

ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ВРЕМЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

*С. В. Колесников**, *Е. С. Сапронова*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119899 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 апреля 2022 г.,
после переработки 25 апреля 2022 г.
Принята к публикации 17 мая 2022 г.

Перемагничивание атомных цепочек на поверхности металлов исследовано теоретически с помощью разработанного ранее аналитического метода и геодезического метода упругой ленты. Атомные цепочки могут быть разделены на три группы: цепочки с малой, средней и большой шириной доменной стенки. Показано, что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени спонтанного перемагничивания цепочек ФМ \parallel и АФМ \perp и уменьшению времени перемагничивания цепочек ФМ \perp и АФМ \parallel . Для цепочек ФМ \perp и АФМ \perp с доменной стенкой средней ширины учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к появлению энергетического барьера между двумя состояниями доменной стенки, отличающимися направлением вращения магнитных моментов. Перемагничивание атомных цепочек из третьей группы может происходить двумя способами: либо все магнитные моменты переворачиваются одновременно, либо по очереди. Переход от одного режима перемагничивания к другому происходит при критической длине N_0 . При этом влияние диполь-дипольного взаимодействия наиболее существенно при длине цепочки, близкой к N_0 . Численные оценки показали, что в некоторых случаях учет диполь-дипольного взаимодействия может изменить время перемагничивания цепочки на порядок величины.

DOI: 10.31857/S0044451022110116

EDN: KZYENI

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование свойств атомных цепочек и нанопроводов имеет огромное значение для развития спинтроники [1], квантовых компьютеров [2], квантовой передачи информации [3, 4] и многих других областей современной физики [5–7]. Возможность использования атомных цепочек в качестве бита информации появилась после открытия «гигантской» энергии магнитной анизотропии (ЭМА) атомов Co в ферромагнитных цепочках на поверхности Pt(997) [8, 9]. Для хранения информации могут быть также использованы и антиферромагнитные цепочки из атомов Fe на поверхности Cu₂N/Cu(001) [10, 11].

Магнитные свойства атомных цепочек можно удовлетворительно описать в рамках классической модели Гейзенберга с одноосной магнитной анизотропией [12]. Гамильтониан такой модели имеет вид

$$H = -J \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e})^2, \quad (1)$$

где \mathbf{s}_i и \mathbf{e} — соответственно единичные векторы магнитных моментов атомов и оси легкого намагничивания, K — энергия магнитной анизотропии, J — обменный интеграл. Для ферромагнитной цепочки $J > 0$, а для антиферромагнитной $J < 0$. Параметры гамильтониана (1) могут быть найдены экспериментально или вычислены из первых принципов, например, в рамках теории функционала плотности [13] или методом гриновских функций Корринги–Кона–Ростокера [14].

Кратко обсудим вопрос о применимости классической модели. Во-первых, в атомных цепочках конечной длины возможны квантовые осцилляции между основным и первым возбужденным состоя-

* E-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

ниями. Однако на поверхности металла эти осцилляции подавляются за счет взаимодействия цепочки с электронным газом подложки [12], и их можно не учитывать при температуре выше нескольких милликельвинов. Учет вероятности туннелирования при вычислении частот переворота магнитных моментов в квазиклассическом приближении [15] показывает, что этим эффектом также можно пренебречь при температурах выше одного кельвина [16, 17]. Таким образом, при температуре выше 1 К мы можем описывать магнитный момент атома с помощью классического вектора. Более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в обзорной статье [6].

Для исследования коллективных магнитных свойств атомной цепочки можно решать уравнение Ландау — Лифшица — Гильберта [18, 19] или моделировать ее свойства кинетическим методом Монте-Карло (КММК) [20]. Например, простейшая КММК-модель [21], предполагающая, что магнитные моменты всех атомов параллельны оси легкой намагниченности, позволяет вычислять критическую температуру, среднее время спонтанного перемагничивания и коэрцитивную силу ферромагнитных цепочек [17, 22–24]. Эта модель также может быть использована для исследования магнитных свойств антиферромагнитных цепочек [25, 26]. Однако предположение о коллинеарности магнитных моментов может быть весьма грубым. Хорошо известно, что метастабильные состояния ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек могут быть неколлинеарными [27–29]. Недавно была предложена усовершенствованная КММК-модель [30], позволяющая учитывать неколлинеарность метастабильных состояний при перемагничивании. При этом было показано, что при условии $|J| \gtrsim K$ результаты, полученные в рамках коллинеарной и неколлинеарной КММК-моделей, могут существенно различаться.

Важно отметить, что КММК является статистическим методом, а следовательно, его использование сопряжено с долгими и ресурсозатратными компьютерными вычислениями. К счастью, оказывается возможным построить простой аналитический метод [31–34], позволяющий вычислять средние времена спонтанного и вынужденного перемагничивания атомных цепочек, а также строить кривые намагничивания для ферромагнитных цепочек. Использование аналитического метода позволяет легко оценить возможные перспективы технического применения тех или иных атомных цепочек [35]. При этом результаты аналитических вычислений находятся

в превосходном количественном согласии с результатами КММК-моделирования в случае как коллинеарной, так и неколлинеарной моделей [30].

В данной работе мы обсудим влияние диполь-дипольного взаимодействия между атомами цепочки на время ее спонтанного перемагничивания. Мы будем работать в рамках неколлинеарной модели [30], используя при этом разработанный ранее аналитический метод [31–34].

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Кратко опишем основные идеи, лежащие в основе аналитического метода [31–34] вычисления времени перемагничивания атомной цепочки конечной длины. Мы рассматриваем атомные цепочки, основное состояние которых является коллинеарным (ферромагнитным или антиферромагнитным), а метастабильные (возбужденные) состояния цепочки могут быть неколлинеарными. Метастабильным состоянием с наименьшей энергией является состояние атомной цепочки с одной доменной стенкой. Таким образом, можно предположить, что перемагничивание достаточно короткой атомной цепочки происходит за счет образования одной доменной стенки и ее блуждания вдоль цепочки. В простейшем случае можно считать, что случайное блуждание доменной стенки характеризуется тремя частотами: частотой ν_1 появления доменной стенки на краю цепочки, частотой ν_2 ее исчезновения на краю цепочки и частотой ν_3 перехода доменной стенки внутри цепочки из одного метастабильного положения в соседнее. Тогда среднее время τ спонтанного перемагничивания атомной цепочки будет равно среднему времени блуждания доменной стенки внутри цепочки [31]:

$$\tau = \frac{1}{2b} \left\{ \frac{b}{\nu_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2b)}{1-b} \right] + \frac{1}{\nu_1} [N(1-b) - 2(1-2b)] \right\}, \quad (2)$$

где $b = \nu_3/(\nu_2 + \nu_3)$, N — число атомов в цепочке. Формула (2) справедлива как в случае ферромагнитных, так и антиферромагнитных цепочек [32]. Она также допускает обобщение на случай двойных атомных цепочек [33].

Необходимо отметить, что при выводе формулы (2) предполагается, что среднее время блуждания доменной стенки внутри цепочки не должно превышать среднего времени образования доменной

стенки на краю цепочки. Из равенства этих времен легко получить условие [31]

$$\frac{(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)(\nu_2 + \nu_3)}{\nu_1 \nu_2} = \left(\frac{N}{2} - 1\right)^2. \quad (3)$$

Условие (3) позволяет найти верхние пределы применимости формулы (2): либо максимальную температуру T_{max} для цепочки фиксированной длины, либо максимальную длину цепочки N_{max} при фиксированной температуре. Важно подчеркнуть, что температура T_{max} ниже критической температуры фазового перехода в парамагнитное состояние.

В работе [30] было показано, что формула (2) может быть успешно использована и в рамках неколлинеарной модели. При этом число атомов N должно быть заменено на $N_{eff} \leq N$, где $N_{eff} - 1$ — число метастабильных положений доменной стенки в цепочке. Частоты ν_i ($i = 1, 2, 3$) вычисляются по формуле Аррениуса:

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right), \quad (4)$$

где T — температура системы, k_B — постоянная Больцмана, ΔE_i — энергетический барьер между двумя состояниями атомной цепочки, $\nu_0 = 10^9$ Гц [8] — частотный префактор. Энергетические барьеры ΔE_i вычисляются с помощью геодезического метода упругой ленты (geodesic nudged elastic band, GNEB) [36]. Поиск метастабильных состояний атомной цепочки может быть осуществлен методами, описанными в работе [30] или в работах [28, 29].

Для учета диполь-дипольного взаимодействия необходимо добавить к гамильтониану (1) следующее слагаемое:

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

где $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ — радиус-вектор, соединяющий i -й и j -й атомы, μ — магнитный момент, который мы считаем одинаковым для всех атомов, $\mu_0/4\pi = 10^{-7}$ Гн/м. Если направить ось z вдоль атомной цепочки, то слагаемое H_{dip} может быть записано в виде

$$H_{dip} = A \left(\frac{\mu}{\mu_B}\right)^2 \left(\frac{1\text{\AA}}{a}\right)^3 \sum_{i>j} \frac{s_x^i s_x^j + s_y^i s_y^j - 2s_z^i s_z^j}{(n_i - n_j)^3}, \quad (6)$$

где a — расстояние между ближайшими атомами в цепочке, n_i — номер i -го атома, μ_B — магнетон Бора, $A = 5.37 \cdot 10^{-5}$ эВ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Учет неколлинеарности магнитных моментов и диполь-дипольного взаимодействия между ними может существенно повлиять на оценку времени спонтанного перемагничивания магнитных цепочек. Ниже мы сначала обсудим некоторые закономерности общего характера, а затем рассмотрим несколько конкретных примеров.

3.1. Закономерности общего характера

Как известно [37, 38], полуширина доменной стенки δN в модели без диполь-дипольного взаимодействия зависит только от отношения констант $|J|$ и K : $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$. Рассмотрим сначала предельный случай $K/|J| \gg 1$. В этом случае шириной доменной стенки можно пренебречь, а энергетические барьеры для переворота магнитных моментов вычислять по формуле [21]

$$\Delta E_i = \frac{(2K + h_i)^2}{4K}, \quad (7)$$

где $h_i = J(\mathbf{s}_i \cdot (\mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{s}_{i-1}))$. В рамках этой модели легко учесть вклад диполь-дипольного взаимодействия. При этом надо различать следующие четыре случая: ферромагнитная/антиферромагнитная атомная цепочка может быть параллельна ($\Phi M \parallel / A \Phi M \parallel$), либо перпендикулярна ($\Phi M \perp / A \Phi M \perp$) оси легкого намагничивания. Рассмотрим, например, образование доменной стенки на краю цепочки в случае $\Phi M \parallel$. Пусть в начальном состоянии все магнитные моменты направлены по оси z . Тогда, согласно выражению (6), крайний атом цепочки находится во внешнем магнитном поле

$$\mathbf{B} = \mathbf{e}_z \frac{2\mu A}{a^3} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{n^3}, \quad (8)$$

где магнитный момент μ измеряется в магнетонах Бора, a — в ангстремах. Для достаточно длинной цепочки можно заменить $N - 1$ на бесконечность, тогда $\sum_n 1/n^3 = \zeta(3) \approx 1.202$. И для энергетического барьера ΔE_1 получим выражение (7) с $h_1 = J + 2.404 A \mu^2 / a^3$. Результаты аналогичных вычислений величин h_1 и h_2 приведены в табл. 1. Кроме того, при вычислении энергетического барьера для сдвига доменной стенки вдоль цепочки во всех четырех случаях получаем $h_3 = 0$ ($\Delta E_3 = K$), если доменная стенка находится посередине цепочки.

Из табл. 1 и формулы (2) видно, что диполь-дипольное взаимодействие в модели коллинеарного

Таблица 1. Выражения для параметров h_1 и h_2 , необходимых для вычисления энергетических барьеров для образования и исчезновения доменной стенки на краю атомной цепочки; μ измеряется в магнетонах Бора, a — в ангстремах

Тип	h_1	h_2
ФМ	$J + 2.404A\mu^2/a^3$	$-J - 2.404A\mu^2/a^3$
ФМ⊥	$J - 1.202A\mu^2/a^3$	$-J + 1.202A\mu^2/a^3$
АФМ	$ J - 1.803A\mu^2/a^3$	$- J + 1.803A\mu^2/a^3$
АФМ⊥	$ J + 0.902A\mu^2/a^3$	$- J - 0.902A\mu^2/a^3$

магнетизма приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочек ФМ|| и АФМ⊥ и уменьшению времени τ цепочек ФМ⊥ и АФМ||.

В области параметров $2/3 < K/|J| < C_1$, где $C_1 \gtrsim 1$, доменная стенка имеет полуширину менее одного межатомного расстояния [38], и магнитные моменты в доменной стенке остаются почти коллинеарными. В этом случае для вычисления времени спонтанного перемагничивания можно использовать формулу (2), не внося в нее никаких изменений [30], однако энергетические барьеры теперь должны вычисляться не по формуле (7), а с помощью метода GNEB [36]. Отметим, что в этой области параметров обычно выполняется условие $\nu_1 \ll \nu_3 \ll \nu_2$, и формулу (2) можно приближенно записать в виде

$$\tau \approx \frac{N-2}{2} \frac{\nu_2}{\nu_1\nu_3}. \tag{9}$$

Наиболее интересной представляется область параметров $C_2 < K/|J| < 2/3$, где $C_2 \simeq 0.2$. В этой области параметров доменная стенка имеет ширину порядка нескольких атомов. Барьеры ΔE_2 и ΔE_3 экспоненциально быстро убывают при уменьшении параметра $K/|J|$, что соответствует результатам работы [38] для бесконечно длинной цепочки. При этом первое метастабильное положение доменной стенки оказывается между i_0 -м и $(i_0 + 1)$ -м атомом с края, где $i_0 \geq 1$. Получается, что число метастабильных положений доменной стенки в атомной цепочке равно не $N - 1$, а $N_{eff} - 1$, где $N_{eff} = N + 2 - 2i_0$. Для оценки среднего времени спонтанного перемагничивания цепочки можно по-прежнему использовать формулу (2), однако N необходимо заменить на N_{eff} . При этом обычно выполняются соотношения $\nu_1 \ll \nu_2 \approx \nu_3 \approx \nu_0$, и формула (9) приобретает совсем простой вид

$$\tau \approx (N_{eff} - 2)/2\nu_1.$$

В случае, когда ось легкого намагничивания (обозначим ее x) перпендикулярна атомной цепочке (расположена вдоль оси z), возможны различные конфигурации доменных стенок. В неелевской доменной стенке магнитные моменты лежат в плоскости xz , а в блоховской — в плоскости xy . В отсутствие диполь-дипольного взаимодействия энергии неелевской и блоховской доменных стенок (а также всех промежуточных вариантов) одинаковы. Диполь-дипольное взаимодействие приводит к тому, что в случае ФМ⊥ энергетически более выгодной оказывается неелевская стенка, а в случае АФМ⊥ — блоховская. В результате два отличающиеся друг от друга направлением вращения магнитных моментов метастабильных состояния оказываются разделены энергетическим барьером ΔE_4 . Отметим, что в рамках аналитической модели [31–34] величина барьера ΔE_4 не влияет на время перемагничивания атомной цепочки.

Наконец, в области параметров $K/|J| \ll 1$ либо энергетический барьер ΔE_3 пренебрежимо мал, либо формирование доменной стенки вообще не происходит. В этом случае аналитическая модель [31–34], конечно же, неверна. У атомной цепочки нет метастабильных состояний, и время перемагничивания цепочки можно оценить по формуле

$$\tau = \frac{1}{2\nu_0} \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \tag{10}$$

где ΔE — энергетический барьер перемагничивания всей атомной цепочки как единого целого. При этом перемагничивание цепочки может происходить двумя способами. Если длина цепочки N меньше некоторой критической длины N_0 , то все магнитные моменты переворачиваются одновременно и $\Delta E = KN$. Если $N \geq N_0$, то магнитные моменты переворачиваются по очереди, т. е. происходит формирование промежуточного неустойчивого состояния в виде доменной стенки. В этом случае энергетический барьер ΔE может быть вычислен с помощью метода GNEB [36].

Для оценки критической длины N_0 по порядку величины можно воспользоваться следующими соображениями. Как известно [37, 38], при $K/|J| \ll 1$ энергия доменной стенки в бесконечно длинной цепочке равна $\sqrt{8K|J|}$. Приравнявая эту величину к KN_0 , получим

$$N_0 = \sqrt{\frac{8|J|}{K}}. \tag{11}$$

3.2. Численные оценки

Рассмотрим цепочки из атомов Fe, Co и Mn на поверхностях различных металлов. Величины обменных интегралов J , ЭМА K и магнитных моментов μ , взятые из работ [8, 10, 11, 25, 39, 40], приведены в табл. 2 и 3. Данные в таблицах упорядочены по возрастанию величины $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$, которую можно считать грубой оценкой полуширины доменной стенки. В этой же последовательности эти цепочки обсуждаются ниже.

3.2.1. Малая ширина доменной стенки

В качестве первого примера рассмотрим антиферромагнитную цепочку Fe на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$. Данная система привлекла к себе огромное внимание исследователей в связи с возможностью создания антиферромагнитных битов информации размером около десяти атомов [10]. Ось легкого намагничивания атомов совпадает с направлением вдоль цепочки (АФМ||). Расстояние между атомами Fe составляет $a = 7.23 \text{ \AA}$. Для численных оценок выбраны параметры J , K , μ , приведенные в табл. 2. Отношение $K/|J|$ равно 2.3, поэтому доменная стенка имеет полуширину менее одного межатомного расстояния ($\delta N = 0.47$), и магнитные моменты в доменной стенке остаются почти коллинеарными. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, необходимые для оценки времени спонтанного перемагничивания, также приведены в табл. 2. Вычисления проводились для цепочки из $N = 20$ атомов. Для формирования доменной стенки на краю цепочки достаточно переворота одного магнитного момента, поэтому $N_{\text{eff}} = N$. Вследствие достаточно большого межатомного расстояния a учет диполь-дипольного взаимодействия не оказывает существенного влияния на эти барьеры. Приведем здесь разности энергетических барьеров $\delta E_i = \Delta E_i^{\text{dip}} - \Delta E_i$, вычисленные с учетом и без учета диполь-дипольного взаимодействия: $\delta E_1 = -2.65 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_2 = 1.31 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_3 = -4.83 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}$. Для сравнения, аналогичные величины, вычисленные согласно оценочным формулам из табл. 1, равны $\delta E_1 = -2.41 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_2 = 1.55 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$, $\delta E_3 = 0$. Видно, что учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к изменению энергетических барьеров на величину порядка 10^{-6} эВ , что на два порядка меньше, чем изменение энергетических барьеров в этой же системе при учете неколлинеарности магнитных моментов [30]. Таким образом, даже в случае почти коллинеарного магнетизма учет диполь-дипольного

взаимодействия без учета эффекта неколлинеарности не имеет смысла. С другой стороны, оценочные формулы из табл. 1 позволяют правильно оценить вклад диполь-дипольного взаимодействия по порядку величины.

На рис. 1а показана зависимость времени спонтанного перемагничивания цепочки из 20 атомов Fe, вычисленная по формуле (2) в температурном интервале от 2 К до $T_{\text{max}} = 7.5 \text{ К}$. На рис. 1б в том же температурном интервале показано отношение τ_{dip}/τ времен перемагничивания, вычисленных с учетом и без учета диполь-дипольного взаимодействия. Отношение τ_{dip}/τ монотонно растет от значения 0.97 при температуре 2 К и стремится к 1 при увеличении температуры.

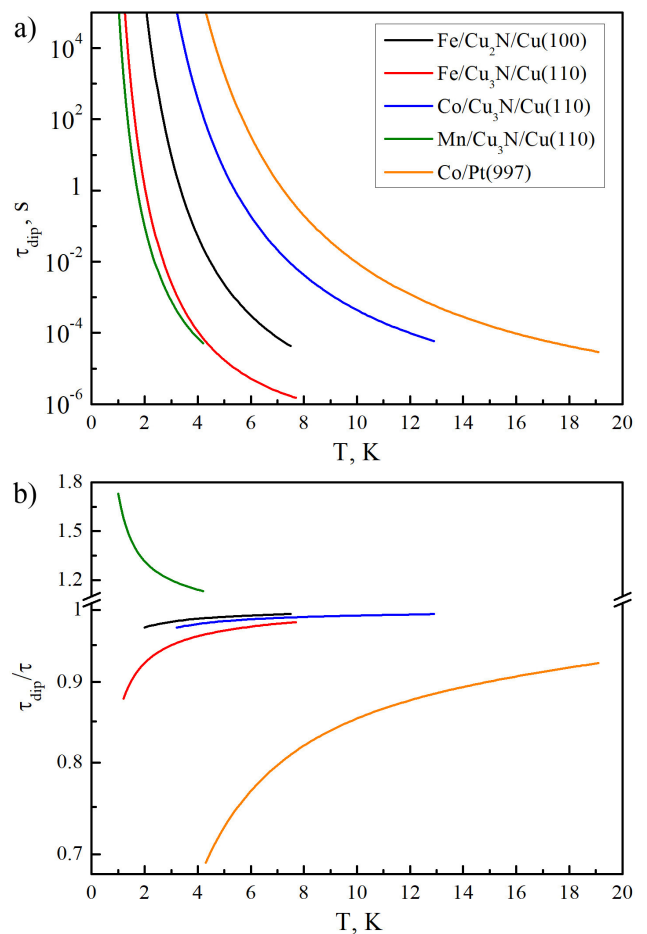


Рис. 1. (В цвете онлайн) а) Зависимости времени спонтанного перемагничивания атомных цепочек τ_{dip} от температуры. б) Отношения времен перемагничивания, вычисленных с учетом (τ_{dip}) и без учета (τ) диполь-дипольного взаимодействия

Далее рассмотрим ферромагнитную цепочку из атомов Fe на поверхности $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$. Вы-

Таблица 2. Характеристики атомных цепочек Fe, Co и Mn на металлических поверхностях. Обменные интегралы J , ЭМА K и магнитные моменты μ атомов взяты из работ [8, 10, 11, 25]. Полуширина доменной стенки вычислена по формуле $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$, а энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$ — с помощью метода GNEB при учете диполь-дипольного взаимодействия

Система	Тип	J , мэВ	K , мэВ	μ/μ_B	δN	ΔE_1 , мэВ	ΔE_2 , мэВ	ΔE_3 , мэВ
Fe/Cu ₂ N/Cu(001)	АФМ	-1.3	3.0	2.78	0.47	4.320	1.724	2.762
Fe/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ⊥	1.25	1.21	2.78	0.72	2.581	0.083	0.739
Co/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ⊥	3.81	2.3	1.67	0.91	7.502	0.059	0.396
Mn/Cu ₃ N/Cu(110)	ФМ	1.25	0.67	3.78	0.96	2.484	0.055	0.074
Co/Pt(997)	ФМ⊥	7.5	2.0	2.4	1.37	10.545	0.003	0.006

Таблица 3. Характеристики атомных цепочек Fe, Co на поверхности Cu(775). Обменные интегралы J , ЭМА K и магнитные моменты μ атомов взяты из работ [7, 39, 40]. Полуширина доменной стенки вычислена по формуле $\delta N = \sqrt{J/2K}$, энергия доменной стенки в бесконечно длинной цепочке — по формуле $\Delta E_\infty = \sqrt{8KJ}$, критические длины цепочек N_0 и N_0^{dip} — с помощью метода GNEB

Система	Тип	J , мэВ	K , мэВ	μ/μ_B	δN	ΔE_∞ , мэВ	N_0	N_0^{dip}
Co/Cu(775)	ФМ	72.5	2.33	1.66	3.94	36.76	13	13
Fe/Cu(775)	ФМ	75.0	0.72	2.88	7.21	20.78	23	22

числения методом функционала плотности [25] показали, что ось легкого намагничивания атомов перпендикулярна цепочке (ФМ⊥). Параметры J , K , μ приведены в табл. 2. Отношение K/J близко к 1, поэтому доменная стенка в данном случае оказывается несколько шире ($\delta N = 0.72$), чем в предыдущей системе. Тем не менее для формирования доменной стенки на краю цепочки по-прежнему достаточно переворота одного магнитного момента ($N_{eff} = N$), поэтому система Fe/Cu₃N/Cu(110) в целом очень похожа на рассмотренную выше систему Fe/Cu₂N/Cu(001). Однако атомы Fe находятся на меньшем расстоянии $a = 5.11 \text{ \AA}$ друг от друга, следовательно, возрастает и роль диполь-дипольного взаимодействия. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочки из 20 атомов, приведены в табл. 2. Зависимость времени спонтанного перемагничивания цепочки из 20 атомов Fe в температурном интервале от 1.2 К до $T_{max} = 7.7 \text{ К}$ приведена на рис. 1а, а на рис. 1б в том же температурном интервале показано отношение τ_{dip}/τ . Видно, что величина τ_{dip}/τ изменяется от 0.88 до 0.98.

3.2.2. Средняя ширина доменной стенки

Рассмотрим ферромагнитные цепочки из атомов Co и Mn на поверхности Cu₃N/Cu(110). Парамет-

ры J , K , μ для этих систем вычислены методом функционала плотности [25] и приведены в табл. 2. Расстояние между атомами в цепочке такое же, как в системе Fe/Cu₃N/Cu(110), т. е. $a = 5.11 \text{ \AA}$. Ось легкого намагничивания атомов Co перпендикулярна цепочке (ФМ⊥), а атомов Mn — параллельна цепочке (ФМ||). Отношение K/J равно 0.6 для цепочек из атомов Co и 0.54 для цепочек из атомов Mn. Увеличение ширины доменной стенки приводит к тому, что для формирования доменной стенки на краю цепочки не достаточно переворота одного магнитного момента: первому метастабильному состоянию соответствует переворот двух (трех) магнитных моментов атомов Co (Mn). В результате число метастабильных положений доменной стенки внутри цепочки оказывается равным $N_{eff} - 1$, где $N_{eff} = N - 2$ для цепочки из атомов Co и $N_{eff} = N - 4$ для цепочки из атомов Mn. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочек из 100 атомов Co и Mn, приведены в табл. 2. Зависимости времени τ_{dip} спонтанного перемагничивания и отношения τ_{dip}/τ от температуры для этих цепочек показаны на рис. 1. Температурные интервалы выбраны следующим образом: от 3.2 К до $T_{max} = 12.9 \text{ К}$ для Co и от 1 К до $T_{max} = 4.2 \text{ К}$ для Mn. На рис. 1б видно, что величина τ_{dip}/τ изменяется от 0.97 до 0.99 для Co и от 1.73 до 1.13 для Mn. Отметим, что данный результат согласуется с выводом, сделанным на основе

анализа результатов, приведенных в табл. 1. Действительно, диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочки $\Phi M \parallel$ и уменьшению времени τ цепочки $\Phi M \perp$.

Для системы $\text{Co}/\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$ имеет смысл вычисление энергетического барьера ΔE_4 между двумя неелевскими доменными стенками, отличающимися друг от друга направлением вращения магнитных моментов. В данном случае величина $\Delta E_4 = 1.87 \cdot 10^{-6}$ эВ оказывается на два порядка меньше барьера ΔE_3 для перемещения доменной стенки вдоль атомной цепочки.

Наконец, рассмотрим ферромагнитную цепочку из атомов Co на поверхности $\text{Pt}(997)$. На сегодняшний день эту систему можно считать наиболее хорошо экспериментально изученным примером одномерного ферромагнетизма [5, 6]. Расстояние между атомами в цепочке $a = 2.78 \text{ \AA}$, параметры J , K , μ , взятые из работы [8], приведены в табл. 2. Ось легкого намагничивания направлена перпендикулярна цепочке ($\Phi M \perp$). Отношение $K/J = 0.27$ достаточно мало, поэтому полуширина доменной стенки превышает один атом ($\delta N = 1.37$). Это приводит к тому, что первому метастабильному состоянию доменной стенки на краю цепочки соответствует переворот сразу пяти магнитных моментов атомов Co , таким образом, $N_{eff} = N - 10$. Энергетические барьеры $\Delta E_{1,2,3}$, вычисленные для цепочки из 100 атомов Co , приведены в табл. 2.

Следует обратить особое внимание на малую величину барьера ΔE_3 , она оказывается на порядок меньше $k_B T$ даже при температуре 1 К. Строго говоря, это означает, что предположение о прыжковом механизме перемещения доменной стенки между соседними метастабильными положениями в данном случае неверно. Поэтому время τ спонтанного перемагничивания, вычисленное по формуле (2), является лишь оценкой сверху. В качестве оценки снизу может быть взята формула (10) при $\Delta E = \Delta E_1$. Вообще данный случай является промежуточным между системами с узкой доменной стенкой, рассмотренными выше, и системами с широкой доменной стенкой, которым посвящен следующий раздел статьи. Итак, для системы $\text{Co}/\text{Pt}(997)$ можно утверждать, что время спонтанного перемагничивания равно $\tau = N^*/2\nu_1$, где $1 < N^* < N_{eff} - 2$. Из общих соображений можно также утверждать, что величина N^* монотонно убывает с увеличением температуры. Тем не менее основная зависимость от температуры определяется множителем $1/\nu_1$, поэтому для оценки τ по порядку величины мы можем про-

должать пользоваться формулой (2). Зависимости времени τ_{dip} и отношения τ_{dip}/τ в температурном интервале от 4.3 К до $T_{max} = 19.1$ К показаны на рис. 1. Видно, что отношение τ_{dip}/τ изменяется от 0.69 до 0.93. Таким образом, различие величин τ_{dip} и τ может достигать 30%. Отметим, что энергетический барьер ΔE_4 между двумя неелевскими доменными стенками, отличающимися друг от друга направлением вращения магнитных моментов, оказывается равным $1.12 \cdot 10^{-4}$ эВ, что на два порядка превышает величину ΔE_3 . Поэтому вероятность изменения типа доменной стенки во время перемагничивания крайне мала.

В заключение этого раздела сделаем несколько замечаний, относящихся ко всем рассмотренным выше системам. Во-первых, как видно из приближенной формулы (9), время спонтанного перемагничивания цепочки прямо пропорционально величине $N_{eff} - 2$. Поэтому зависимости, приведенные на рис. 1a, легко масштабируются при изменении длины цепочки, а зависимости, приведенные на рис. 1b, вообще не меняются. Во-вторых, минимальная температура при построении графиков на рис. 1 выбиралась так, чтобы соответствующее время τ было порядка 10^5 с. При таких временах τ атомная цепочка может считаться стабильным битом информации. В-третьих, из табл. 2 видно, что величина энергетического барьера ΔE_3 быстро уменьшается при уменьшении параметра $K/|J|$, что находится в согласии с работой [38]. При дальнейшем уменьшении параметра $K/|J|$ аналитический метод [31–34] становится неприменимым.

3.2.3. Большая ширина доменной стенки

Рассмотрим ферромагнитные цепочки из атомов Co и Fe на поверхности $\text{Cu}(775)$. Для обеих систем ось легкого намагничивания направлена вдоль цепочки [40] ($\Phi M \parallel$). Параметры J , K , μ , вычисленные методом функционала плотности [7, 39, 40], приведены в табл. 3. Отношение K/J равно $3.2 \cdot 10^{-2}$ для системы $\text{Co}/\text{Cu}(775)$ и $9.6 \cdot 10^{-3}$ для системы $\text{Fe}/\text{Cu}(775)$, что соответствует полуширине δN доменной стенки 3.94 и 7.21 атомов. Для столь широких доменных стенок энергетический барьер ΔE_3 пренебрежимо мал [38]. Поэтому для вычисления времени спонтанного перемагничивания цепочек используется формула (10). Отметим, что атомы Co и Fe в рассматриваемых цепочках находятся на небольшом расстоянии $a = 2.56 \text{ \AA}$ друг от друга, что увеличивает роль диполь-дипольного взаимодействия.

Как видно из рис. 2a, без учета диполь-дипольного взаимодействия зависимость энергетического барьера ΔE перемагничивания атомной цепочки от ее длины стремится к энергии $\Delta E_\infty = \sqrt{8KJ}$ формирования доменной стенки в бесконечно длинной цепочке. Учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к тому, что предельное значение ΔE_∞^{dip} превышает величину $\sqrt{8KJ}$ на $2.55 \cdot 10^{-4}$ эВ для цепочки Co/Cu(775) и на $1.34 \cdot 10^{-3}$ эВ для цепочки Fe/Cu(775). Отметим, что данный результат находится в согласии с выводом (см. разд. 3.1), что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени спонтанного перемагничивания цепочек ФМ||. Отношение τ_{dip}/τ показано на рис. 2b. Видно, что для длинных цепочек при температуре 10 К оно стремится к 1.34 для цепочки Co/Cu(775) и к 4.76 для цепочки Fe/Cu(775).

Отдельного обсуждения заслуживает переход от режима, в котором все магнитные моменты переворачиваются одновременно и $\Delta E = KN$ (штриховые линии на рис. 2a), к режиму, в котором происходит формирование промежуточного неустойчивого состояния в виде доменной стенки. Вычисленная по формуле (11) критическая длина цепочки составляет 16 атомов для цепочки Co/Cu(775) и 29 атомов для цепочки Fe/Cu(775). Для цепочки конечной длины энергия формирования доменной стенки ΔE оказывается меньше, чем ΔE_∞ . Поэтому и критическая длина цепочки N_0 оказывается несколько ниже (см. табл. 3 и рис. 2a). Отметим, что в случае системы Co/Cu(775) критическая длина оказывается одинаковой ($N_0 = 13$) как с учетом, так и без учета диполь-дипольного взаимодействия. В случае системы Fe/Cu(775) учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к уменьшению критической длины цепочки с 23 атомов до 22. Как видно на рис. 2b, диполь-дипольное взаимодействие оказывает максимальное влияние на время спонтанного перемагничивания атомной цепочки, если ее длина близка к критической. Отношение τ_{dip}/τ при температуре 10 К достигает максимального значения 1.48 для цепочки из 12 атомов Co и значения 9.56 для цепочки из 22 атомов Fe.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итоги работы, отметим, что магнитные атомные цепочки на поверхности металлов могут быть разделены на три группы: цепочки с малой, средней и большой шириной доменной стенки.

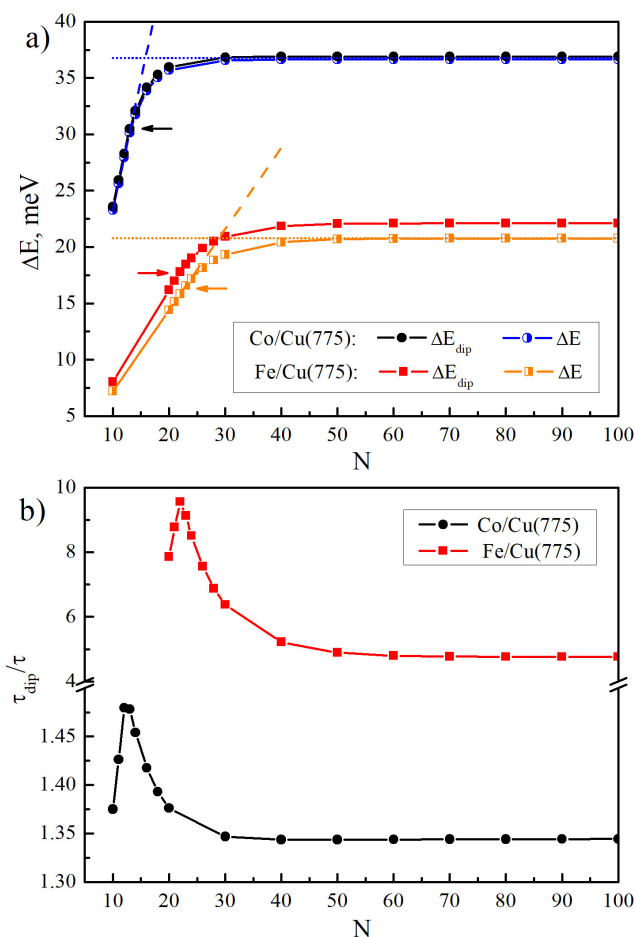


Рис. 2. (В цвете онлайн) а) Зависимости энергетического барьера ΔE для перемагничивания атомной цепочки от ее длины N . Штриховой линией показана величина KN , пунктирной — величина $\sqrt{8KJ}$, стрелками отмечены точки, соответствующие критической длине N_0 . б) Отношения времен перемагничивания при температуре 10 К, вычисленных с учетом (τ_{dip}) и без учета (τ) диполь-дипольного взаимодействия

При вычислении времени спонтанного перемагничивания цепочек из двух первых групп можно использовать аналитический метод [31–34], а время спонтанного перемагничивания цепочек из третьей группы может быть оценено по формуле (10). При этом энергетические барьеры для переворота магнитных моментов должны вычисляться в рамках неколлинеарной модели. Это можно сделать, например, с помощью метода GNEB.

На основе простой коллинеарной модели [21] можно сделать вывод о том, что диполь-дипольное взаимодействие приводит к увеличению среднего времени τ спонтанного перемагничивания цепочек ФМ|| и АФМ \perp и уменьшению времени τ цепочек ФМ \perp и АФМ||. Этот результат остается

верным и в неколлинеарной модели даже для атомных цепочек с доменной стенкой большой ширины.

Для цепочек ФМ \perp и АФМ \perp с доменной стенкой средней ширины учет диполь-дипольного взаимодействия приводит к появлению энергетического барьера между двумя состояниями доменной стенки, различающимися направлением вращения магнитных моментов. Несмотря на то, что этот барьер не оказывает влияния на время спонтанного перемагничивания цепочки, он может быть существенен для вычисления других физических величин, например, критической температуры.

Перемагничивание атомных цепочек из третьей группы может происходить двумя способами: либо все магнитные моменты переворачиваются одновременно, либо по очереди. Переход от одного режима перемагничивания к другому происходит при критической длине N_0 . Важно отметить, что влияние диполь-дипольного взаимодействия на время τ наиболее существенно при длине цепочки, близкой к N_0 .

Численные оценки влияния диполь-дипольного взаимодействия на время спонтанного перемагничивания показали, что в некоторых случаях отношение τ_{dip}/τ может достигать 10. Таким образом, диполь-дипольное взаимодействие может играть существенную роль в динамике перемагничивания атомных цепочек конечной длины на металлических поверхностях.

Благодарности. При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант No 21-72-20034). Один из авторов (Е. С. С.) является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
2. N. D. Mermin, *Quantum Computer Science: an Introduction*, Cambridge Univ. Press (2007).
3. S. Bose, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 207901 (2003).
4. H. Verma, L. Chotorlishvili, J. Berakdar, and S. K. Mishra, *Eur. Phys. Lett.* **119**, 30001 (2017).
5. D. J. Choi, N. Lorente, J. Wiebe, K. von Bergmann, A. F. Otte, and A. J. Heinrich, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 041001 (2019).
6. А. Г. Сыромятников, С. В. Колесников, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк, *УФН* **191**, 705 (2021).
7. A. G. Syromyatnikov, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *Mater. Lett.* **179**, 69 (2016).
8. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, *Nature* **416**, 301 (2002).
9. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, S. Rusponi, P. Ohresser, W. Eberhardt, C. Carbone, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077203 (2004).
10. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz, D. M. Eigler, and A. J. Heinrich, *Science* **335**, 196 (2012).
11. S. Yan, D.-J. Choi, J. A. J. Burgess, S. Rolf-Pissarczyk, and S. Loth, *Nat. Nanotechnol.* **10**, 40 (2015).
12. J.-P. Gauyacq and N. Lorente, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 455301 (2015).
13. W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
14. H. Ebert, D. Ködderitzsch, and J. Minár, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 096501 (2011).
15. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988).
16. W. Wernsdorfer, R. Cle'rac, C. Coulon, L. Lecren, and H. Miyasaka, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237203 (2005).
17. A. S. Smirnov, N. N. Negulyaev, W. Hergert, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, *New J. Phys.* **11**, 063004 (2009).
18. L. D. Landau and E. Lifshitz, *Phys. Z. Sowjetunion* **8**, 153 (1935).
19. K. Tao, O. P. Polyakov, and V. S. Stepanyuk, *Phys. Rev. B* **93**, 161412(R) (2016).
20. M. E. I. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford Univ. Press (2001).
21. Y. Li and B.-G. Liu, *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).
22. Y. Li and B.-G. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 217201 (2006).
23. K. M. Tsysar, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Chin. Phys. B* **24**, 097302 (2015).
24. С. В. Колесников, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, *ФТТ* **57**, 1492 (2015).

25. D. I. Bazhanov, O. V. Stepanyuk, O. V. Farberovich, and V. S. Stepanyuk, Phys. Rev. B **93**, 035444 (2016).
26. K. M. Tsysar, S. V. Kolesnikov, I. I. Sitnikov, and A. M. Saletsky, Mod. Phys. Lett. B **31**, 1750142 (2017).
27. L. Trallori, Phys. Rev. B **57**, 5923 (1998).
28. A. P. Popov, A. V. Anisimov, O. Eriksson, and N. V. Skorodumova, Phys. Rev. B **81**, 054440 (2010).
29. A. P. Popov, A. Rettori, and M. G. Pini, Phys. Rev. B **92**, 024414 (2015).
30. S. Kolesnikov and I. Kolesnikova, Europhys. Lett. **137**, 56003 (2022).
31. С. В. Колесников, Письма в ЖЭТФ **103**, 668 (2016).
32. С. В. Колесников, И. Н. Колесникова, ЖЭТФ **152**, 759 (2017).
33. S. V. Kolesnikov and I. N. Kolesnikova, Phys. Rev. B **100**, 224424 (2019).
34. S. V. Kolesnikov and I. N. Kolesnikova, IEEE Magn. Lett. **10**, 2509105 (2019).
35. S. Kolesnikov and E. Sapronova, IEEE Magn. Lett. **13**, 2501205 (2022).
36. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Comm. **196**, 335 (2015).
37. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
38. J. J. van der Broek and H. Zijlstra, IEEE Trans. Magn. **7**, 226 (1971).
39. H. Hashemi, G. Fischer, W. Hergert, and V. S. Stepanyuk, J. Appl. Phys. **107**, 09E311 (2010).
40. A. G. Syromyatnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, J. Magn. Magn. Mater. **510**, 166896 (2020).