

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

**«ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА  
ВРЕМЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК»**

Выполнила студентка 4 курса группы 405

Сапронова Екатерина Сергеевна

---

подпись студента

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук

Колесников Сергей Владимирович

---

подпись научного руководителя

Допущена к защите

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

подпись зав. кафедрой

МОСКВА

2022

# **СОДЕРЖАНИЕ**

<b>Введение.....</b>	<b>3</b>
<b>Теоретическая модель.....</b>	<b>4</b>
<b>Результаты.....</b>	<b>9</b>
<b>Заключение.....</b>	<b>24</b>
<b>Литература.....</b>	<b>25</b>

## Введение

После наблюдения гигантской энергии магнитной анизотропии атомов Со на поверхности Pt(997) [1], [2] атомные цепочки стали очень привлекательными для экспериментальных и теоретических исследований [3]. Изучение атомных цепочек и их магнитных свойств играет важную роль в развитии самых различных областей современной техники. Также интерес связан с их возможным использованием в качестве элементов хранения информации. Для этого могут быть использованы как ферромагнитные, так и антиферромагнитные цепочки на различных поверхностях.

Теоретические подходы, используемые для исследования магнитных свойств атомных цепочек, можно разделить на три основные группы: 1) квантово-механические расчеты [4], [5], 2) решение уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта и 3) моделирование кинетическим методом Монте-Карло (КММК) [6]. На сегодняшний день существуют как коллинеарный КММК, так и его усовершенствованная модель, которая позволяет учитывать неколлинеарность магнитных моментов при перемагничивании цепочек. Кроме того, было показано [7], что в некоторых случаях результаты, полученные с помощью этих методов, могут значительно отличаться.

Недавно был предложен новый аналитический подход, основанный на приближении диффузии одной доменной стенки, для оценки магнитных свойств одноатомных и двухатомных цепочек [8]. Доказано, что этот метод дает результаты, хорошо согласующиеся с результатами моделирования кинетическим методом Монте-Карло в широком диапазоне температур и параметров гамильтониана.

## Теоретическая модель

В данной работе ферромагнитные и антиферромагнитные атомные цепочки описываются с помощью модели Гейзенберга, а векторы магнитных моментов атомов считаются классическими векторами. Используется классический гамильтониан с одноосной магнитной анизотропией. В случае наличия внешнего магнитного поля без учёта диполь-дипольного взаимодействия гамильтониан предложенной модели имеет вид:

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} (s_i \cdot s_j) - K \sum_i (s_i \cdot e)^2 - \mu \sum_i (s_i \cdot B), \quad (1)$$

где  $s_i$  и  $e$  – единичные векторы магнитных моментов атомов и оси лёгкого намагничивания, соответственно,  $K$  – энергия магнитной анизотропии (ЭМА),  $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$  – обменный интеграл. Для ферромагнитной цепочки  $J > 0$ , для антиферромагнитной цепочки  $J < 0$ .

Рассмотрим спонтанное и индуцированное перемещение ферромагнитных и антиферромагнитных одноатомных и двухатомных цепочек конечной длины [9] в рамках неколлинеарной модели. Перемещение рассматривается, как движение доменной стенки от одного края цепочки к другому. В данном случае доменной стенкой является граница между двумя атомами, магнитные моменты которых противоположно направлены (в случае ферромагнитной цепочки).

Если внешнее магнитное поле равно нулю, то случайное блуждание доменной стенки характеризуется тремя частотами: 1) частотой образования доменной стенки, 2) частотой исчезновения доменной стенки и 3) частотой перескоков доменной стенки вдоль цепочки атомов [9]-[11]:

$$v_i = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2)$$

где  $\Delta E_i$  – энергетические барьеры между двумя состояниями атомной цепочки,  $T$  – температура системы,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\nu_0=10^9$  – частотный префактор.

Без учёта влияния диполь-дипольного взаимодействия в предельном случае  $K \gg |J|$  барьеры  $\Delta E_i$  равны:

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

где  $h_i = J(\mathbf{s}_i \cdot (\mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{s}_{i-1}))$ .

Таким образом, для расчетов без учета диполь-дипольного взаимодействия в предельном случае  $K \gg |J|$  частоты  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  равны:

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K + |J|)^2}{4Kk_B T}\right), \\ \nu_2 &= \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K - |J|)^2}{4Kk_B T}\right), \\ \nu_3 &= \nu_0 \exp\left(-\frac{K}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Обратим внимание на то, что частоты  $\nu_{1,2,3}$  для случаев ферромагнитной и антиферромагнитной цепочки одинаковы.

Перемагничивание антиферромагнитных цепочек может происходить из-за образования доменной стенки при высоких напряжениях между поверхностью и остриём иглы сканирующего туннельного микроскопа. Таким образом, можно предположить, что магнитный момент атома, находящегося под остриём иглы микроскопа, переворачивается и не может вернуться в исходное состояние.

Если внешнее магнитное поле  $\mathbf{B}$  является функцией времени, то частоты перемагничивания также являются функциями времени. В данном случае с помощью численного решения задачи Коши могут быть построены кривые намагничивания атомных цепочек [8,10].

Время перемагничивания атомной цепочки можно рассчитать, как среднее время случайного блуждания доменной стенки [8]:

$$\tau_{\text{сп}} = \frac{1}{2a} \left\{ \frac{a}{v_3} \left( \frac{N-1}{2} \right) \left[ N - \frac{2(1-2a)}{1-a} \right] + \frac{1}{v_1} [N(1-a) - 2(1-2a)] \right\}, \quad (6)$$

где  $a = v_3/(v_2 + v_3)$ ,  $N$  – число атомов в цепочке. Данное выражение справедливо не только для длинных  $N \gg 1$ , но и для достаточно коротких  $N \sim 10$  цепочек. Расчёты по формуле (6) можно проводить в рамках как коллинеарной, так и неколлинеарной моделей. В случае неколлинеарной модели необходимо заменить число атомов в цепочке  $N$  на  $N_{\text{eff}} \leq N$ , где  $(N_{\text{eff}} - 1)$  – число метастабильных положений доменной стенки. При этом важно, что время блуждания доменной стенки вдоль цепочки должно быть много меньше, чем время образования доменной стенки. Равенство этих времён даёт условие для нахождения верхних пределов применимости формулы (6) для времени перемагничивания:

$$\frac{(v_1 + v_2 + v_3)(v_2 + v_3)}{v_1 v_2} = \left( \frac{N}{2} - 1 \right)^2 \quad (7)$$

С помощью выражения (7) можно определить максимальную температуру  $T_{\text{max}}$  для конкретно заданной длины цепочки и максимальное число атомов  $N_{\text{max}}$  в цепочке для заданной температуры. Температура  $T_{\text{max}}$  в данном случае будет ниже критической температуры, при которой система перейдёт в парамагнитное состояние [8].

В случае двухатомных цепочек расчеты значений времени перемагничивания являются более сложными и могут быть выполнены аналитически только в двух предельных случаях [10]: (1) слабая связь между атомными цепочками и (2) сильная связь между цепочками. Большинство реальных систем можно рассматривать в рамках одного из этих приближений [13].

Рассмотрим теперь влияние диполь-дипольного взаимодействия на расчеты в рамках данной модели. Для этого необходимо различать ферромагнитные (ФМ) и антиферромагнитные (АФМ) цепочки, для которых ось лёгкого намагничивания параллельна ( $\parallel$ ) или перпендикулярна ( $\perp$ ) цепочке. В этом случае в гамильтониане появляется дополнительное слагаемое:

$$H_{\text{дип}} = \frac{\mu\mu_0^2}{8\pi} \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{(3(\mathbf{s}_i \mathbf{R}_{ij})(\mathbf{s}_j \mathbf{R}_{ij}) - (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j) R_{ij}^2)}{R_{ij}^5}, \quad (8)$$

$\vec{R}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  – расстояние между атомами,  $\mu$ - магнитный момент, одинаковый для всех атомов в цепочке,  $\frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} \text{Гн/м}$ .

Направим ось  $z$  вдоль цепочки. Тогда (8) можно представить в виде:

$$H_{\text{дип}} = A \left( \frac{\mu}{\mu_B} \right)^2 \left( \frac{1\text{\AA}}{a} \right)^3 \sum_{i>j} \frac{s_x^i s_x^j + s_y^i s_y^j - 2s_z^i s_z^j}{(n_i - n_j)^3}, \quad (9)$$

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

Энергетические барьеры  $\Delta E_i, i = 1, 2, 3$  в рамках неколлинеарной модели вычисляются с помощью геодезического метода упругой ленты (GNEB) [12]. Метод GNEB представляет собой способ нахождения оптимальной траектории магнитной системы между двумя заданными состояниями. Траектория оптимизируется относительно ориентации векторов магнитных моментов в то время, как их модули и не меняются. Состояние магнитной системы, состоящей из  $N$  магнитных моментов, полностью определяется  $3N$  параметрами — координатами векторов магнитных моментов в трехмерном пространстве. Фиксация модулей магнитных моментов приводит к появлению  $N$  связей. В методе GNEB вместо  $3N$ -мерного евклидова пространства с  $N$  связями выбирается  $2N$ -мерное риманово многообразие  $R$ , соответствующее произведению  $N$  2-мерных сфер. В методе GNEB непрерывная траектория

между начальным и конечным состоянием заменяется на цепочку дискретных изображений системы. Соседние изображения соединяются фиктивными пружинками, чтобы обеспечить равное расстояние между изображениями.

В случае коллинеарной модели также можно учесть диполь-дипольное взаимодействие. В качестве примера рассмотрим образование доменной стенки на краю ферромагнитной цепочки, для которой ось легкого намагничивания параллельна оси  $z$ , направленной вдоль цепочки. Из (9) следует, что крайний атом цепочки находится во внешнем магнитном поле

$$B = e_z \frac{2\mu A}{a^3} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{n^3}, \quad (10)$$

где расстояние  $a$  измеряется в ангстремах, а магнитный момент  $\mu$  в магнетонах Бора.

Для длинных цепочек вместо  $N-1$  можно взять бесконечность. Следовательно,  $\sum_n \frac{1}{n^3} = \zeta(3) \approx 1.202$ . Тогда энергетический барьер можно вычислить по формуле (4) с  $h_1 = J + 2.404A\mu^2/a^3$ . Выражения для  $h_2, h_3$ , полученные для систем всех четырёх типов, представлены в таблице 1.

**Таблица 1.** Выражения для параметров  $h_1, h_2$ , используемых при вычислении энергетических барьеров для образования и исчезновения доменной стенки на краях цепочки.  $[\mu] = \mu_B, [a] = \text{Å}$ .

Тип цепочки	$h_1$	$h_2$
ФМ $\parallel$	$J + 2.404A\mu^2/a^3$	$-J - 2.404A\mu^2/a^3$
ФМ $\perp$	$J - 2.404A\mu^2/a^3$	$-J + 2.404A\mu^2/a^3$
АФМ $\parallel$	$ J  - 2.404A\mu^2/a^3$	$- J  + 2.404A\mu^2/a^3$
АФМ $\perp$	$ J  + 2.404A\mu^2/a^3$	$- J  - 2.404A\mu^2/a^3$

Если доменная стенка находится в середине цепочки, то для энергетического барьера для сдвига стенки вдоль цепочки параметр  $h_3$  будет равен нулю для каждого типа цепочки. Таким образом, по формуле (4)  $\Delta E_3 = K$ .

## Результаты

В данной работе были исследованы металлические цепочки на металлических поверхностях.

Для нахождения общих закономерностей используем аналитический подход в исследовании магнитных свойств следующих систем: цепочки Co на поверхности Pt(997), Cu(775), Ir(001), Rh(553) и Cu<sub>3</sub>N/Cu(110); цепочки Fe на Cu(775), Pt(775), Cu<sub>2</sub>N/Cu(001) и Cu<sub>3</sub>N/Cu(110); цепочки Mn на CuN/Cu(001) и Cu<sub>3</sub>N/Cu(110); Co-оксидные цепи на Ir(001) и Rh(553); оксид Fe и оксид Mn на поверхности Ir(001). Значения обменного интеграла и энергии магнитной анизотропии для этих цепочек были взяты из литературы [1]-[5], [14]-[23].

Среди данных систем есть как экспериментально созданные атомные цепочки, так и гипотетические цепочки, исследованные с помощью квантово-механических расчетов. Найденные в литературе параметры указаны в таблице 2.

**Таблица 2.** Значения обменных интегралов  $J$ , энергии магнитной анизотропии  $K$  и магнитных моментов  $\mu$  для рассматриваемых систем.

Система	$\mu, \mu_B$	$J, \text{мэВ}$	$K, \text{мэВ}$
Co/Pt(997)	2.4	$J=J=7.5$	2.0 (одноатомная) 0.34 (двухатомная)
Co/Cu(775)	1.66	72.5	2.33
Fe/Cu(775)	2.88	75	0.72
Fe/Pt(775)	3.02	39.4	0.82
Fe/Cu <sub>2</sub> N /Cu(100)	2.78	$J = -1.3$ $J' = -0.03$	2.1

CoO <sub>2</sub> / Ir(001)	1.96	4	0.3 – 3
FeO <sub>2</sub> / Ir(001)	3.55	-9	0.3 – 3
MnO <sub>2</sub> / Ir(001)	3.62	-0.4	0.3 – 3
Mn/CuN/ Cu(100)	2.1	-6.2	0.3 – 3
Co/Ir(001)	1,9 (конфигурация C1)	J=38.65 J'=192.8	0.3 – 3
	1,8 (конфигурация C3)	J=53.25 J'=11.5	0.3 – 3
	1,8 (конфигурация C4)	J=48 J'=6.2	0.3 – 3
Mn/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	3.78	1.2475	0.67
Fe/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	2.78	1.2525	1.21
Co/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	1.67	3.805	2.3
Co/Rh (553)	2.09 ( $\eta = 0.1$ ML)	2	0.8
	1.91 ( $\eta = 0.2$ ML)	-154.5	0.4
	1.48 ( $\eta = 0.4$ ML)	-20	1.1

Для удобства значения обменного интеграла  $J$  и энергии магнитной анизотропии  $K$  для ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек также представлены на диаграммах (рис. 1). Пустые точки соответствуют экспериментально созданным цепочкам, а закрашенные – гипотетическим цепочкам, предсказанным с помощью квантово-механических расчетов.

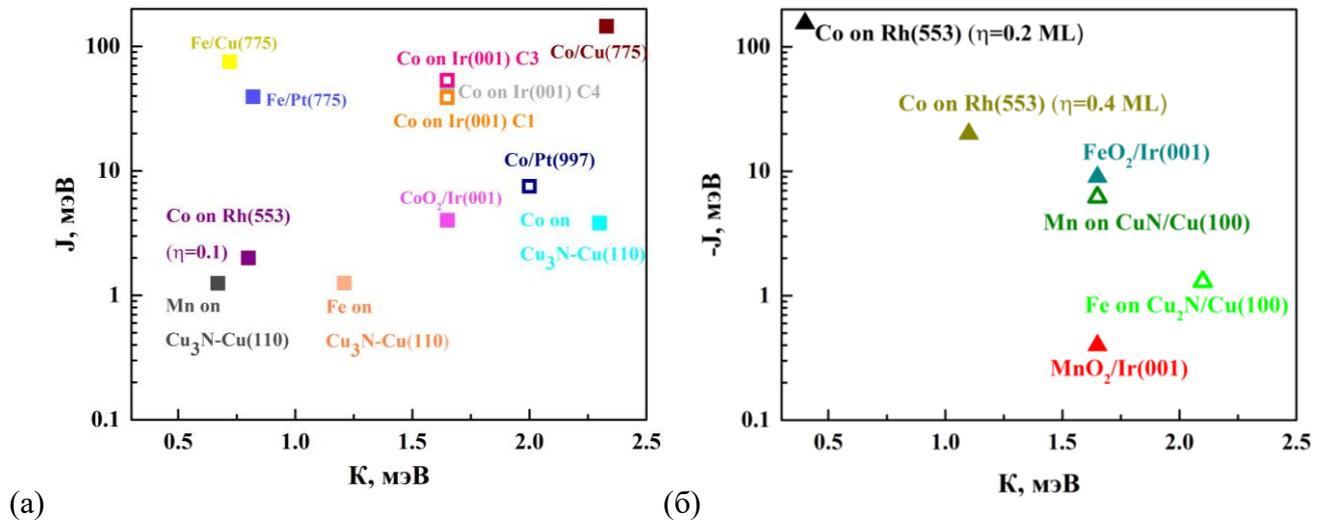


Рис.1 Параметры гамильтониана для ферромагнитных(а) и антиферромагнитных(б) цепочек атомов, где  $K$  — ЭМА,  $J$  — обменный интеграл. Пустые точки соответствуют экспериментально созданным цепочкам, а закрашенные — гипотетическим цепочкам, предсказанным с помощью квантово-механических расчетов.

Атомная цепочка может использоваться в качестве бита информации, если время ее перемагничивания  $\tau$  достаточно велико (например, равно 1 год) в отсутствие внешних полей. Если время спонтанного перемагничивания равно одному году, то соответствующая температура  $T_{\text{bit}}$  может быть вычислена в рамках приближения диффузии одной доменной стенки. Поскольку эта температура ниже критической, атомные цепочки являются ферромагнитными или антиферромагнитными при температуре  $T_{\text{bit}}$ . Можно рассчитать времена перемагничивания антиферромагнитных цепочек при взаимодействии с острием иглы сканирующего туннельного микроскопа и времена перемагничивания ферромагнитных цепочек во внешнем магнитном поле. В последнем случае значение внешнего магнитного поля выберем равным 5 Тл. На рис. 2 и 3 результаты расчетов представлены в виде  $\tau$ – $T_{\text{bit}}$  диаграмм. Данные результаты соответствуют одноатомным цепочкам, состоящим из  $N=10$  (рис.2) и  $N = 100$  (рис.3) атомов, или двухатомным цепочкам, состоящим из  $2N = 20$  или  $2N = 200$  атомов. Если энергия магнитной анизотропии неизвестна, то на диаграммах есть две точки, соответствующие значениям  $K = 0,3$  мэВ и  $K = 3,0$  мэВ. Результаты,

представленные на диаграммах, получены без учёта диполь-дипольного взаимодействия.

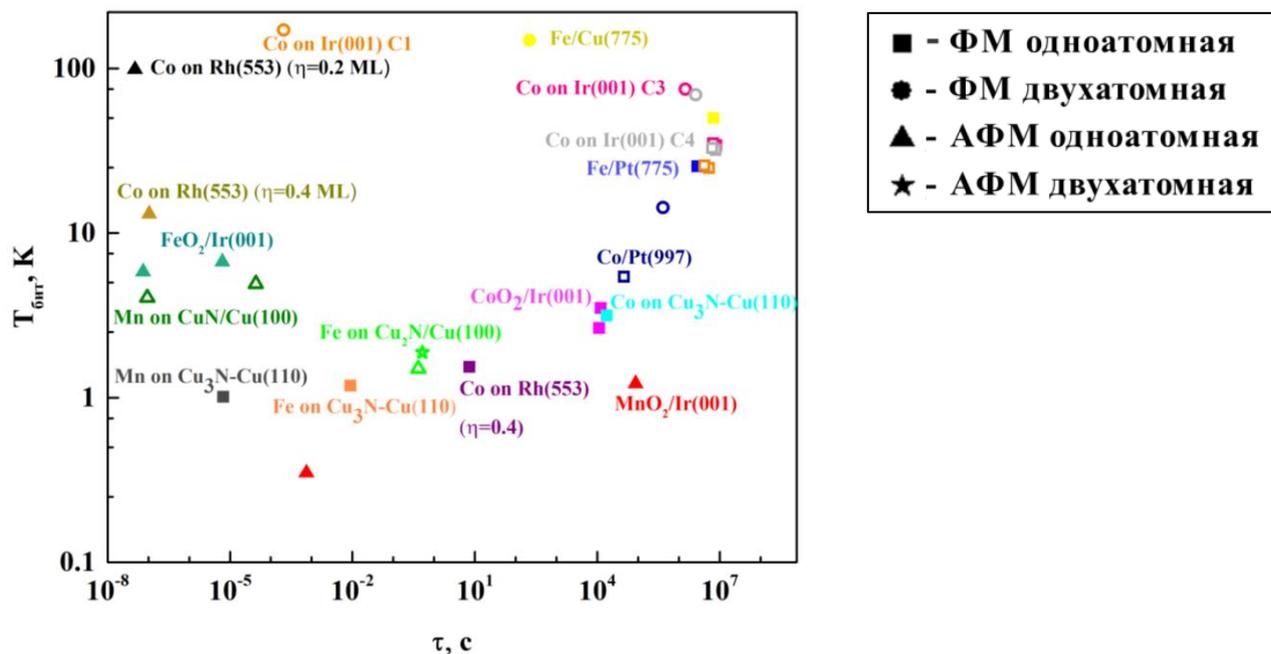


Рис.2 Диаграмма  $\tau - T_{\text{bit}}$  для  $N=10$ , где  $T_{\text{bit}}$  – температура, при которой время спонтанного перемагничивания равно 1 год,  $\tau$  – время перемагничивания во внешнем магнитном поле при  $T_{\text{bit}}$ .

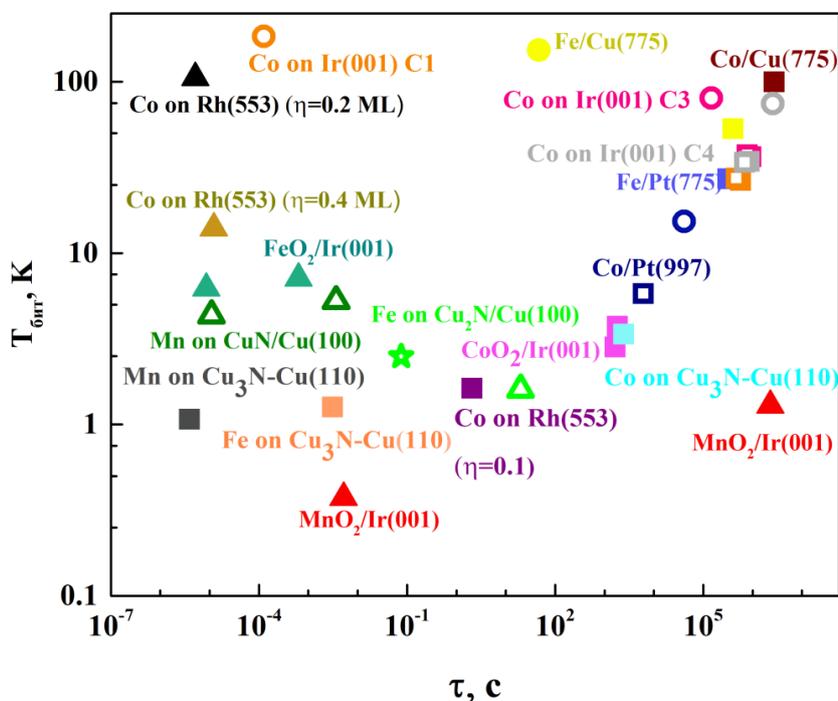


Рис.3 Диаграмма  $\tau - T_{\text{bit}}$  для  $N=100$ .

Диаграммы построены по вычисленным значениям, приведённым в таблице 3.

**Таблица 3.** Вычисленные значения температур, при которых время спонтанного перемагничивания  $\tau_{сп} = 1$  год, и времён перемагничивания во внешнем поле при этих температурах для исследуемых систем.

Система	Температура, при которой время спонтанного перемагничивания $\tau_{сп} = 1$ год, T, K				Время перемагничивания во внешнем поле $\tau$ , с			
	N=10		N=100		N=10		N=100	
	одноатомная	двухатомная	одноатомная	двухатомная	одноатомная	двухатомная	одноатомная	двухатомная
Co/Pt(997)	5.42	14.25	5.78	15.29	4.55E4	4.07E5	6.12E3	4.11E4
Co/Cu(775)	93.17	-	99.47	-	1.73E7	-	2.72E6	-
Fe/Cu(775)	48.34	142.50	51.24	153.00	5.70E6	219.25	8.05E5	47.19
Fe/Pt(775)	25.38		27.10		2.87E6		3.15E5	
Fe/Cu <sub>2</sub> N/Cu(100)	1.50	1.89	1.60	2.49	0.41	0.52	19.90	0.08
CoO <sub>2</sub> /Ir(001)	2.65 (K=0.3) 3.51 (K=3)	-	2.83 (K=0.3) 3.74 (K=3)	-	1.10E4 (K=0.3) 1.21E4 (K=3)	-	1.64E3 (K=0.3) 1.83E3 (K=3)	-
FeO <sub>2</sub> /Ir(001)	5.83 (K=0.3) 6.70 (K=3)	-	6.23 (K=0.3) 7.13 (K=3)	-	7.44E-8 (K=0.3) 6.48E-6 (K=3)	-	8.58E-6 (K=0.3) 6.38E-4 (K=3)	-
MnO <sub>2</sub> /Ir(001)	0.35 (K=0.3) 1.22 (K=3)	-	0.38 (K=0.3) 1.30 (K=3)	-	7.45E-4 (K=0.3) 8.73E4 (K=3)	-	5.20E-3 (K=0.3) 2.29E6 (K=3)	-
Mn/CuN/Cu(100)	4.05 (K=0.3) 4.91 (K=3)	-	4.33 (K=0.3) 5.25 (K=3)	-	9.40E-8 (K=0.3) 4.30E-5 (K=3)	-	1.09E-5 (K=0.3) 3.66E-3 (K=3)	-
Co/Ir(001) (конфигурации C1, C3, C4)	24.75 (K=0.3) 25.6 (K=3)	171.12 (K=0.3) 171.12 (K=3)	26.45 (K=0.3) 27.33 (K=3)	183.70 (K=0.3) 183.70 (K=3)	5.50E6 (K=0.3) 4.22E6 (K=3)	2.06E-4 (K=0.3) 2.06E-4 (K=3)	5.79E5 (K=0.3) 4.73E5 (K=3)	1.25E-5 (K=0.3) 1.25E-5 (K=3)
	34.05 (K=0.3) 34.90 (K=3)	74.80 (K=0.3) 74.80 (K=3)	36.34 (K=0.3) 37.27 (K=3)	80.33 (K=0.3) 80.33 (K=3)	8.30E6 (K=0.3) 6.90E6 (K=3)	1.45E6 (K=0.3) 1.45E6 (K=3)	9.28E5 (K=0.3) 7.82E5 (K=3)	1.46E5 (K=0.3) 1.46E5 (K=3)

	31.96 (K=0.3) 32.80 (K=3)	69.15 (K=0.3) 69.15 (K=3)	34.13 (K=0.3) 33.68 (K=3)	74.25 (K=0.3) 74.25 (K=3)	7.93E6 (K=0.3) 6.59E6 (K=3)	2.58E6 (K=0.3) 2.58E6 (K=3)	8.65E5 (K=0.3) 6.94E5 (K=3)	2.49E5 (K=0.3) 2.49E5 (K=3)
Mn/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	1.01	-	1.08	-	6.88E-6	-	3.93E-6	-
Fe/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	1.18	-	1.27	-	8.89E-3		3.11E-3	-
Co/Cu <sub>3</sub> N-Cu (110)	3.16	-	3.37	-	1.70E4	-	2.46E3	-
Co/Rh(553) ( $\eta = 0.1,$ 0.2,0.4 ML)	1.53	-	1.63	-	7.382	-	2.06	-
	98.60	-	105.30	-	4.67E-8	-	5.17E-6	-
	13.10	-	13.98	-	1.04E-7	-	1.22E-5	-

Для дальнейшего анализа удобно определить коэффициент  $\alpha$  как отношение времен спонтанного  $\tau$  и индуцированного перемагничивания.

Обсудим диаграмму  $\tau$ - $T_{\text{bit}}$  для  $N=10$ . Представленные на ней результаты позволяют сделать следующие выводы. Во-первых, температуры  $T_{\text{bit}}$  двухатомных цепочек выше, чем для соответствующих одноатомных цепочек. В то же время коэффициент  $\alpha$  для двухатомных цепочек меньше, чем для соответствующих одноатомных цепочек. Например, температура  $T_{\text{bit}}$  одноатомной (двухатомной) цепочки Co, состоящей из 100 (200) атомов на поверхности Pt(997), составляет 5,8 К (15,3 К). А коэффициент  $\alpha$  для одноатомной (двухатомной) цепочки Co равен 5150 (765). Во-вторых, окисление атомной цепочки обычно приводит к снижению температуры  $T_{\text{bit}}$  и увеличению коэффициента  $\alpha$ , что можно увидеть при сравнении систем Co/Ir(001) и CoO<sub>2</sub>/Ir(001). Здесь следует подчеркнуть, что степень окисления кислорода  $\eta$  критически важна. Видно, что цепочки Co на поверхности Rh(553) имеют максимальные значения  $T_{\text{bit}}$  и  $\alpha$  при  $\eta = 0,2$  ML. В-третьих, нитрирование подложки также приводит к снижению температуры  $T_{\text{bit}}$  и увеличению коэффициента  $\alpha$ , что можно увидеть, сравнив, например, системы Fe/Cu(775) и

Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001). Обобщая результаты, представленные на диаграмме, можно сделать вывод, что антиферромагнитные цепочки оксида Со на поверхности Rh(553) кажутся наиболее перспективными для создания битов памяти.

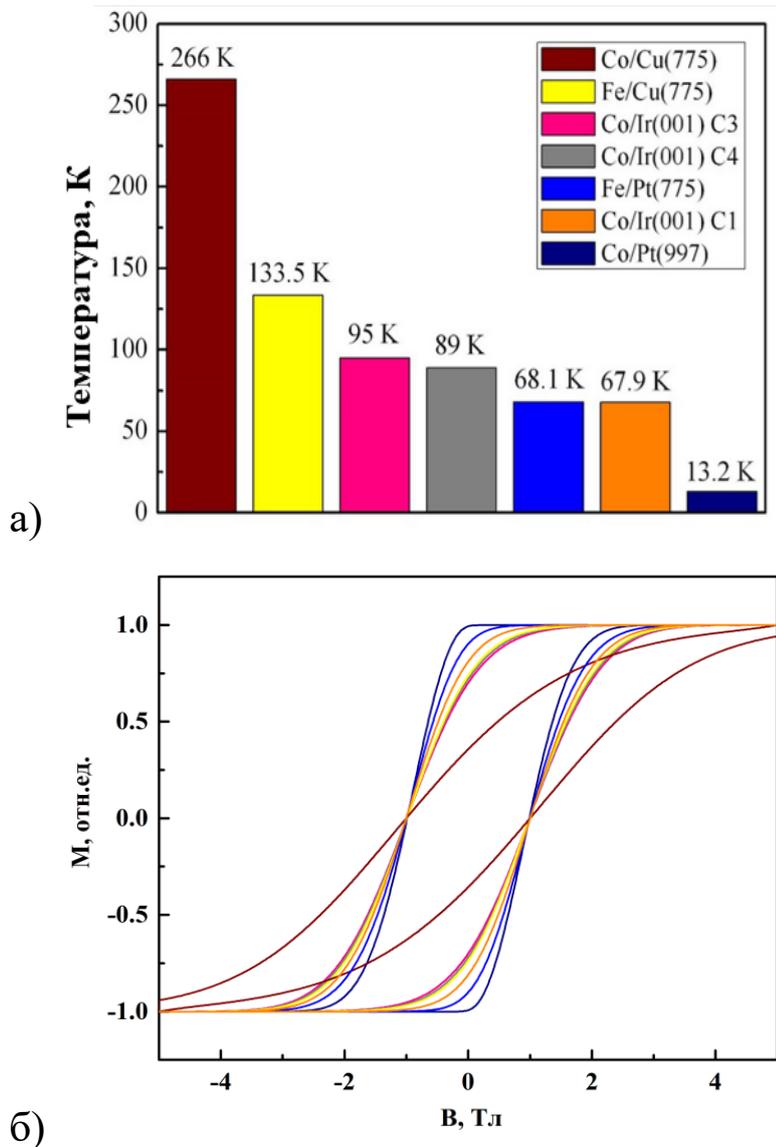


Рис. 4 (а) Температуры, соответствующие коэрцитивной силе  $V_c = 1$  Тл для одноатомных ферромагнитных цепочек с  $T_{bit} > 5$  К, и (б) кривые намагничивания при этих температурах. Длина цепочек  $N = 100$  атомов.

Обсудим магнитодинамические свойства ферромагнитных одноатомных цепочек с  $T_{bit} > 5$  К. Такими цепочками являются Co/Pt(997), Co/Cu(775), Fe/Cu(775), Fe/Pt(775) и Co/Ir(001). Для каждой системы находим температуру  $T_{1T}$ , которая соответствует коэрцитивной силе  $V_c = 1$  Т. Мы получили, что  $T_{1T} > T_{bit}$ . В то же время температура  $T_{1T}$  ниже критической температуры ( $T_{1T} < T_C$ ).

Таким образом, температура  $T_{1T}$  может использоваться в качестве оценки нижнего предела критической температуры. На рис.4а показано, что значение  $T_{1T}$  находится в диапазоне от 13,2 К для Co/Pt(997) до 266 К для Co/Cu(775). Кривые намагничивания при температуре  $T_{1T}$  показаны на рис.4б. Видно, что цепочка атомов Co/Pt(997) является наиболее жестким магнитным материалом, а цепочка атомов Co/Cu(775) является наиболее мягким магнитным материалом. Важно отметить, что крутизна петли гистерезиса зависит не только от температуры  $T_{1T}$ , но и от отношения  $J/K$  и длины цепочки.

Оценим теперь влияние диполь-дипольного взаимодействия на время перемагничивания цепочек Co/Pt(997) и Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001) и рассмотрим структуру доменных стенок систем Co/Pt(997), Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001), Fe/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110), Mn/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110) и Co/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110). Соответствующие значения обменных интегралов  $J$ , энергии магнитной анизотропии  $K$  и магнитных моментов  $\mu$  указаны в таблице 2. Для каждой из этих систем были рассчитаны с помощью метода GNEB энергетические барьеры  $\Delta E_i, i = 1,2,3$ . Значения этих барьеров для всех рассматриваемых систем представлены в таблице 4.

**Таблица 4.** Характеристики систем Co/Pt(997), Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001), Fe/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110), Mn/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110) и Co/Cu<sub>3</sub>N/Cu(110).

Система	Тип	$J$ , мэВ	$K$ , мэВ	$\mu$ $/\mu_B$	$\delta N$	$\Delta E_1$ , мэВ	$\Delta E_2$ , мэВ	$\Delta E_3$ , мэВ
Fe/Cu <sub>2</sub> N/Cu(001)	АФМ	-1.3	3.0	2.78	0.47	4.320	1.724	2.762
Fe/Cu <sub>3</sub> N/Cu(110)	ФМ⊥	1.25	1.21	2.78	0.72	2.581	0.083	0.739
Co/Cu <sub>3</sub> N/Cu(110)	ФМ⊥	3.81	2.3	1.67	0.91	7.502	0.059	0.396
Mn/Cu <sub>3</sub> 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

Рассмотрим цепочки Co/Pt(997) и Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001). Эти системы были рассмотрены экспериментально [1,2,19,23], что повышает интерес к их исследованию.

Рассмотрим сначала структуру доменной стенки и перемагничивание ферромагнитной цепочки Co на поверхности Pt(997). Ось z направлена вдоль цепочки, как указано на рисунке. Расстояние между атомами в этой цепочке равно  $a = 2.78 \text{ \AA}$ . Отношение  $K/J$  равно 0.27, что означает, что полуширина стенки превышает линейные размеры одного атома. Полуширину цепочки можно вычислить по формуле  $\delta N = \sqrt{|J|/2K}$  [24]. Первым устойчивым состоянием доменной стенки на краю цепочки является состояние с перевёрнутыми первыми 5 магнитными моментами атомов Co. Значения соответствующих барьеров для этой системы при длине цепочки  $N=20$  указаны в таблице 4.

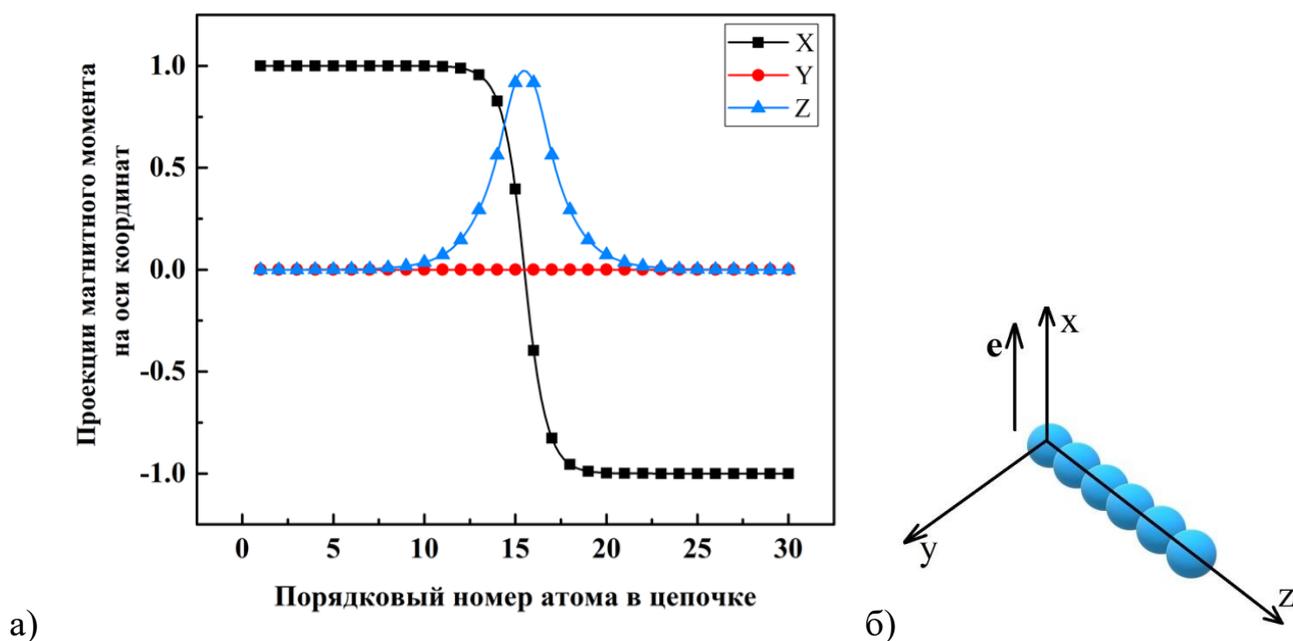


Рис.5 а) Зависимость проекции магнитного момента на оси координат от порядкового номера атома в цепочке для системы Co/Pt(997), б) Расположение системы координат относительно атомной цепочки.

Из графика на рис.5а также следует, что ширина доменной стенки существенна. Перемагничивание цепочки происходит не путём переворота отдельных магнитных моментов на 180 градусов, а постепенно, на что

указывают проекции магнитных моментов на ось  $x$ , находящиеся в интервале  $(-1;1)$ , а также проекции магнитных моментов на ось  $z$ , находящиеся в интервале  $(0;1)$ . Переворот магнитных моментов атомов в ходе перемагничивания происходит в плоскости  $Oxz$ , о чём свидетельствуют нулевые проекции на ось  $y$ . Данной системе соответствует неелевская доменная стенка.

Перейдём к рассмотрению структуры доменной стенки антиферромагнитной цепочки  $Fe/Cu_2N/Cu(001)$ . Расстояние между атомами в цепочке равно  $a = 7.23 \text{ \AA}$ , ось лёгкого намагничивания направлена вдоль цепочки, то есть вдоль оси  $z$ . Отношение  $K/|J|$  равно 2.3, что означает, что полуширина стенки менее одного межатомного расстояния, а магнитные моменты почти не отклоняются от направления легкого намагничивания. В рассматриваемой системе для того, чтобы доменная стенка образовалась, достаточно переворота одного магнитного момента. Это значит, что  $N_{eff} = N$ . График зависимости проекций магнитных моментов на оси координат от порядкового номера атома в цепочке аналогичен соответствующему графику для системы  $Co/Pt(997)$ , но в данном случае зависимости проекций на ось  $z$  представлены отдельно для двух подрешёток.

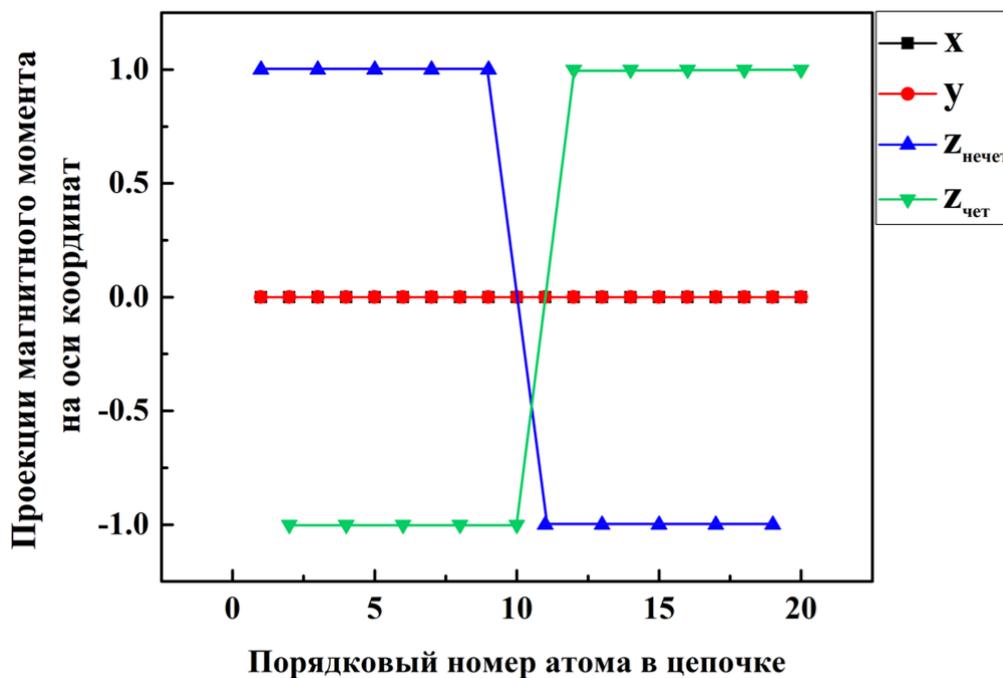


Рис. 6 Зависимость проекции магнитного момента на оси координат от порядкового номера атома в цепочке для системы  $Fe/Cu_2N/Cu(001)$ .

Из рис. 6 видно, что полуширина доменной стенки не превышает одного межатомного расстояния. Об этом можно судить из отсутствия проекций на ось  $z$ , находящихся в интервале  $(-1;1)$ . В ходе перемагничивания цепочки магнитные моменты атомов Fe могут иметь только два положения: «вверх» и «вниз».

### Co/Pt(997)

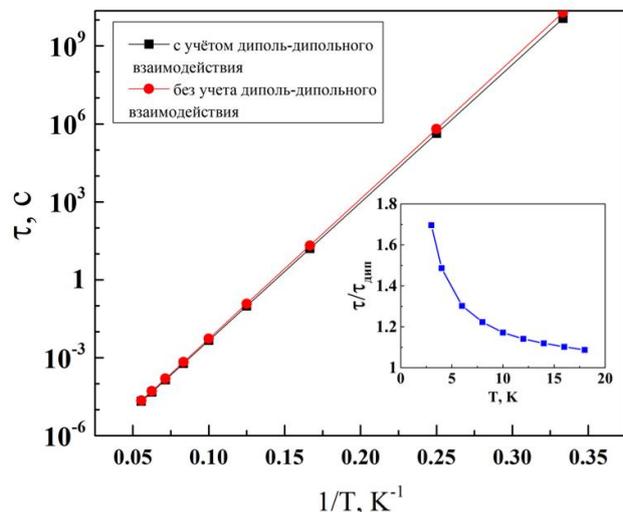


Рис. 7 Зависимость времени перемагничивания одноатомной цепочки от величины  $1/T$  при  $N=100$

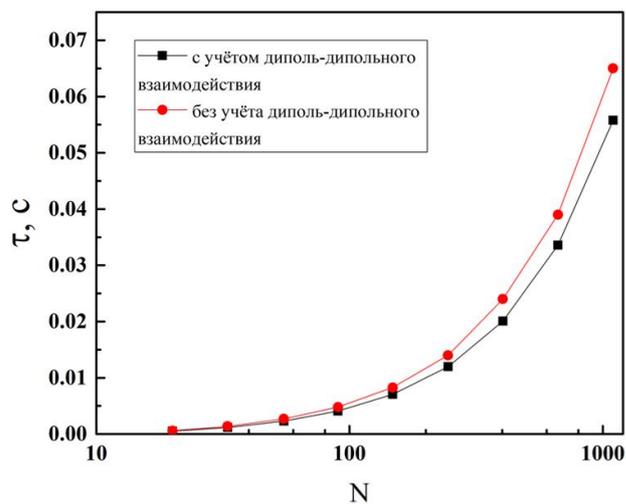


Рис. 8 Зависимость времени перемагничивания одноатомной цепочки от длины цепочки при  $T=10$  К

### Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001)

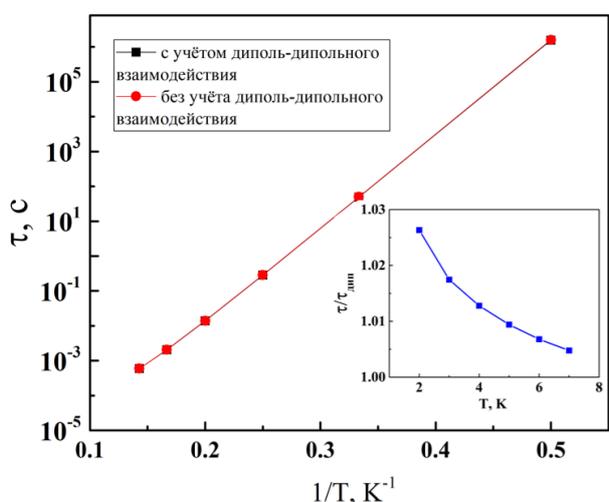


Рис. 9 Зависимость времени перемагничивания одноатомной цепочки от величины  $1/T$  при  $N=20$

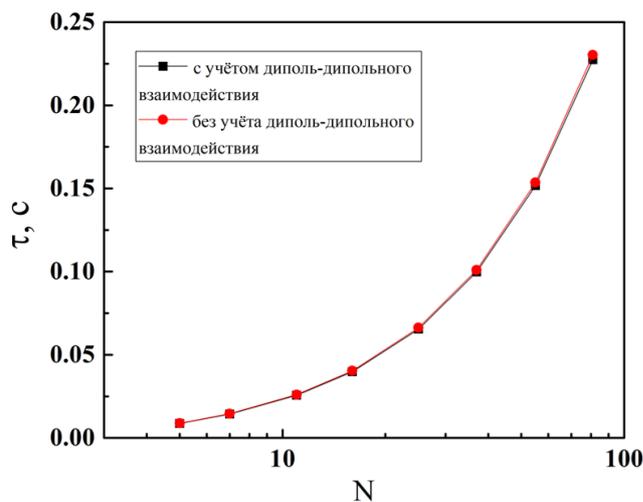


Рис. 10 Зависимость времени перемагничивания одноатомной цепочки от длины цепочки при  $T=4$  К

С учётом различной структуры доменных стенок и различия других параметров для рассмотренных систем Co/Pt(997) и Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001) были проведены расчёты времён спонтанного перемагничивания с учётом и без учёта влияния диполь-дипольного взаимодействия (рис.7-10). Также было учтено наличие верхних пределов температуры и числа атомов в цепочке, полученное из ограничений для времени случайного блуждания доменной стенки.

Видно, что для системы Co/Pt(997) учёт диполь-дипольного взаимодействия вносит более ощутимый вклад во время перемагничивания, чем для системы Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001). Это обусловлено следующими причинами. Во-первых, расстояние между атомами кобальта в 2,6 раз меньше, чем расстояние между атомами в цепочке из железа. Во-вторых, ширина доменной стенки в системе Co/Pt(997) равна 6-7 атомов в то время, как для системы Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001) ширина доменной стенки значительно меньше одного межатомного расстояния.

Отношение времён перемагничивания с учётом диполь-дипольного взаимодействия и без его учета увеличивается с уменьшением температуры. При низких температурах для системы Co/Pt(997) это отношение достигает значения 1.7 (T=3 К) в то время, как для системы Fe/Cu<sub>2</sub>N/Cu(001) максимальное значение этого отношения равно 1.04 при температуре T=2 К. Из графиков зависимости времени перемагничивания цепочек от их длины видно, что при увеличении длины цепочек влияние диполь-дипольного взаимодействия увеличивается.

Отдельно рассмотрим влияние диполь-дипольного взаимодействия на величины энергетических барьеров системы Co/Pt(997). Вычислим разности между энергетическими барьерами с учётом и без учёта диполь-дипольного взаимодействия. Разности  $\delta E_i = \Delta E_i^{dip} - \Delta E_i$ , вычисленные с помощью метода GNEB, равны  $\delta E_1 = -2.65 \cdot 10^{-6}$  эВ,  $\delta E_2 = 1.31 \cdot 10^{-6}$  эВ,  $\delta E_3 = -4.83 \cdot 10^{-7}$  эВ. Аналогичные разности, вычисленные с помощью формулы (4) и выражений для  $h_i$  из таблицы 1, равны  $\delta E_1 = -2.41 \cdot 10^{-6}$  эВ,  $\delta E_2 = 1.55 \cdot 10^{-6}$  эВ,  $\delta E_3 = 0$  эВ. Диполь-дипольное взаимодействие вносит правки порядка  $10^{-6}$  эВ. Учёт неколлинеарности магнитных моментов в той же системе вносит

на 2 порядка больший вклад [9]. Это значит, что нет необходимости учитывать диполь-дипольное взаимодействие без учёта неколлинеарности.

Рассмотрим теперь три системы Fe, Mn и Co на поверхности  $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$ . Это ферромагнитные цепочки, изученные теоретически с помощью квантово-механических расчётов [20]. Для каждой из этих цепочек получена зависимость времени спонтанного перемагничивания от величины, обратной температуре, для цепочки из  $N=100$  атомов с учётом диполь-дипольного взаимодействия.

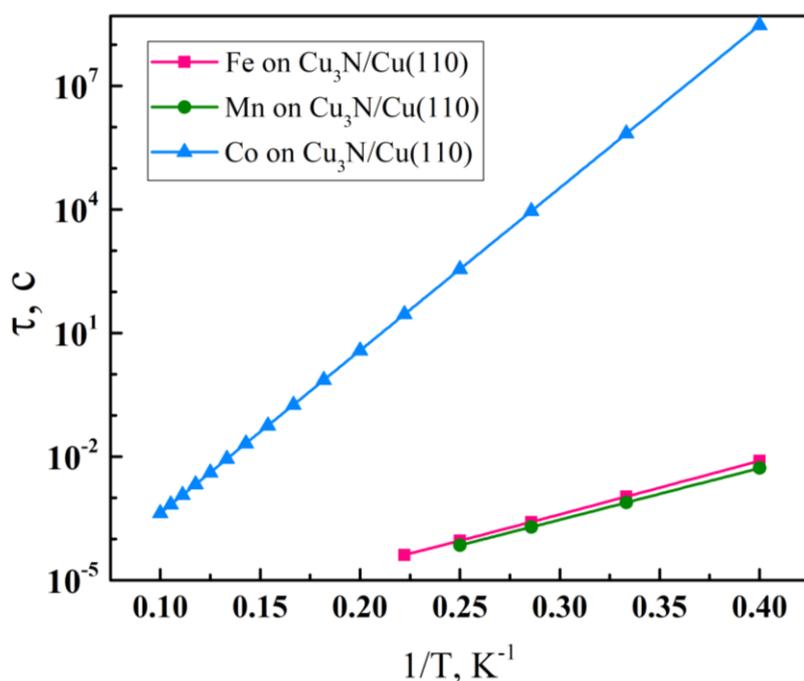


Рис. 11 Зависимость времени спонтанного перемагничивания одноатомных цепочек Fe, Mn и Co от величины  $1/T$  при  $N=100$

Разная длина прямых для этих систем обусловлена предельными значениями температуры, полученными из формулы (7). Видно, что графики для цепочек из Fe и Mn очень похожи друг на друга. Кроме того, видно, что для системы  $\text{Co}/\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$  при низких температурах время спонтанного перемагничивания достигает гораздо больших величин, чем времена перемагничивания двух других систем.

Также для систем Fe, Mn и Co на поверхности  $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$  получена зависимость проекций магнитных моментов на ось лёгкого намагничивания от порядкового номера атома для цепочки из  $N=20$  атомов и отдельно рассмотрены структуры доменных стенок цепочек из Mn и Co на поверхности  $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$ .

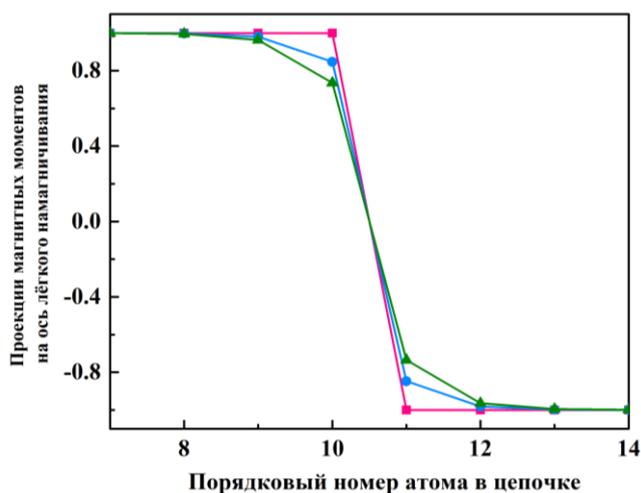


Рис. 12 Зависимость проекций магнитных моментов на ось лёгкого намагничивания от порядкового номера атома для цепочки из N=20 атомов.

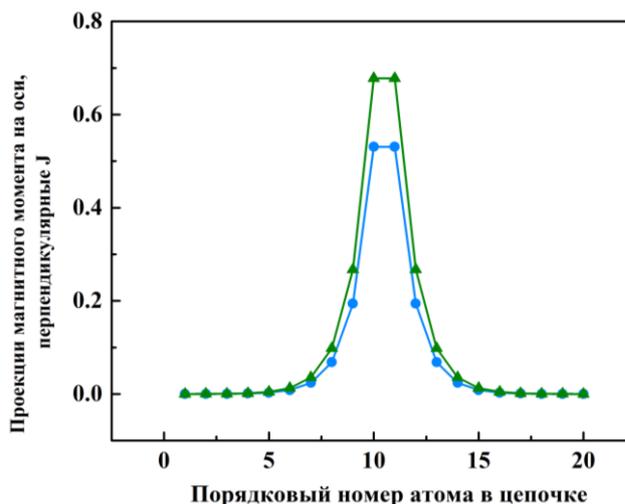


Рис. 13 Зависимость проекций  $\mu$  на ось, перпендикулярную J, от порядкового номера атома в цепочке для систем Mn и Co на  $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$ .

На представленных графиках (рис.12,13) показана структура доменной стенки в системах Fe, Mn и Co на поверхности  $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$ . Видно, что проекции магнитных моментов 10-го и 11-го атомов для разных систем различны. Для системы Fe/ $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$  эти проекции равны соответственно 1 и -1, что указывает на коллинеарность магнитных моментов. Для систем Mn/ $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$  и Co/ $\text{Cu}_3\text{N}/\text{Cu}(110)$  соответствующие проекции как на ось лёгкого намагничивания, так и на перпендикулярную ей ось, по модулю меньше единицы, что говорит о постепенном изменении намагниченности вдоль цепочки.

Уделим отдельное внимание ферромагнитным цепочкам из атомов Co и Fe на поверхности Cu(775). Ось лёгкого намагничивания этих систем направлена вдоль цепочки [4]. Расстояние между атомами в этих системах равно  $a = 2.56 \text{ \AA}$ , что увеличивает влияние диполь-дипольного взаимодействия. Интерес к рассмотрению данных систем обусловлен их широкими доменными стенками. Полуширина  $\delta N$  доменной стенки цепочки Co/Cu(775) равна 3.94 атома, а

цепочки Fe/Cu(775) – 7.21 атома, что следует из отношений  $K/J$ , равных, соответственно,  $3.2 \cdot 10^{-2}$  и  $9.6 \cdot 10^{-3}$ . Для цепочек с большим значением  $\delta N$  энергетический барьер  $\Delta E_3$  пренебрежимо мал. В этом случае у атомной цепочки нет метастабильных состояний и время перемагничивания вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{1}{\nu_0} \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (11)$$

где  $\Delta E$  – энергетический барьер перемагничивания атомной цепочки, как единого целого. Важно отметить, что в данном случае возможны два способа перемагничивания. Для их рассмотрения введём некоторую критическую длину цепочки  $N_0$ . Если  $N < N_0$ , то перемагничивание происходит путём переворота всех магнитных моментов одновременно. Если же  $N \geq N_0$ , то формируется промежуточное неустойчивое состояние в виде доменной стенки, магнитные моменты переворачиваются по очереди, а энергетический барьер вычисляется с помощью метода GNEB.

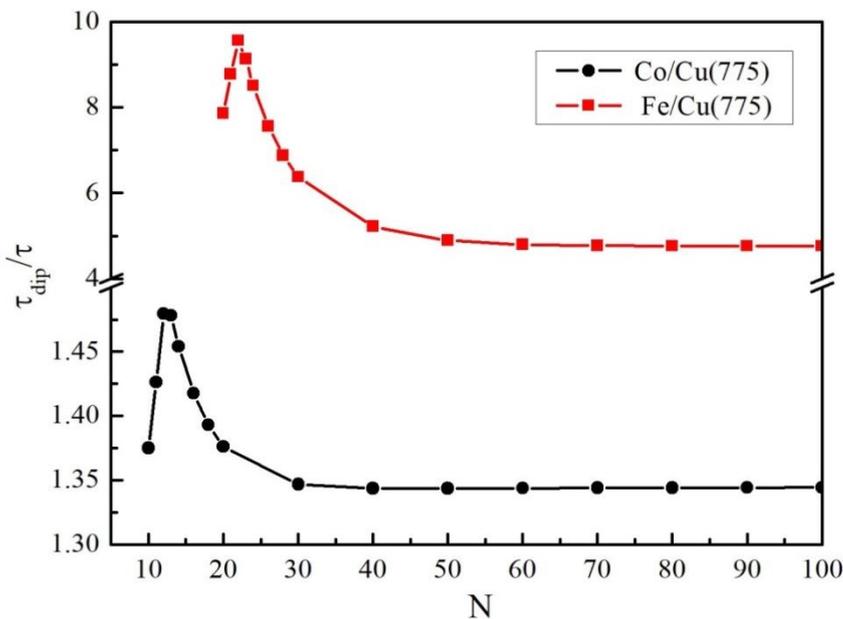


Рис. 14 Зависимость отношения времён спонтанного перемагничивания с учётом и без учёта диполь-дипольного взаимодействия при  $T=10$  К от длины цепочки.

Известно, что в бесконечно длинных цепочках с  $K/|J| \ll 1$  энергия доменной стенки равна  $\sqrt{8K|J|}$ . Приравняем это выражение к  $KN_0$  и получим

$$N_0 = \sqrt{\frac{8|J|}{K}} \quad (12)$$

Рассчитанные по этой формуле значения  $N_0$  равны 16 атомов для цепочки Co/Cu(775) и 29 атомов для цепочки Fe/Cu(775).

На рис.14 представлена зависимость отношения времён спонтанного перемагничивания с учётом и без учёта диполь-дипольного взаимодействия при  $T=10$  К. Мы рассматривали цепочки конечной длины, что способствовало небольшому уменьшению критической длины цепочек по сравнению с вычисленными по формуле (12) значениями. Для системы Co/Cu(775) величина  $N_0$  одинакова для случаев с учётом и без учёта диполь-дипольного взаимодействия, в отличие от системы Fe/Cu(775), для которой учёт диполь-дипольного взаимодействия приводит к уменьшению  $N_0$  с 23 атомов до 22. Также на графике видно, что диполь-дипольное взаимодействие вносит максимальный вклад в областях длин цепочек, близких к критическому значению. Максимальные значения отношения  $\tau_{dip}/\tau$  при  $T=10$  К равны 1.48 для цепочки из 12 атомов Co и 9.56 для цепочки из 22 атомов Fe.

### **Заключение**

Магнитные свойства широкого спектра ферромагнитных и антиферромагнитных одноатомных и двухатомных цепочек были оценены с помощью аналитического метода. Обнаружено, что двухатомные цепочки могут использоваться, как бит информации, при более высоких температурах  $T_{bit}$ , чем те же одноатомные цепочки. Однако в случае двухатомных цепочек отношение времен спонтанного и индуцированного перемагничивания  $\alpha$  меньше. Нитрирование поверхности или окисление атомной цепочки обычно приводит к снижению температуры  $T_{bit}$  и увеличению отношения  $\alpha$ . Согласно представленным без учёта диполь-дипольного взаимодействия результатам, цепочки Co на поверхности Rh(553) представляются наиболее перспективными для создания стабильных битов информации. На основании проведенного анализа можно утверждать, что использование атомных цепочек дает возможность создавать магнитные материалы с очень широким диапазоном физических свойств.

Было оценено влияние диполь-дипольного взаимодействия на время перемагничивания атомных цепочек. Показано, что влияние диполь-дипольного

взаимодействия увеличивается при уменьшении температуры. По результатам работы сделан вывод, что необходимость этого учёта индивидуально для каждой системы. Это зависит от расстояния между атомами в цепочке, от величины магнитного момента, а также от соотношения между величинами обменного интеграла и энергии магнитной анизотропии, которое определяет ширину доменной стенки. Чем шире доменная стенка и меньше расстояние между атомами в цепочке, тем больший вклад вносит диполь-дипольное взаимодействие.

### Литература

- [1] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, C. Carbone, Ferromagnetism in one- dimensional monatomic metal chains, *Nature* **416**, 301 (2002).
- [2] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, S. Rusponi, P. Ohresser, W. Eberhardt, C. Carbone, K. Kern, Oscillatory Magnetic Anisotropy in One-Dimensional Atomic Wires, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077203 (2004).
- [3] A.G. Syromyatnikov, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky, A.L. Klavsyuk, Formation and properties of metallic atomic chains and wires, *Phys. Usp.* **64**, 671 (2021).
- [4] A.G. Syromyatnikov, A.M. Saletsky, A.L. Klavsyuk, Stability and magnetism on the atomic scale: Atom-wide wires on vicinal metal substrate, *J. Magn. Magn. Mater.* **510**, 166896 (2020).
- [5] A.G. Syromyatnikov, S.V. Kolesnikov, A.M.Saletsky, A.L.Klavsyuk, The structure phase transition in atom-wide Co wires on a vicinal Cu(111) surface, *Mater. Lett.* **179**, 69 (2016).
- [6] Y. Li, B.-G. Liu, Long-range ferromagnetism in one-dimensional monatomic spin chains, *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).
- [7] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Improved kinetic Monte Carlo models for computational and analytical investigations of the magnetic properties of finite-size atomic chains, *Europhys. Lett.*, Volume **137**, Number 5 (2022).

- [8] S.V. Kolesnikov, Low-temperature study of the magnetic properties of finite atomic chains, *JETP Lett.* **103**, 588 (2016).
- [9] S.V. Kolesnikov, E.S. Sapronova, An estimation of magnetic properties of existing and prospective atomic chains in the framework of the Heisenberg model, *IEEE Magnetics letters*, Volume **13** (2022).
- [10] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Magnetic properties of the finite-length biatomic chains in the framework of the single domain-wall approximation, *Phys. Rev. B* **100**, 224424 (2019).
- [11] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, An estimate for the magnetization reversal time of antiferromagnetic chains within the Heisenberg model, *J. Exp. Theor. Phys.* **125**, 644 (2017).
- [12] P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, H. Jonsson, Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation *Comput. Phys. Comm.* **196**, 335 (2015).
- [13] S.V. Kolesnikov, I.N. Kolesnikova, Magnetization Reversal Time for Ferromagnetic and Antiferromagnetic Chains in the Heisenberg Model, *IEEE Magn. Lett.* **10**, 2509105 (2019).
- [14] B. Dupe, J.E. Bickel, Y. Mokrousov, F. Otte, K. von Bergmann, A. Kubetzka, S. Heinze, R. Wiesendanger, Giant magnetization canting due to symmetry breaking in zigzag Co chains on Ir(001), *New J. Phys.* **17**, 023014 (2015).
- [15] H. Hashemi, G. Fischer, W. Hergert, V. S. Stepanyuk, Magnetic properties of 3d transition metal wires on vicinal Cu(111) surfaces at finite temperature, *J. Appl. Phys.* **107**, 09E311 (2010).
- [16] M.M. Bezerra-Neto, M.S. Ribeiro, B. Sanyal, A. Bergman, R.B. Muniz, O. Eriksson, A.B. Klautau, Complex magnetic structure of clusters and chains of Ni and Fe on Pt(111), *Sci. Rep.* **3**, 3054 (2013).
- [17] K.M. Tsysar, S.V. Kolesnikov, A.M. Saletsky, Magnetization dynamics of mixed Co-Au chains on Cu(110) substrate: Combined ab initio and kinetic Monte Carlo study, *Chin. Phys. B* **24**, 097302 (2015).

- [18] C.F. Hirjibehedin, C.P. Lutz, A.J. Heinrich, Spin coupling in engineered atomic structures, *Science* **312**, 1021 (2006).
- [19] S. Loth, S. Baumann, C.P. Lutz, D.M. Eigler, A.J. Heinrich, Bistability in Atomic-Scale Antiferromagnets, *Science* **335**, 196 (2012).
- [20] D.I. Bazhanov, O.V. Stepanyuk, O.V. Farberovich, V.S. Stepanyuk, Classical and quantum aspects of spin interaction in 3d chains on a Cu<sub>3</sub>N-Cu(110) molecular network, *Phys. Rev. B* **93**, 035444 (2016).
- [21] P. Ferstl, L. Hammer, C. Sobel, M. Gubo, K. Heinz, M.A. Schneider, Self-Organized Growth, Structure, and Magnetism of Monatomic Transition-Metal Oxide Chains, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 046101 (2016).
- [22] J.G. Korobova, I.A. Nikitina, D.I. Bazhanov, P. Ruiz-Diaz, Oxygen-Mediated Superexchange Interactions and Their Impact on the Structural Stability, Magnetic Order, and Magnetocrystalline Anisotropy of One Dimensional Co-Oxide Chains on Rh(553) Step-Surfaces, *J. Phys. Chem. C* **124**, 26026 (2020).
- [23] S. Yan, D.-J. Choi, J. A. J. Burgess, S. Rolf-Pissarczyk, and S. Loth, Control of quantum magnets by atomic exchange bias, *Nat. Nanotechnol.* **10**, 40 (2015).
- [24] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, 1963.
- [25] S.V. Kolesnikov, K.M. Tsysar, A.M. Saletsky, Magnetic properties of one-dimensional Au-Co chains on the copper(110) surface, *Phys. Solid State* **57**, 1513 (2015).
- [26] K. Tao, O.P. Polyakov, V.S. Stepanyuk, Switching of antiferromagnetic chains with magnetic pulses, *Phys. Rev. B* **93**, 161412(R) (2016).
- [27] J. Li, B.-G. Liu, Monte Carlo simulated dynamical magnetization of single-chain magnets, *J. Magn. Magn. Mater.* **378**, 186 (2015).
- [28] A.S. Smirnov, N.N. Negulyaev, W. Hergert, A.M. Saletsky, V.S. Stepanyuk, Magnetic behavior of one- and two-dimensional nanostructures stabilized by surface-state electrons: a kinetic Monte Carlo study, *New J. Phys.* **11**, 063004 (2009).