частотах перемагничивания цепочки за счет тепловых флуктуаций. В гармоническом приближении ТПС [7]:

$$\nu = \nu_0 e^{-\Delta E/kT}. \quad (11)$$

Здесь k - постоянная Больцмана, T - температура системы. ν_0 - предэкспоненциальный множитель, или частотный префактор, ν_0 может быть вычислен в ТПС явно. Однако, в целом ряде работ [3, 12, 13] его значение постулируется и принимается равным 10^9 1/с. Мы ограничимся этой оценкой, хотя заметим, что в общем случае он может зависеть от длины цепочки.

3. Численное моделирование перемагничивания конечной магнитной цепочки

Перейдем к оценке времен жизни магнитных состояний атомных цепочек разной длины. Магнитная конфигурация задается набором векторов единичной длины s_i , направленных вдоль магнитного момента на каждом узле цепочки. Основному состоянию бесконечной цепочки при выбранных значениях параметров [10] соответствует однородное ферромагнитное состояние. Для конечной цепочки можно ожидать отклонение от однородного состояния из-за вДМ. Используем параметры гамильтониана, полученные методом функционала плотности для бесконечно длинной цепочки из атомов Co на поверхности Pt [14]: $J = 61,8$ мэВ, $K = 1,31$ мэВ, $E = 0,34$ мэВ, $D = |D| = 1,92$ мэВ, $B = 1$ Тл, $\mu = 2,39\mu_B$, где μ_B - магнетон Бора.

Энергетическая поверхность системы задается выражением (1). Энергия является функционалом от набора углов, задающих направление всех векторов s_i . Размерность энергетической поверхности равна удвоенному числу атомов цепочки. Основному состоянию будет соответствовать минимум на энергетической поверхности. Он будет двукратно вырожден, поскольку система симметрична относительно замены на противоположные магнитных моментов на всех узлах цепочки. Нас будет интересовать переход из одного основного состояния во второе под воздействием тепловых флуктуаций.

Для оценки частоты таких переходов в рамках ТПС строится путь с наименьшим перепадом энергии (ПМПЭ). Опишем принцип работы программы, с помощью которой строится ПМПЭ, соединяющий один и другой минимум на энергетической поверхности. Выберем в качестве начального пути геодезическую, соединяющую минимумы. На этом пути выберем набор образов, расположенных на энергетической поверхности на одинаковом расстоянии. Далее каждый образ релаксирует под воздействием проекции антиградиента энергии на направление, ортогональное пути. Для того, чтобы расстояние между образами вдоль пути было одинаковым, существует несколько алгоритмов. В одном из них, называемым методом подталкивания упругой лентой (*the nudged elastic band (NEB) method*), добавляются упругие силы между образами, и при релаксации системы наряду с проекцией "настоящих" сил на направление, ортогональное пути, учитывается проекция этих сил упругости вдоль пути. Другой метод (метод струн - *string method*), аппроксимирует путь сплайнами и на каждом шаге распределяет образы равномерно вдоль пути. Образ, соответствующий максимальному значению энергии, наиболее близок к седловой точке. Для ее более точного определения существует дополнительный алгоритм, называемый методом поднимающегося образа (*climbing image*). Программа, реализующая

построение ПМПЭ, и поиск седловой точки написана на языке программирования *Python* с применением дополнительного пакета *magnes*[15].

На рис. 2a изображены проекции магнитных моментов для основного состояния цепочки, состоящей из 50 атомов, на рис. 2b - соответствующие вектора магнитных моментов в пространстве. Основное состояние в центральной части цепочки является ферромагнитным, но на краях заметны отклонения из-за вДМ. Чтобы продемонстрировать влияние этого взаимодействия, были выполнены расчеты системы с увеличенным в несколько раз параметром D. Результаты приведены на рис. 2(c - h). Изменение только параметра, отвечающего вДМ, довольно сильно влияет на магнитную конфигурацию, стабилизируя спиральную хиральную структуру. В его отсутствии состояния магнитной спирали, закрученной по и против часовой стрелки, имеют одинаковую энергию, а в присутствии - различную.

Результаты моделирования для цепочек *Co/Pt* разной длины представлены на рис.3. На рисунках а-е изображены проекции магнитных моментов для цепочек длины 10, 20, 35, 50, 75 и 100 соответственно.

Отметим, что расчеты проводились с помощью программного обеспечения, разработанного для исследования квазидвумерных и трехмерных систем [16]. Использование его для расчета одномерных цепочек, требует дополнительной настройки программы. Были использованы свободные граничные условия, которые позволяют исследовать зависимость устойчивости состояний и их магнитных свойств от длины цепочки. Рассмотренные выше аналитическое решение для одномерной доменной стенки предполагает непрерывное распределение намагниченности и, следовательно, бесконечное число магнитных моментов. При моделировании возможно использование периодических граничных условий. Отметим, что устойчивость и процессы перемагничивания бесконечной цепочки рассматривались в работе [17], но сравнение с этим подходом требует дополнительных расчетов и исследований.

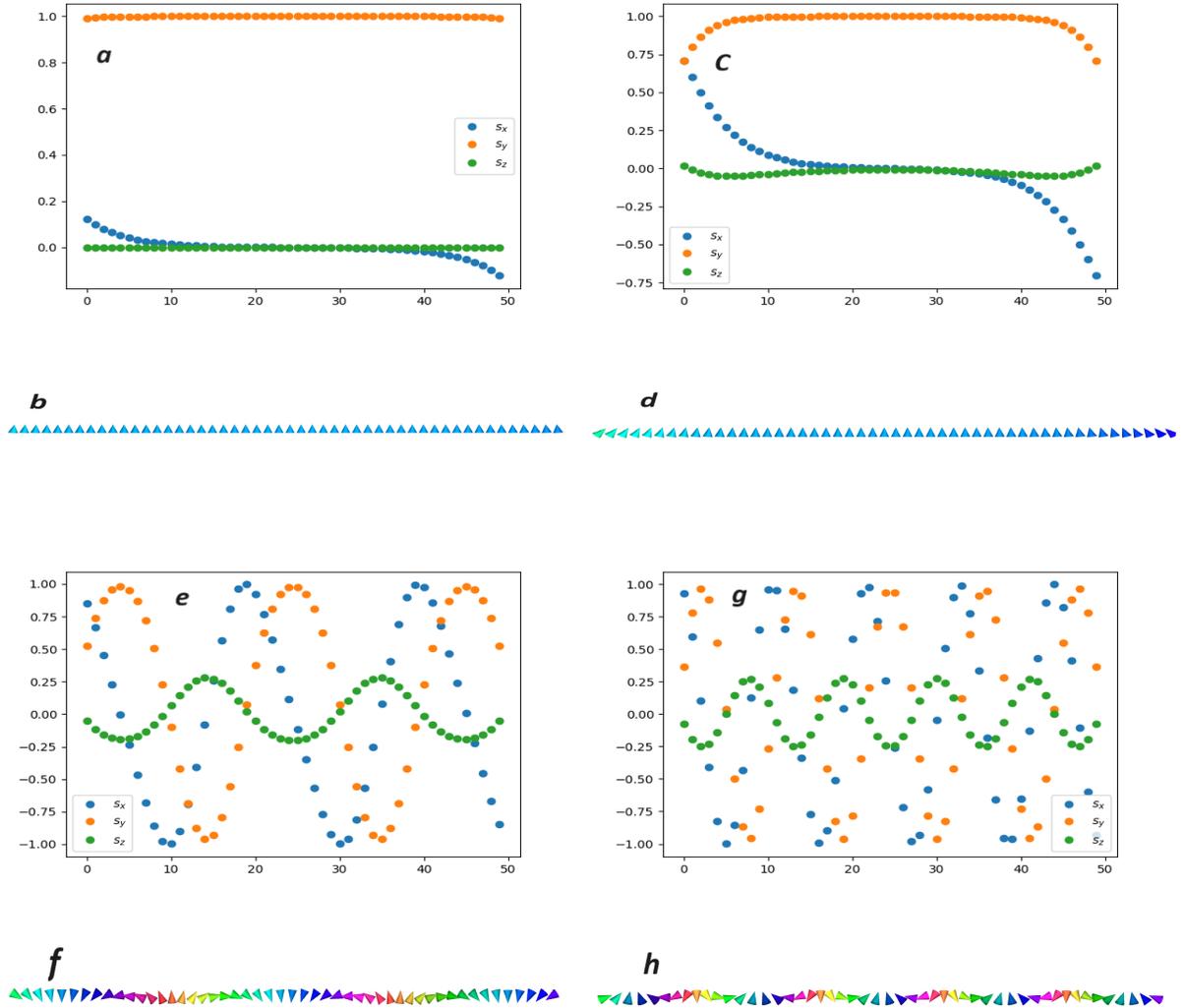


Рис. 2. Изображение магнитной конфигурации в виде проекций магнитных моментов на оси декартовой системы координат и соответствующая пространственная визуализация. Рис. *a* – *b* соответствуют системе с исходными энергетическими параметрами, рис. *c* – *d* отвечают системе, в которой параметр D увеличен в 5 раз, *e* – *f* - в 10 раз, *g* – *h* - в 20 раз. При достаточно большом взаимодействии Дзялошинского-Мории даже для конечной цепочки основному состоянию соответствует спиральное упорядочение.

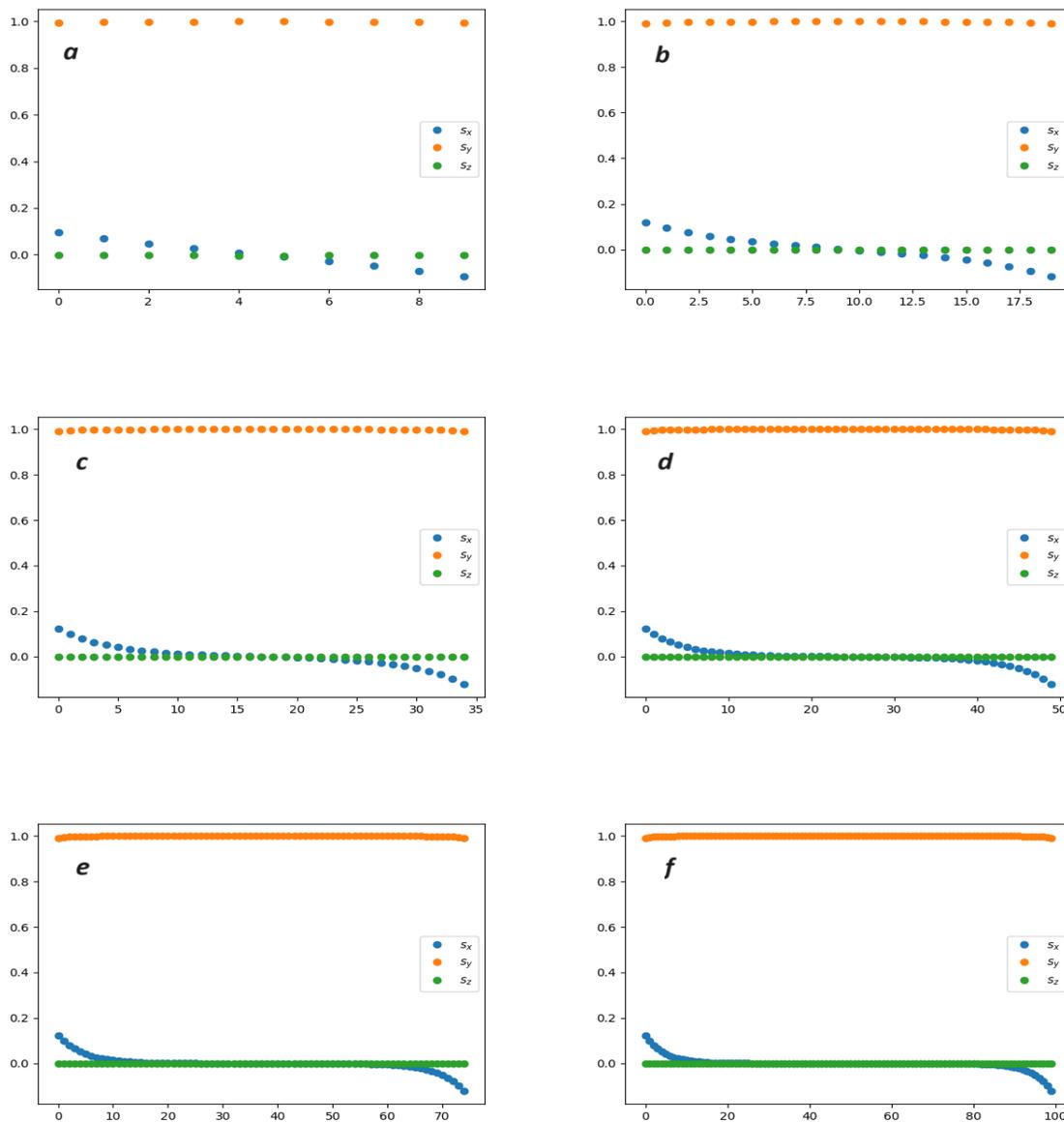


Рис. 3. Снимки магнитной конфигурации основного состояния для цепочек Co/Pt разной длины.

4. Результаты и обсуждение

Перейдем к анализу процесса перемагничивания цепочек, т.е. переходу из одного в другое основное состояние, полученных в предыдущем разделе. ПМПЭ показывает наиболее вероятный сценарий такого перехода и позволяет найти соответствующую энергию активации.

Найденные ПМПЭ показали, что при длине цепочки $N < 23$ доменная стенка не образуется, и все магнитные моменты поворачиваются когерентно. Это уменьшает энергию обменного взаимодействия в процессе перехода, но увеличивает энергию анизотропии. Последняя растет пропорционально длине цепочки. Если длина цепочки становится больше, то перемагничивание цепочки происходит с образованием Неелевской доменной стенки. Этот сценарий показан на рис.4 для цепочки длиной в 50 атомов во внешнем магнитном поле 1 Тл, снимающем вырождение основного состояния. Изображения a и b отвечают основному и метастабильному состояниям системы - когда магнитные моменты в центральной части цепочки направлены по и против поля соответственно. При перемагничивании на правом конце цепочки начинает формироваться доменная стенка, которая движется вдоль цепочки, вплоть до положения, отвечающего седловой точке на энергетической поверхности. Это положение системы соответствует переходному состоянию. Форма энергетической поверхности в седловой точке и начальном минимуме позволяет в гармоническом приближении ТПС определить предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса для частот магнитных переходов. После прохождения седловой точки, доменная стенка продолжает движение до конца цепочки и исчезает там, завершая перемагничивание системы. Для сравнения на рис.5 приведены магнитные конфигурации цепочки, состоящей из 15 атомов вдоль ПМПЭ. Соответствующие проекции изображены на рис.5. Здесь перемагничивание происходит в процессе, близком к когерентному вращению магнитных моментов на всех узлах цепочки.

Энергии состояний в процессе перемагничивания представлены на рис.5. Здесь же показаны антиградиенты энергии в точках нахождения образов. В области переходного состояния градиент сильно уменьшается и должен обратиться в ноль в седловой точке. При расчетах было выбрано целевое значение 10^{-4} , которое определяет положение седловой точки.

Найденные значения энергии в седловой точке позволяет определить активационные барьеры переходов и получить оценку времен жизни магнитных состояний, в соответствии с формулой (11). В таблице 1 приведены активационные барьеры, частоты перемагничивания и времена жизни для цепочек разной длины длин цепочек. Также можно заметить, что с увеличением длины цепочки, вплоть до граничного значения $N = 23$, растет и активационный барьер, пока не выходит на постоянное, в пределах погрешности аппроксимации метода,

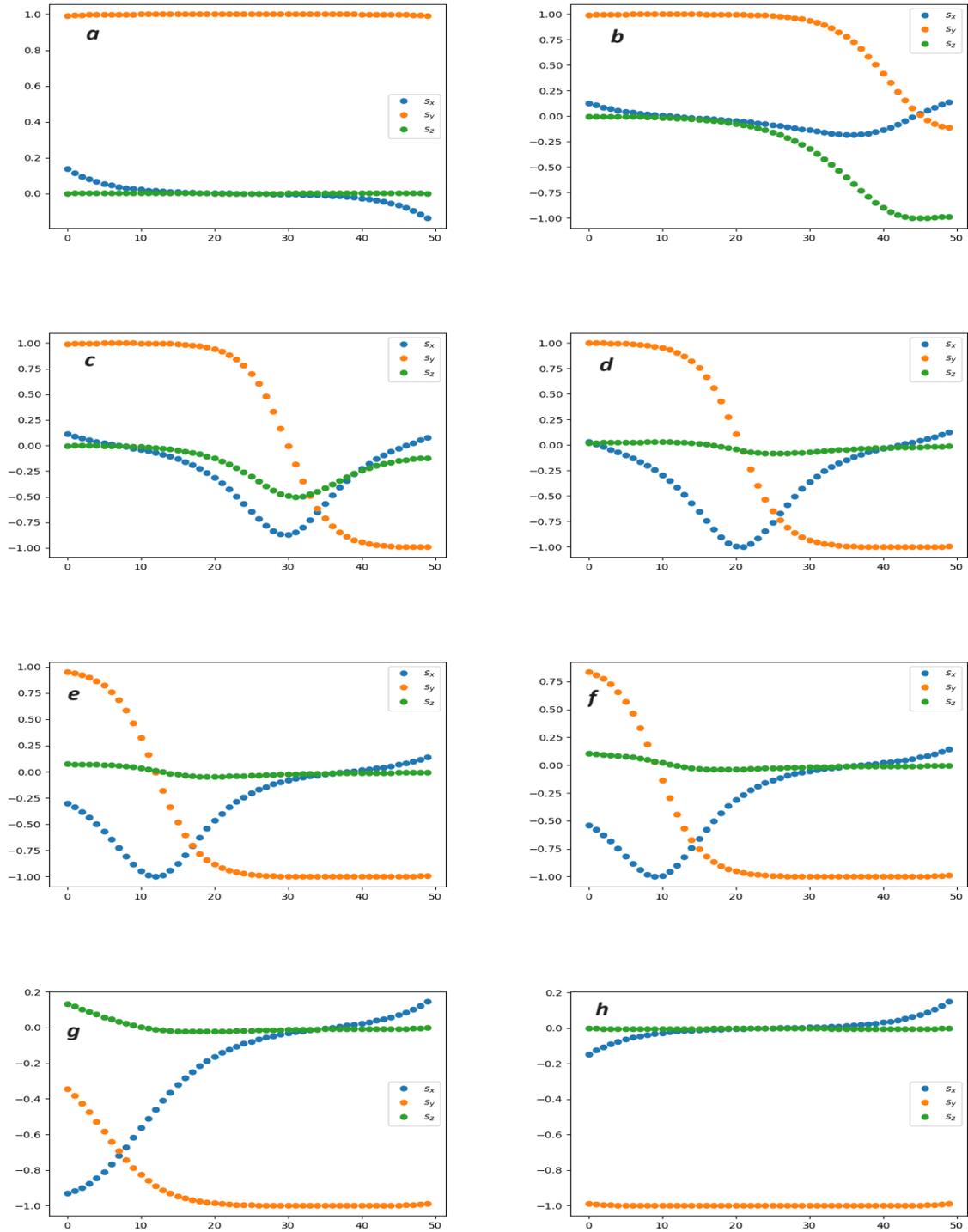


Рис. 4. Последовательные снимки проекций магнитных моментов магнитной системы, состоящей из 50 атомов, при перемагничивании во внешнем магнитном поле. Изображения *a* и *h* соответствуют основному и метастабильному состояниям, преимущественно упорядоченным по и против поля. Положению седловой точке отвечает изображение *f*.

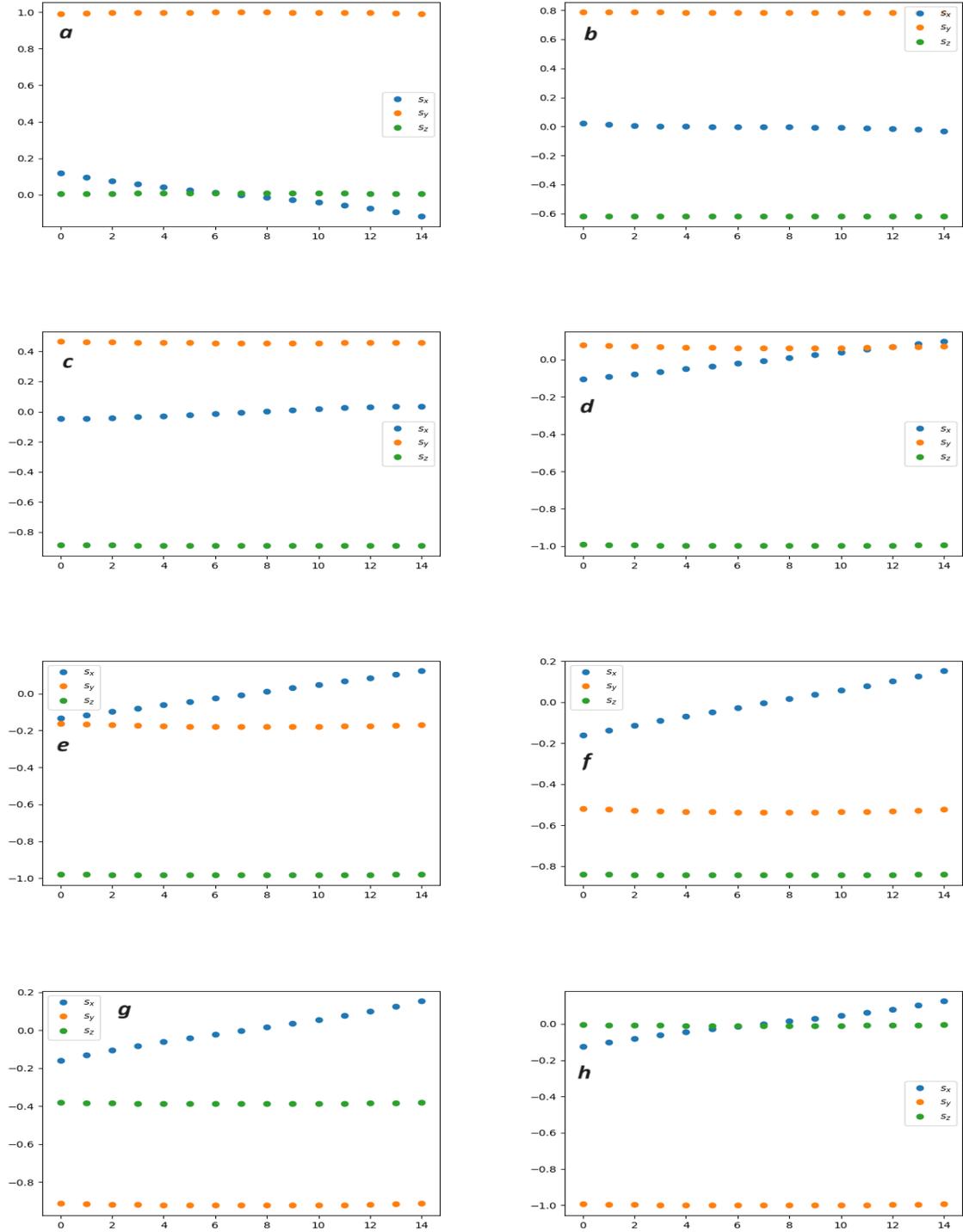


Рис. 5. Последовательные снимки проекций магнитных моментов для цепочки из 15 атомов. Здесь явно наблюдается когерентное вращение магнитных моментов всех атомов цепочки.

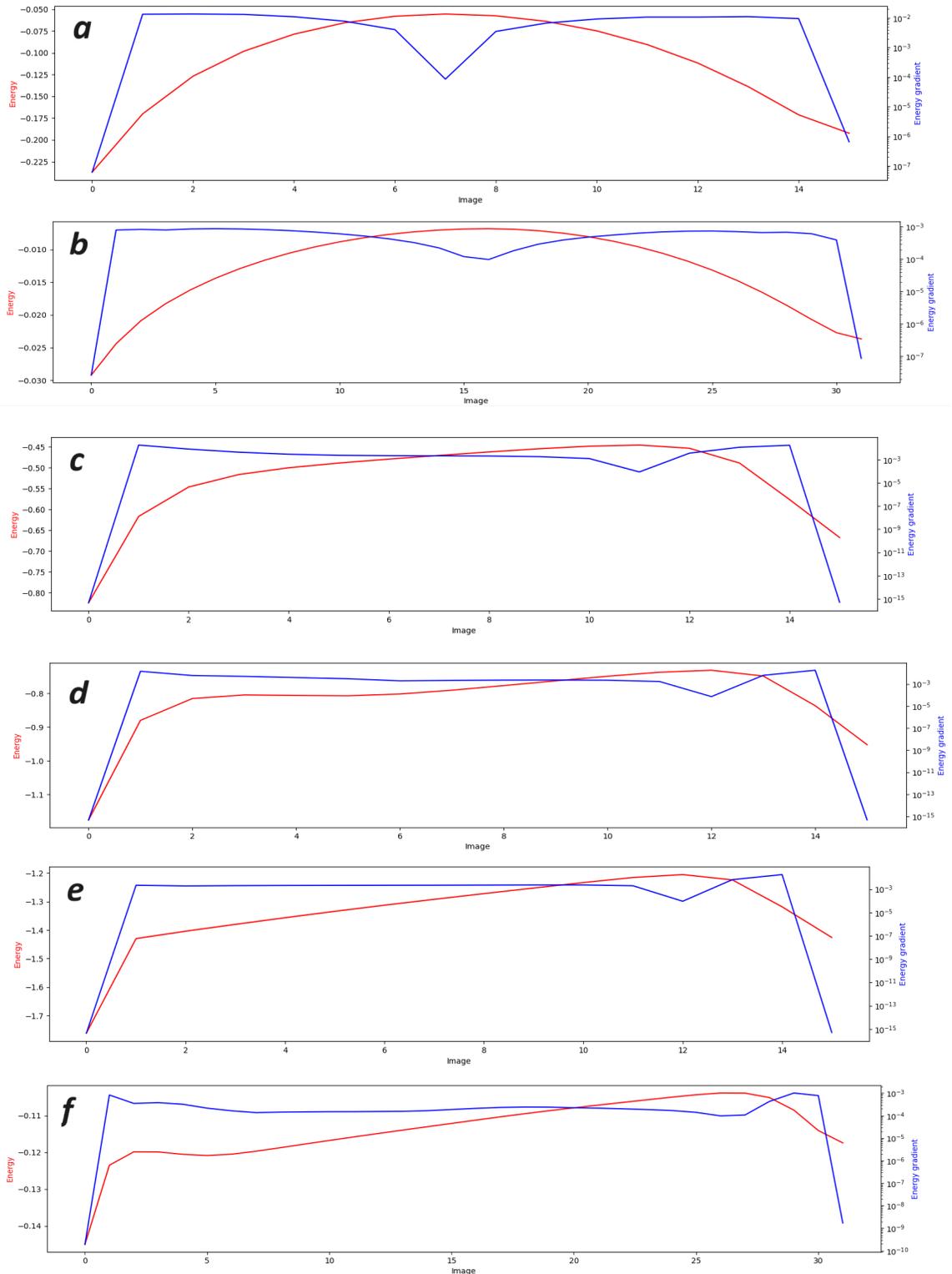


Рис. 6. Энергетическая траектория системы, сосчитанная вдоль ПМПЭ. По оси X отложены последовательные образы системы в процессе перемагничивания, по оси Y - энергия состояния в эВ. Для построения плавной траектории генерировалось 16 промежуточных образов.

Таблица 1. Сосчитанные активационные барьеры, частоты перемагничивания и времена жизни. При расчёте были использованы следующие параметры: $T = 50$ К, $B = 1$ Тл, $\nu_0 = 10^9$ Гц.

N	ΔE , мэВ	ν , МГц	τ , мс
10	18	15.392	0.065
15	20	9.680	0.103
20	22	6.088	0.164
35	39	1.182	0.846
50	42	0.589	1.698
75	43	0.467	2.141
100	42	0.589	1.698

значение. Это означает, что на больших длинах цепочки её перемагничивание определяется исключительно шириной доменной стенки.

5. Заключение

В работе исследованы процессы перемагничивания цепочек Co различной длины на поверхности Pt , описаны методы моделирования и расчёта таких систем, построены пути с наименьшим перепадом энергии для магнитных переходов. Установлено, что при длине цепочки $N < 23$ процесс перемагничивания происходит посредством синхронного переворачивания векторов магнитных моментов. В более длинных цепочках перемагничивание осуществляется за счёт образования Неелевской доменной стенки. Были рассчитаны активационные барьеры для цепочек длиной от 10 до 100 атомов. Получена оценка времен жизни магнитных состояний в приближении постоянства префактора ν_0 . Возможно, что этот множитель сам зависит от параметров системы: длины цепочки, величины внешнего поля, геометрии. Учет этих эффектов требует отдельного рассмотрения.

Список литературы

- [1] Žutić I., Fabian J., Sarma S. D. Spintronics: Fundamentals and applications //Reviews of modern physics. – 2004. – Т. 76. – №. 2. – С. 323.
- [2] Loth, S., Baumann, S., Lutz, C.P., Eigler, D.M. and Heinrich, A.J., 2012. Bistability in atomic-scale antiferromagnets. Science, 335(6065), pp.196-199.
- [3] Gambardella P. et al. Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains //Nature. – 2002. – Т. 416. – №. 6878. – С. 301-304.
- [4] Сыромятников А. Г. и др. Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов //Успехи физических наук. – 2021. – Т. 191. – №. 7. – С. 705-737.
- [5] Li Y., Liu B. G. Long-range ferromagnetism in one-dimensional monatomic spin chains //Physical Review B. – 2006. – Т. 73. – №. 17. – С. 174418.
- [6] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jónsson H. Harmonic transition-state theory of thermal spin transitions. // Phys. Rev. B - 2012. - V. 85, P. 184409.
- [7] Лобанов И. С., Поткина М. Н., Уздин В. М. Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано-и микроструктур (Миниобзор) //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2021. – Т. 113. – №. 12. – С. 833-847.
- [8] Dzyaloshinsky I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics //Journal of physics and chemistry of solids. – 1958. – Т. 4. – №. 4. – С. 241-255.
- [9] M.N. Potkina, I.S. Lobanov, H. Jónsson, and V. M. Uzdin, Stability of magnetic skyrmions: Systematic calculations of the effect of size from nanometer scale to microns.//Phys. Rev. B - 2023. - V. 107, P. 184414.
- [10] Schweffinghaus B. et al. Role of Dzyaloshinskii-Moriya interaction for magnetism in transition-metal chains at Pt step edges //Physical Review B. – 2016. – Т. 94. – №. 2. – С. 024403
- [11] Aurelien Manchon. Spintronics Lectures. (2020)
- [12] Kolesnikov S. V., Sapronova E. S. Influence of Dzyaloshinskii–Moriya and Dipole–Dipole Interactions on Spontaneous Magnetization Reversal Time of Finite-Length Co Chains on Pt (664) Surfaces //IEEE Magnetics Letters. – 2022. – Т. 13. – С. 1-5.

- [13] Колесников С. В., Колесникова И. Н. Оценка времени перемагничивания антиферромагнитных цепочек в рамках модели Гейзенберга //Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2017. – Т. 152. – №. 4. – С. 759-766.
- [14] Choi D. J. et al. Colloquium: Atomic spin chains on surfaces //Reviews of Modern Physics. – 2019. – Т. 91. – №. 4. – С. 041001.
- [15] P.W.D. Charles, Project Title, (2013), GitHub repository, <https://github.com/sittzon/magnes>
- [16] Abert C. Micromagnetics and spintronics: models and numerical methods //The European Physical Journal B. – 2019. – Т. 92. – С. 1-45.
- [17] Braun H. B. Fluctuations and instabilities of ferromagnetic domain-wall pairs in an external magnetic field //Physical Review B. – 1994. – Т. 50. – №. 22. – С. 16485.