

УДК 538.955

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК ИЗ СО НА ПОВЕРХНОСТИ Pt(664) С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО–МОРИЯ

© 2024 г. С. В. Колесников<sup>а,\*</sup>, Е. С. Сапронова<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119899 Россия

\*e-mail: kolesnikov\_s\_v\_@mail.ru

Поступила в редакцию 05.06.2023 г.

После доработки 27.08.2023 г.

Принята к публикации 27.08.2023 г.

В рамках непрерывной ХУ-модели получены аналитические выражения, позволяющие вычислять время спонтанного перемагничивания атомных цепочек конечной длины на поверхности металла. Взаимодействие магнитных моментов атомов описано классическим гамильтонианом, включающим в себя обменное взаимодействие Гейзенберга, взаимодействие Дзялошинского–Мория и энергию магнитной анизотропии. На примере системы Co/Pt(664) показано, что предложенный метод дает хорошее согласие с результатами численного моделирования в пределе коротких и длинных атомных цепочек. А для атомных цепочек промежуточной длины его можно использовать для получения ограничения сверху на время спонтанного перемагничивания. Получены зависимости времени спонтанного перемагничивания цепочек конечной длины из атомов Со от величины обменного интеграла, параметров, характеризующих магнитную анизотропию, а также от величины проекции вектора Дзялошинского на ось, перпендикулярную плоскости, в которой лежат магнитные моменты атомов. Показано, что предложенный метод имеет широкую область применения как по температуре, так и по значениям физических параметров, характеризующих магнитные свойства атомных цепочек. Таким образом, он может быть использован не только для системы Co/Pt(664), но и для других похожих систем.

**Ключевые слова:** одномерный ферромагнетизм, атомные цепочки, спонтанное перемагничивание, взаимодействие Дзялошинского–Мория, непрерывная ХУ-модель.

### ВВЕДЕНИЕ

Изучение атомных цепочек имеет огромный потенциал для развития различных областей современной науки и техники. Спинтроника [1], создание квантовых компьютеров [2], квантовые вычисления [3–5] могут стать сферами возможного применения ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек. Атомные цепочки имеют уникальные особенности и свойства, отличающиеся как от свойств объемных материалов, так и от свойств отдельных атомов. Интенсивное изучение атомных цепочек началось после открытия гигантской магнитной анизотропии атомов Со на поверхности Pt(997) [6, 7].

Взаимодействие Дзялошинского–Мория (DMI) [8, 9] представляет собой антисимметричную часть обменного взаимодействия между магнит-

ными атомами [10]. В антиферромагнетиках такое взаимодействие может приводить к неколлинеарности магнитных моментов атомов и появлению вследствие этого слабой спонтанной намагниченности, называемой слабым ферромагнетизмом [8, 11]. Интерес к изучению взаимодействия Дзялошинского–Мория в низкоразмерных структурах возник после обнаружения сильного взаимодействия Дзялошинского–Мория в пленках переходных металлов [12, 13]. В двумерных структурах взаимодействие Дзялошинского–Мория играет важную роль при формировании хиральных доменных стенок, пузырей и скирмионов [14–16]. Взаимодействие Дзялошинского–Мория в одномерных наноматериалах также приводит к ряду интересных явлений. Например, основное состояние атомных цепочек из атомов железа на поверхности Ir(001) оказывается неколли-

неарным вследствие сильного взаимодействия Дзялошинского–Мория [17, 18]. Кроме того, это взаимодействие может изменить энергии возбужденных состояний, даже если в основном состоянии магнитные моменты всех атомов цепочки коллинеарны [19–21].

Бесконечно длинная цепочка атомов Co на ступенчатой поверхности Pt(664) была теоретически исследована с помощью теории функционала плотности [20]. Найденные в этой работе параметры атомной цепочки были после использованы для вычисления времени спонтанного перемагничивания атомных цепочек Co конечной длины [22]. Для оценки времени спонтанного перемагничивания были вычислены энергетические барьеры для перемагничивания атомных цепочек длиной от 5 до 100 атомов. Вычисления проводили численно геодезическим методом упругой ленты (GNEB) [23]. Несмотря на то, что работа [22] представляет собой законченное теоретическое исследование при фиксированных параметрах цепочки, возникает следующий важный вопрос. Как изменится время спонтанного перемагничивания атомной цепочки, если ее параметры отличаются от вычисленных в работе [20]? Для того чтобы ответить на этот вопрос, необходимо получить аналитические выражения для энергетических барьеров для перемагничивания атомных цепочек, которые, с одной стороны, согласовывались бы с результатами вычисления геодезическим методом упругой ленты, а с другой стороны, были бы достаточно просты для теоретического анализа. В настоящей статье мы покажем, что получить требуемые аналитические формулы можно в рамках непрерывной XY-модели [11, 19], а также ответим на поставленный вопрос о зависимости времени спонтанного перемагничивания атомной цепочки от ее параметров.

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Следуя работам [10, 20, 22], будем считать, что взаимодействие магнитных моментов атомов Co на поверхности платины может быть описано гамильтонианом:

$$H = -J \sum_i \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+1} - \mathbf{D} \sum_i [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_i] + \sum_i \left[ -K (s_{i,y})^2 + E \left( (s_{i,z})^2 - (s_{i,x})^2 \right) \right], \quad (1)$$

где  $\mathbf{s}_i$  – единичный вектор, направленный вдоль магнитного момента атома Co;  $J$  – обменный интеграл для соседних атомов кобальта;  $\mathbf{D}$  – вектор Дзялошинского, лежащий в плоскости, перпендикулярной цепочке атомов;  $K$  и  $E$  – константы

магнитной анизотропии. В формуле (1) первое слагаемое представляет собой классический предел гамильтониана Гейзенберга, второе слагаемое – взаимодействие Дзялошинского–Мория, третье слагаемое – энергия кристаллической магнитной анизотропии.

Кратко обсудим пределы применимости теории, описываемой гамильтонианом (1). Во-первых, при записи гамильтониана Гейзенберга мы заменили операторы спина на классические векторы  $\mathbf{s}_i$ . Таким образом, мы не учитываем квантовые эффекты, которые могут возникнуть в цепочке атомов. Одним из таких эффектов является туннельный эффект при перемагничивании цепочки, который можно учесть в квазиклассическом приближении [24]. Численные оценки показывают, что учет этого эффекта для атомных цепочек на поверхности металла имеет смысл лишь при температурах ниже 1 К [25]. Во-вторых, будем считать, что цепочка из атомов Co находится в ферромагнитном состоянии, т.е. ее температура ниже критической. Оценка критической температуры для цепочек Co/Pt(664) в рамках приближения среднего поля дает величину около 250 К [22]. Таким образом, рассматриваемая модель справедлива в широком интервале температур от 1 до 250 К. Кроме того, в гамильтониане (1) мы пренебрегаем обменным взаимодействием между атомами, находящимися на расстоянии вторых ближайших соседей, диполь-дипольным взаимодействием, а также возможным изменением параметров  $J$ ,  $K$ ,  $E$ ,  $\mathbf{D}$  на концах цепочки. Эти эффекты учитывали ранее в ряде работ [26–28]. Учет этих эффектов существенно усложнил бы теоретический анализ рассматриваемой модели.

Численные расчеты [22], выполненные в рамках геодезического метода упругой ленты, показывают, что с высокой степенью точности можно считать, что при перемагничивании магнитные моменты всех атомов Co вращаются в одной плоскости. Этот факт позволяет существенно упростить задачу и рассмотреть ее в рамках XY-модели. Будем считать, что ось  $X$  направлена вдоль атомной цепочки. Когда бесконечно длинная цепочка находится в основном состоянии, ее магнитные моменты направлены вдоль оси  $Y$ . Тогда вектор  $\mathbf{s}_i$  будет иметь координаты  $s_{i,x} = \sin\theta_i$ ,  $s_{i,y} = \cos\theta_i$ ,  $s_{i,z} = 0$ . Магнитная энергия цепочки атомов может быть записана в виде

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

где  $\tilde{K} = K - E$  и  $D_z = D \sin \alpha$ , угол  $\alpha$  отсчитан от оси  $Y$ . Согласно работе [20], параметры гамильтониана (1) равны:  $J = 61.8$  мэВ,  $K = 1.31$  мэВ,  $E = 0.34$  мэВ,  $D = 1.92$  мэВ,  $\alpha = 131^\circ$ , откуда  $\tilde{K} = 0.97$  мэВ и  $D_z = 1.45$  мэВ.

Сначала рассмотрим бесконечно длинную цепочку атомов. При заданных параметрах гамильтониана основным состоянием такой цепочки является коллинеарное состояние, когда все магнитные моменты направлены вдоль оси  $Y$  (все  $\theta_i$  равны 0 или  $\pi$ ). Однако у цепочки могут быть неколлинеарные возбужденные состояния – доменные стенки. Если ширина доменной стенки существенно превышает межатомное расстояние, то можно заменить дискретное выражение (2) непрерывным функционалом энергии [19]:

$$E[\theta] = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{Ja^2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} \right)^2 + D_z a \left( \frac{d\theta}{dx} \right) + \tilde{K} \sin^2 \theta \right] dx, \quad (3)$$

где  $a$  – расстояние между соседними атомами Со. Варьируя этот функционал по углу  $\theta$ , получим дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2 \theta}{dx^2} - \frac{2\tilde{K}}{Ja^2} \sin \theta \cos \theta = 0. \quad (4)$$

Обратим внимание, что уравнение (4) не зависит от параметра  $D_z$ , его решением являются обычные доменные стенки в ферромагнетике [11]. Если  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $\theta = \pi$  при  $x \rightarrow \infty$ , то получаем решение в виде доменной стенки:

$$\theta_{\text{дс}}(x) = \arccos \left( -\text{th} \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x}{a} \right) \right). \quad (5)$$

Подставляя (5) в (3), находим энергию доменной стенки в середине цепочки атомов [19]:

$$E_{\text{дс}}^{\text{середина}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 + \pi A), \quad (6)$$

где  $A = D_z / \sqrt{2J\tilde{K}}$ . Отметим, что для системы Со/Pt(664) параметр  $A \approx 0.13$ , поэтому можно считать его малым по сравнению с единицей. Если  $\theta = \pi$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $\theta = 0$  при  $x \rightarrow \infty$ , то получаем решение, которое мы будем называть далее антидоменной стенкой:

$$\theta_{\text{алс}}(x) = \arccos \left( \text{th} \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x}{a} \right) \right). \quad (7)$$

Подставляя (7) в (3), находим энергию антидоменной стенки в середине цепочки атомов [19]:

$$E_{\text{алс}}^{\text{середина}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 - \pi A). \quad (8)$$

Сделаем несколько замечаний по поводу полученных решений. Во-первых, из (5) и (7) видно, что величина  $|\xi_x| = |\sin \theta(x)|$  экспоненциально убывает при  $x \rightarrow \pm \infty$ , поэтому под шириной доменной стенки (измеренной в межатомных расстояниях  $a$ ) обычно понимают величину  $N_{\text{дс}} = \sqrt{2J/\tilde{K}}$ . Для цепочки Со/Pt(664) эта величина равна 11.3. Во-вторых, решения (5) и (7), описывающие доменную и антидоменную стенки в точке  $x = 0$ , могут быть сдвинуты в произвольную точку  $x_0$  заменой  $x$  на  $x - x_0$ . В этом случае энергии (6) и (8), очевидно, не изменятся. Поэтому понятие середины для бесконечно длинной цепочки весьма условно. Однако оно приобретает смысл при рассмотрении цепочки конечной, но достаточно большой длины  $N \gg N_{\text{дс}}$  (например, из 100 атомов).

Далее рассмотрим полубесконечную цепочку атомов, заканчивающуюся в точке  $x = 0$ . В рамках непрерывной ХУ-модели ее энергия равна:

$$E[\theta] = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{Ja^2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} \right)^2 + D_z a \left( \frac{d\theta}{dx} \right) + \tilde{K} \sin^2 \theta \right] dx. \quad (9)$$

Функционал (9) отличается от (3) лишь верхним пределом интегрирования, поэтому, варьируя его, снова получаем уравнение (4), решения которого нам известны. Рассмотрим решение в виде антидоменной стенки, расположенной в точке  $x_0$ :

$$\theta_{\text{алс}}(x) = \arccos \left( \text{th} \left( \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{J}} \frac{x - x_0}{a} \right) \right). \quad (10)$$

При этом,  $\theta_{\text{алс}}(x = 0) = \theta_0 \in (0, \pi)$ . Подставляя (10) в функционал (9), получим энергию антидоменной стенки как функцию от угла  $\theta_0$ :

$$E_{\text{алс}}(\theta_0) = \sqrt{2J\tilde{K}} (1 - \cos \theta_0 - A \theta_0). \quad (11)$$

Найдем экстремумы этой функции. Дифференцируя (11) по  $\theta_0$  и приравнявая производную к нулю, получим простейшее тригонометрическое уравнение  $\sin \theta_0 = A$ . Будем считать, что  $A \ll 1$ , что соответствует рассматриваемой системе. Тогда решение  $\theta_0 \approx A$  будет соответствовать минимуму энергии:

$$E_{\text{св. конец}} = -\frac{A^2}{2} \sqrt{2J\tilde{K}} = -\frac{D_z^2}{\sqrt{8J\tilde{K}}}. \quad (12)$$

Выражение (12) – это ни что иное, как уменьшение энергии цепочки за счет отклонения магнитных моментов крайних атомов цепочки от направления  $\theta = 0$ . Это отклонение связано с взаимодействием Дзялошинского–Мория, а

изменение энергии (12) является величиной второго порядка малости по параметру  $A$ . Решение  $\theta_0 \approx \pi - A$  соответствует максимуму функции (11):

$$E_{\text{алс}}^{\text{конец}} = \sqrt{2J\tilde{K}} \left( 2 - \pi A + \frac{A^2}{2} \right). \quad (13)$$

Выражение (13) – это энергия антидоменной стенки на конце цепочки. Видно, эта энергия превышает энергию (8) антидоменной стенки в середине цепочки.

Если вместо (10) искать решение уравнения (4) в виде доменной стенки, то, действуя аналогично, легко прийти к уравнению  $\sin\theta_0 = -A$ , которое не имеет решений при  $\theta_0 \in (0, \pi)$ . Таким образом, мы приходим к тому, что доменная стенка не может находиться на краю цепочки.

Наконец, рассмотрим атомную цепочку конечной длины, она имеет два конца. Будем считать, что длина цепочки много больше ширины доменной стенки ( $N \gg N_{\text{дс}}$ ), тогда легко сконструировать все необходимые нам энергетические характеристики из выражений (6), (8), (12) и (13). Будем отсчитывать магнитную энергию цепочки от энергии коллинеарного состояния. Тогда энергия основного состояния будет равна:

$$E_{\text{осн}} = 2E_{\text{св. конец}} = -A^2 \sqrt{2J\tilde{K}}. \quad (14)$$

Этой энергии соответствует два состояния, в которых магнитные моменты в середине цепочки атомов сонаправлены или противоположены с осью  $Y$ , а магнитные моменты на краях “подкручены” в плоскости  $XU$  против часовой стрелки. Для перемагничивания цепочки атомов на одном из концов цепочки должна образоваться доменная или антидоменная стенка и пройти через всю цепочку к другому ее концу. Если перемагничивание происходит путем формирования доменной стенки, то максимальная энергия цепочки соответствует положению доменной стенки посередине цепочки:

$$E_{\text{дс}}^{\text{седл. точка}} = E_{\text{дс}}^{\text{середина}} + 2E_{\text{св. конец}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 + \pi A - A^2). \quad (15)$$

Если перемагничивание происходит путем формирования антидоменной стенки, то максимальная энергия цепочки соответствует положению антидоменной стенки на краю цепочки:

$$E_{\text{алс}}^{\text{седл. точка}} = E_{\text{алс}}^{\text{конец}} + E_{\text{св. конец}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 - \pi A). \quad (16)$$

Положение антидоменной стенки посередине цепочки соответствует локальному минимуму магнитной энергии цепочки атомов:

$$E_{\text{лок. мин}} = E_{\text{алс}}^{\text{середина}} + 2E_{\text{св. конец}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 - \pi A - A^2). \quad (17)$$

Используя выражения (14)–(17), легко найти энергетические барьеры для перемагничивания атомной цепочки. Барьер для перемагничивания путем формирования антидоменной стенки равен:

$$\Delta E_1 = E_{\text{алс}}^{\text{седл. точка}} - E_{\text{осн}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 - \pi A + A^2); \quad (18)$$

барьер для перемагничивания путем формирования доменной стенки равен:

$$\Delta E_2 = E_{\text{дс}}^{\text{седл. точка}} - E_{\text{осн}} = \sqrt{2J\tilde{K}} (2 + \pi A). \quad (19)$$

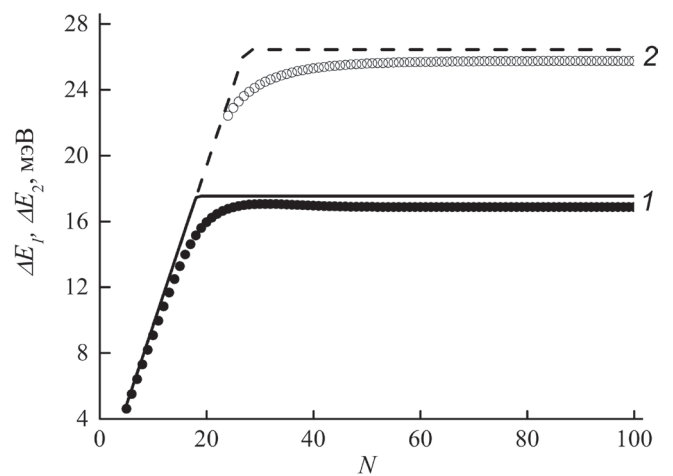
Кроме того, можно вычислить барьер для распада метастабильного состояния цепочки с антидоменной стенкой посередине:

$$\Delta E'_1 = E_{\text{алс}}^{\text{седл. точка}} - E_{\text{лок. мин}} = A^2 \sqrt{2J\tilde{K}}. \quad (20)$$

Учитывая, что  $A \ll 1$ , получим  $\Delta E'_1 \ll \Delta E_1, \Delta E_2$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Используя параметры модели из работы [20], легко вычислить энергетические барьеры для перемагничивания цепочки из атомов  $\text{Co}$  на поверхности  $\text{Pt}(664)$ . С помощью выражений (18)–(20) получаем  $\Delta E_1 = 17.54$  мэВ,  $\Delta E_2 = 26.45$  мэВ и  $\Delta E'_1 = 0.19$  мэВ. Сравним эти величины с численными значениями энергетических барьеров, вычисленными в работе [22] геодезическим методом упругой ленты и представленными графически на рис. 1. Для цепочки из  $N = 100$  атомов численные



**Рис. 1.** Энергетические барьеры  $\Delta E_1$  (1) и  $\Delta E_2$  (2) для перемагничивания цепочки из  $N$  атомов  $\text{Co}$  на поверхности  $\text{Pt}(664)$ . Точками показаны значения, найденные численно геодезическим методом упругой ленты [22], линиями – теоретические значения, полученные в рамках  $XU$ -модели.

расчеты дают  $\Delta\tilde{E}_1 = 16.87$  мэВ,  $\Delta\tilde{E}_2 = 25.75$  мэВ и  $\Delta\tilde{E}'_1 = 0.19$  мэВ. Видно, что полученные в рамках непрерывной ХУ-модели значения энергетических барьеров близки к их асимптотическим значениям, полученным численно геодезическим методом упругой ленты. Здесь необходимо отметить, что значения  $\Delta\tilde{E}_1$ ,  $\Delta\tilde{E}_2$  и  $\Delta\tilde{E}'_1$  вычисляли в работе [22] с учетом диполь-дипольного взаимодействия магнитных моментов, которым мы полностью пренебрегли при выводе выражений (18)–(20). Следует отметить, что совпадение величин  $\Delta\tilde{E}_1$  и  $\Delta\tilde{E}'_1$  с точностью до  $10^{-3}$  мэВ является случайным.

Как видно из рис. 1, при длине цепочки больше сорока атомов энергетические барьеры слабо зависят от  $N$  и могут быть приближенно вычислены по формулам (18)–(20). Однако для коротких цепочек, длина которых порядка ширины доменной стенки, появляется сильная зависимость от их длины. Для совсем коротких цепочек ( $N < N_{\text{дс}}$ ) эту зависимость легко найти из следующих простых соображений. Будем считать, что при перемагничивании цепочки все углы  $\theta_i$  одинаковы, тогда максимум магнитной энергии (2) будет соответствовать конфигурации, когда все магнитные моменты направлены по оси  $X$  ( $\theta_i = \pi/2$ ). Энергия такой конфигурации равна  $\tilde{K}N$ . Эта величина и должна быть взята в качестве оценки энергетических барьеров  $\Delta E_1$  и  $\Delta E_2$ . На рис. 1 сплошной линией изображена функция

$$\Delta E_1(N) = \min\left(\tilde{K}N, \sqrt{2J\tilde{K}}(2 - \pi A + A^2)\right), \quad (21)$$

а пунктирной линией – функция

$$\Delta E_2(N) = \min\left(\tilde{K}N, \sqrt{2J\tilde{K}}(2 + \pi A)\right). \quad (22)$$

Видно, что функции (21) и (22) подходят для аппроксимации численных значений энергетических барьеров как в области длинных, так и в области коротких атомных цепочек. Подчеркнем, что основным достоинством выражений (21) и (22) является их чрезвычайная простота, позволяющая легко анализировать зависимость энергетических барьеров от параметров гамильтониана (1).

В качестве примера рассмотрим, как от параметров гамильтониана (1) зависит среднее время спонтанного перемагничивания атомной цепочки. Прежде всего, заметим, что наличие метастабильного состояния атомной цепочки с антидоменной стенкой посередине может повлиять на время перемагничивания только при условии  $\Delta E'_1 \leq kT$ , где  $k$  – постоянная Больцмана. Для параметров гамильтониана (1), взятых из

работы [20], получим  $\Delta E'_1/k \approx 2.2$  К. Далее для определенности мы рассмотрим атомную цепочку Со/Pt(664) при температуре 50 К. В этом случае наличием метастабильного состояния можно пренебречь, и время спонтанного перемагничивания вычисляется следующим образом [22]:

$$\tau = \nu_0^{-1} \left[ \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (23)$$

где  $\nu_0 = 10^9$  Гц – частотный префактор для переворота магнитных моментов [6].

На рис. 2 показаны зависимости времени  $\tau$  спонтанного перемагничивания цепочек, состоящих из 10 (штриховые линии) и 100 (сплошные линии) атомов Со, от параметров  $J$ ,  $K$ ,  $E$  и  $D_z$ . На каждом из четырех графиков изменяется один из параметров, остальные зафиксированы на значениях, взятых из работы [20]. Интервалы изменения параметров  $J$ ,  $K$ ,  $E$  и  $D_z$  подобраны так, чтобы рассмотренная нами непрерывная ХУ-модель оставалась применимой. Для сравнения точками показаны времена  $\tau$ , вычисленные с использованием энергетических барьеров, полученных геодезическим методом упругой ленты в работе [22]. Сразу обратим внимание на то, что аналитические результаты, полученные с помощью простых формул (21) и (22), хорошо согласуются с результатами численного моделирования. Теперь обсудим каждый из четырех графиков подробнее.

На рис. 2а представлена зависимость времени спонтанного перемагничивания от величины обменного интеграла  $J$ . В рамках нашей простой модели энергетические барьеры  $\Delta E_1$  и  $\Delta E_2$  для цепочки из 10 атомов равны  $\tilde{K}N$ , т.е. не зависят от параметра  $J$ . Соответственно, не зависит от  $J$  и время спонтанного перемагничивания,  $\tau = 4.47 \times 10^{-9}$  с. Для цепочки из 100 атомов время спонтанного перемагничивания монотонно возрастает от значения  $1.13 \times 10^{-8}$  с при  $J = 30$  мэВ до  $2.05 \times 10^{-7}$  с при  $J = 100$  мэВ.

На рис. 2б, 2в представлены зависимости времени спонтанного перемагничивания от констант магнитной анизотропии  $K$  и  $E$ . В нашей модели энергетические барьеры зависят только от разности  $(K - E)$ . Как для коротких, так и для длинных цепочек эта зависимость монотонная. В соответствии с этим, время спонтанного перемагничивания монотонно возрастает с увеличением  $K$  (рис. 2б) и монотонно убывает с увеличением  $E$  (рис. 2в). Величина  $\tau$  меняется в достаточно широком интервале значений: на порядок при изме-

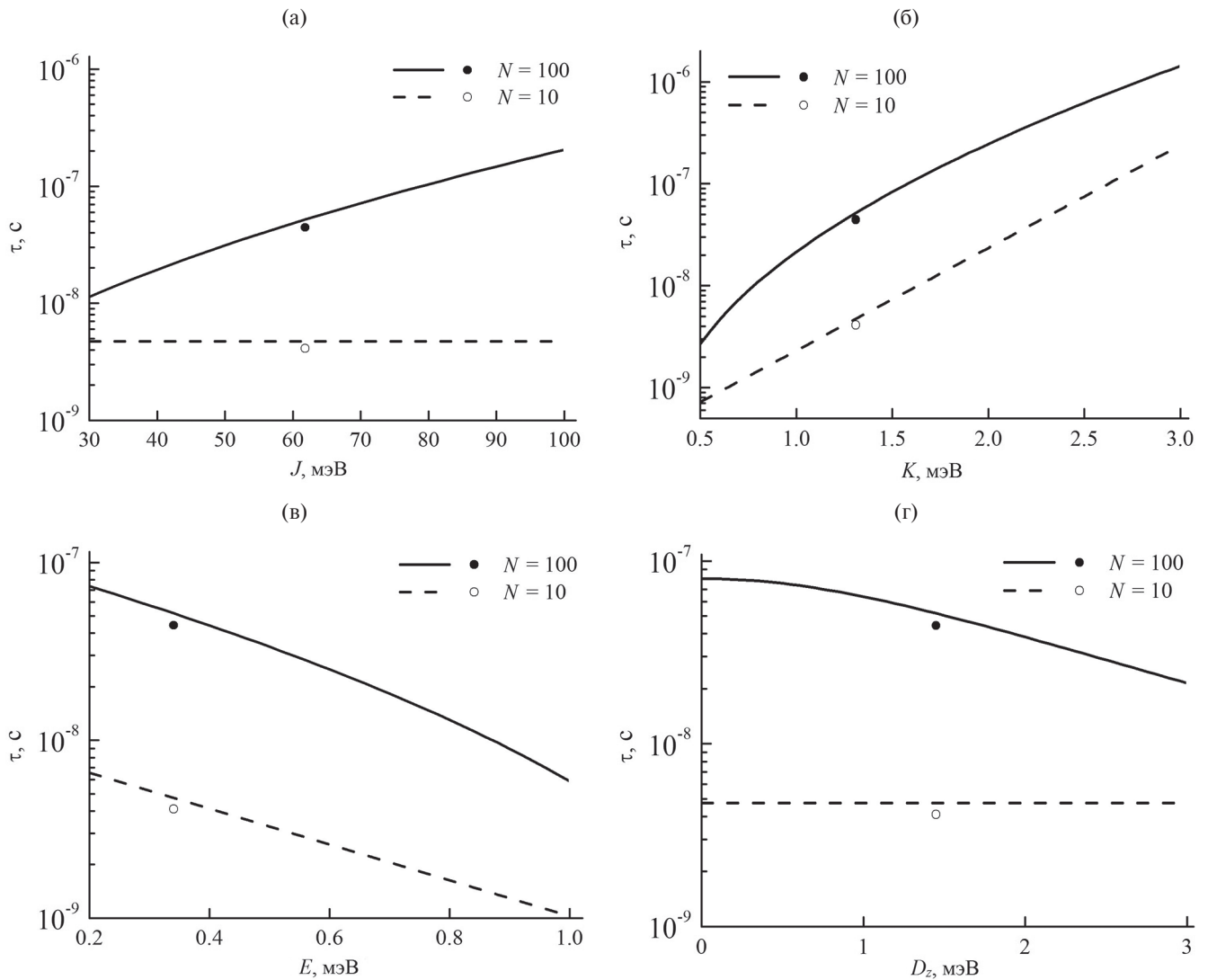


Рис. 2. Зависимость времени  $\tau$  спонтанного перемагничивания атомной цепочки Co/Pt(664) от обменного интеграла  $J$  (а), констант магнитной анизотропии  $K$  (б) и  $E$  (в), проекции вектора Дзялошинского  $D_z$  (г). Линиями изображены теоретические зависимости, полученные в рамках ХУ-модели для цепочек из 10 и 100 атомов. Точками показаны значения, вычисленные с использованием энергетических барьеров, полученных геодезическим методом упругой ленты [22].

нении параметра  $E$  от 0.2 до 1.0 мэВ и на два порядка при изменении параметра  $K$  от 0.5 до 3.0 мэВ.

На рис. 2г показана зависимость времени  $\tau$  спонтанного перемагничивания атомной цепочки от параметра  $D_z$ . Видно, что для цепочки из 10 атомов  $\tau$  не зависит от  $D_z$ , поскольку, как уже было отмечено выше, в нашей модели  $\tau$  для коротких цепочек зависит только от разности  $(K - E)$ . В то же время, величина  $\tau$  для цепочки из 100 атомов монотонно уменьшается при увеличении параметра  $D_z$  от значения  $8.03 \times 10^{-8}$  с при  $D_z = 0$  до значения  $2.13 \times 10^{-8}$  с при  $D_z = 3$  мэВ. Несмотря на то, что зависимость  $\tau$  от проекции вектора Дзялошинского  $D_z$  слабее, чем от других

параметров модели, она все же весьма существенна, и была бы еще более существенной при более низкой температуре.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках непрерывной ХУ-модели получены простые аналитические выражения (21) и (22), позволяющие вычислять время спонтанного перемагничивания атомных цепочек конечной длины (23). Показано, что выражения (21) и (22) дают хорошее согласие с результатами численного моделирования в пределе коротких ( $N \ll N_{dc}$ ) и длинных ( $N \ll N_{dc}$ ) атомных цепочек. Существенное отличие в величинах энергетических барьеров наблюдается только при длине цепочки

сопоставимой с шириной доменной стенки ( $N \sim N_{dc}$ ). Однако даже в этом случае формулы (21) и (22) можно использовать для получения ограничения сверху значений энергетических барьеров для перемагничивания атомных цепочек.

Предложенная нами модель имеет широкую область применения как по температуре, так и по значениям параметров  $J$ ,  $K$ ,  $E$  и  $D_z$  гамма-тонииана (1). Это означает, что предложенные аналитические выражения (21) и (22) могут быть использованы не только для системы Co/Pt(664), но и для других похожих систем. Поскольку время спонтанного перемагничивания атомных цепочек может быть определено экспериментально, то его сравнение с результатом вычислений по формулам (21)–(23) может быть использовано для экспериментального определения параметров  $J$ ,  $K$ ,  $E$  и  $D_z$ . Таким образом, полученные нами результаты могут быть полезны в дальнейшем как теоретикам, так и экспериментаторам.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

С.В. Колесников выражает благодарность Российский научный фонд за финансовую поддержку (грант № 21-72-20034). Е.С. Сапронова является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Zutic I., Fabian J., Das Sarma S.* // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76 P. 323. <https://www.doi.org/10.1103/RevModPhys.76.323>
2. *Mermin N.D.* Quantum Computer Science: An Introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
3. *Bose S.* // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 207901. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.207901>
4. *Bose S.* // Contemporary Phys. 2007. V. 48. P. 13. <https://www.doi.org/10.1080/00107510701342313>
5. *Verma H., Chotorlishvili L., Berakdar J., Mishra S.K.* // Europhys. Lett. 2017. V. 119. P. 30001. <https://www.doi.org/10.1209/0295-5075/119/30001>
6. *Gambardella P., Dallmeyer A., Maiti K., Malagoli M.C., Eberhardt W., Kern K., Carbone C.* // Nature. 2002. V. 416. P. 301. <https://www.doi.org/10.1038/416301a>
7. *Gambardella P., Rusponi S., Veronese M., Dhesi S.S., Grazioli C., Dallmeyer A., Cabria I., Zeller R., Dedering P.H., Kern K., Carbone C., Brune H.* // Science. 2003. V. 300. P. 1130. <https://www.doi.org/10.1126/science.1082857>
8. *Dzyaloshinsky I.* // J. Phys. Chem. Solids. 1958. V. 4. P. 241. [https://www.doi.org/10.1016/0022-3697\(58\)90076-3](https://www.doi.org/10.1016/0022-3697(58)90076-3)
9. *Moriya T.* // Phys. Rev. Lett. 1960. V. 4. P. 228. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.4.228>
10. *Choi D.J., Lorente N., Wiebe J., von Bergmann K., Otte A.F., Heinrich A.J.* // Rev. Mod. Phys. 2019. V. 91. P. 041001. <https://www.doi.org/10.1103/RevModPhys.91.041001>
11. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2005. 656 с.
12. *Nembach H.T., Shaw J.M., Weiler M., Jue E., Silva T.J.* // Nature Phys. 2015. V. 11. P. 825. <https://www.doi.org/10.1038/nphys3418>
13. *Cho J., Kim N.-H., Lee S., Kim J.-S., Lavrijsen R., Solignac A., Yin Y., Han D.-S., van Hoof N.J.J., Swagten H.J.M., Koopmans B., You C.-Y.* // Nature Comm. 2015. V. 6. P. 7635. <https://www.doi.org/10.1038/ncomms8635>
14. *Fert A., Reyren N, Cros V.* // Nat. Rev. Mater. 2017. V. 2. P. 17031. <https://www.doi.org/10.1038/natrevmats.2017.31>
15. *Soumyanarayanan A., Reyren N., Fert A., Panagopoulos C.* // Nature. 2016. V. 539. P. 509. <https://www.doi.org/10.1038/nature19820>
16. *Garst M., Waizner J., Grundler D.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. P. 293002. <https://www.doi.org/10.1088/1361-6463/aa7573>
17. *Mazzarello R., Tosatti E.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 134402. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.134402>
18. *Menzel M., Mokrousov Y., Wieser R., Bickel J.E., Kudmedenko E., Blügel S., Heinze S., von Bergmann K., Kubetzka A., Wiesendanger R.* // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. P. 197204.
19. *Heide M., Bihlmayer G., Blügel S.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 140403. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.140403>
20. *Schwefflinghaus B., Zimmermann B., Heide M., Bihlmayer G., Blügel S.* // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 024403. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.024403>
21. *Chotorlishvili L., Wang X., Dyrdal A., Guo G., Dugaev V.K., Barnás J., Berakdar J.* // Phys. Rev. B. 2022. V. 106. P. 014417. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.106.014417>
22. *Kolesnikov S.V., Sapronova E.S.* // IEEE Magn. Lett. 2022. V. 13. P. 2505905. <https://www.doi.org/10.1109/LMAG.2022.3226656>
23. *Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jonsson H.* // Computer Phys. Comm. 2015. V. 196. P. 335. <https://www.doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.001>
24. *Chudnovsky E.M., Gunther L.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 661. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.661>
25. *Smirnov A.S., Negulyaev N.N., Hergert W., Saletsky A.M., Stepanyuk V.S.* // New J. Phys. 2009. V. 11. P. 063004. <https://www.doi.org/10.1088/1367-2630/11/6/063004>
26. *Popov A.P., Rettori A., Pini M.G.* // Phys. Rev. B 90, 134418 <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.134418>
27. *Колесников С.В., Сапронова Е.С.* // ЖЭТФ. 2022. Т. 162. Вып. 5. С. 708.
28. *Колесников С.В., Колесникова И.Н.* // ЖЭТФ. 2017. Т. 152. Вып. 4. С. 759.

## Energy Barriers for the Spontaneous Magnetization Reversal of the Atomic Co Chains on Pt (664) Surface in the Model with Dzyaloshinskii–Moriya Interaction

S. V. Kolesnikov<sup>\*</sup>,<sup>1</sup>, E. S. Sapronova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, 119899 Russia*

<sup>\*</sup>*e-mail:kolesnikov\_s\_v\_@mail.ru*

The analytical approach has been developed in the framework of the continuous  $XY$ -model. This approach allows calculating the spontaneous magnetization reversal time of finite-length atomic chains on the metallic surface. The interaction of the magnetic moments of atoms is described by the classical Hamiltonian, which includes the Heisenberg exchange interaction, the Dzyaloshinskii–Moriya interaction, and the magnetic anisotropy energy. Using the Co/Pt(664) system as an example, it has been shown that the proposed method is in a good agreement with the results of the numerical simulation in the limit of short and long atomic chains. And for atomic chains of intermediate length, it can be used to estimate an upper bound on the spontaneous magnetization reversal time. We obtained the dependences of the spontaneous magnetization reversal time of finite-length Co chains the value of the exchange integral, parameters of the magnetic anisotropy, and also on the value of the projection of the Dzyaloshinskii vector onto the axis perpendicular to the plane containing the magnetic moments of the atoms. It is shown that the proposed method has a wide range of applicability both in terms of temperature and the values of the physical parameters characterizing the magnetic properties of the atomic

**Keywords:** one-dimensional ferromagnetism, atomic chains, spontaneous magnetization reversal, Dzyaloshinskii–Moriya interaction, continuous  $XY$ -model.