

ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ЦЕПОЧЕК В РАМКАХ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

С. В. Колесников, И. Н. Колесникова*

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

Поступила в редакцию 29 марта 2017 г.

В рамках модели Гейзенберга при наличии одноосной магнитной анизотропии получены формулы, позволяющие оценивать как время спонтанного перемагничивания антиферромагнитной цепочки, так и время перемагничивания при взаимодействии с иглой сканирующего туннельного микроскопа. Вычислены поправки, связанные с возможным отличием свойств крайних атомов цепочки от свойств атомов, находящихся в середине цепочки. Проведены численные оценки для типичных значений параметров гамильтониана Гейзенберга.

DOI: 10.7868/S0044451017100121

1. ВВЕДЕНИЕ

За последнее десятилетие антиферромагнитная спинтроника [1] стала одним из наиболее перспективных направлений развития нанотехнологий. При этом одним из интереснейших вопросов является следующий: можно ли использовать антиферромагнитные цепочки для хранения информации? Интерес к антиферромагнитным элементам памяти связан, прежде всего, с тем, что их можно размещать на поверхности кристалла с существенно большей плотностью, чем ферромагнитные [2]. При этом в качестве магнитной головки может быть использована игла сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Вопрос о взаимодействии коротких антиферромагнитных цепочек, содержащих до десяти атомов, с СТМ-иглой был недавно исследован теоретически [3, 4]. Однако создание массива цепочек длиной порядка десяти атомов является исключительно сложной задачей. Например, в работе [2] цепочки создавались с помощью СТМ-иглы, выстраивались атом за атомом, т. е. практически «вручную». С технической точки зрения более перспективным является метод выращивания атомных цепочек в результате самоорганизации [5–7]. Атомные цепочки, получающиеся в результате самоорганизации, ока-

зываются, как правило, более длинными и содержат порядка сотни или нескольких сотен атомов.

Для того чтобы атомная цепочка могла быть использована в качестве бита информации, необходимо, чтобы время τ ее спонтанного перемагничивания было как можно больше, а время τ^* перемагничивания за счет взаимодействия с внешним полем, наоборот, как можно меньше. При этом желательно, чтобы как можно выше была температура T системы, поэтому крайне полезно было бы иметь формулы для оценки времен перемагничивания τ и τ^* при заданных температуре и параметрах цепочки. В данной работе мы будем описывать атомную цепочку с помощью модели Гейзенберга, считая векторы магнитных моментов атомов классическими векторами. Согласно работе [8], использование классического приближения для цепочек из $N > 10$ атомов правомерно при температуре $T > 10^{-8}$ К. Поскольку, как мы увидим далее, нас будут интересовать температуры $T \sim 10$ К, мы можем использовать для оценки времен перемагничивания τ и τ^* метод среднего времени, адаптированный для оценки времени τ спонтанного перемагничивания ферромагнитных цепочек [9]. Отметим, что результаты расчета времени τ методом среднего времени с высокой точностью совпадают с результатами [10, 11] численного моделирования методом Монте-Карло.

В рамках данной работы мы хотим решить следующие три основные задачи: а) обобщить метод оценки времени τ спонтанного перемагничивания

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

ферромагнитной цепочки на случай антиферромагнитной цепочки; б) получить оценку времени τ^* перемагничивания антиферромагнитной цепочки при ее взаимодействии с СТМ-иглой; в) учесть возможность того, что свойства крайних атомов цепочки могут быть отличны от свойств атомов в середине цепочки.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В случае отсутствия внешнего поля мы будем описывать антиферромагнитную цепочку атомов с помощью гамильтониана Гейзенберга с одноосной магнитной анизотропией,

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e})^2, \quad (1)$$

где \mathbf{s}_i и \mathbf{e} — единичные векторы соответственно магнитных моментов атомов и оси легкого намагничивания, K — энергия магнитной анизотропии, $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$ — обменный интеграл. Для антиферромагнитной цепочки $J < 0$. Магнитные моменты атомов могут быть направлены либо параллельно, либо антипараллельно оси легкого намагничивания $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = \pm 1$. Вращение i -го магнитного момента может происходить двумя различными способами [12]. Если $2K > |h_i|$, где $h_i = \sum_j J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j)$, то частота переворотов магнитных моментов определяется выражением

$$\nu_i = \nu_0 \exp \left(- \frac{(2K + h_i)^2}{4Kk_B T} \right), \quad (2)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура системы и ν_0 — частотный префактор. Если же $2K \leq |h_i|$, то энергетический барьер между состояниями $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = \pm 1$ отсутствует и частота переворотов магнитных моментов может быть вычислена [13] как

$$\nu_i = \nu_0 \frac{\exp(-2h_i/k_B T)}{1 + \exp(-2h_i/k_B T)}. \quad (3)$$

Для численных оценок мы будем выбирать частотный префактор ν_0 равным 10^9 Гц [5].

В качестве примера рассмотрим антиферромагнитную цепочку из десяти атомов, изображенную на рис. 1. Для наглядности предположим, что ось легкого намагничивания направлена перпендикулярно оси атомной цепочки. Тогда при температуре ниже критической¹⁾, $T < T_C$, цепочка может находиться

¹⁾ Мы предполагаем, что температура достаточно высока, чтобы считать магнитные моменты атомов классическими векторами.

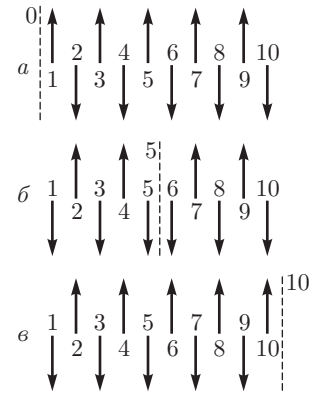


Рис. 1. Схематическое изображение перемагничивания антиферромагнитной цепочки из основного состояния (а) в основное состояние (в). На рисунке (б) изображено возбужденное состояние цепочки с одной доменной стенкой. Положение доменной стенки показано штриховой линией

в одном из двух основных состояний, изображенных на рис. 1а,в. При этом, если температура ниже некоторой максимальной температуры, $T < T_{max} < T_C$, то спонтанное перемагничивание цепочки будет происходить путем образования доменной стенки на одном из концов и последующего ее случайного блуждания вдоль цепочки. На рис. 1б доменная стенка находится между пятым и шестым атомами. В этом случае будем говорить, что доменная стенка находится в положении $i = 5$. Будем считать, что на рис. 1а,в доменная стенка находится соответственно в положениях $i = 0$, $i = 10$. Таким образом, для цепочки из N атомов спонтанное перемагничивание происходит за счет перемещения доменной стенки из положения $i = 0$ в положение $i = N$ или наоборот.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Вычисление времени перемагничивания без учета краевых эффектов

Рассмотрим сначала упрощенную задачу: будем считать, что параметры J и K для крайних атомов такие же, как и для внутренних атомов цепочки. Тогда случайное блуждание доменной стенки будет характеризоваться тремя частотами: частотой образования доменной стенки на конце цепочки

$$\nu_1 = \nu_0 \exp \left(- \frac{(2K + |J|)^2}{4Kk_B T} \right) \text{ при } 2K > |J|, \quad (4)$$

$$\nu_1 = \nu_0 \frac{\exp(-2|J|/k_B T)}{1 + \exp(-2|J|/k_B T)} \text{ при } 2K \leq |J|,$$

частотой исчезновения доменной стенки на конце цепочки

$$\begin{aligned} \nu_2 &= \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K - |J|)^2}{4Kk_B T}\right) \text{ при } 2K > |J|, \\ \nu_2 &= \nu_0 \frac{\exp(2|J|/k_B T)}{1 + \exp(2|J|/k_B T)} \text{ при } 2K \leq |J| \end{aligned} \quad (5)$$

и частотой перемещения доменной стенки в соседнее положение внутри цепочки

$$\nu_3 = \nu_0 \exp\left(-\frac{K}{k_B T}\right). \quad (6)$$

Обратим внимание на то что частоты $\nu_{1,2,3}$ для случаев ферромагнитной и антиферромагнитной цепочек одинаковы. Таким образом, выражение, полученное для времени спонтанного перемагничивания τ в работе [9] для случая ферромагнитной цепочки, оказывается справедливым и для случая антиферромагнитной цепочки:

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{2a} \left\{ \frac{a}{\nu_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2a)}{1-a} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\nu_1} [N(1-a) - 2(1-2a)] \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

где $a = \nu_3/(\nu_2 + \nu_3)$.

Обсудим теперь перемагничивание атомной цепочки под влиянием внешнего силового поля. Предположим, что перемагничивание цепочки происходит за счет взаимодействия крайних атомов цепочки с СТМ-иглой [2]. Механизм взаимодействия СТМ-иглы с атомными цепочками короче десяти атомов рассмотрен в работах [3, 4]. Здесь мы рассмотрим случай предельно сильной связи между крайним атомом цепочки и СТМ-иглой, т.е. будем считать, что взаимодействие с СТМ-иглой приводит к мгновенному перемещению доменной стенки из положения $i = 0$ в положение $i = 1^2$, и обратное ее перемещение $1 \rightarrow 0$ невозможно. Тогда мы получим оценку среднего времени перемагничивания

$$\tau^* = \frac{1}{\nu_3} \left(\frac{N-1}{2} \right) \left[N - \frac{2(1-2a)}{1-a} \right]. \quad (8)$$

Более подробный вывод выражения для τ^* мы рассмотрим ниже уже с учетом краевых эффектов. Отметим, что времена τ и τ^* связаны соотношением

$$\tau = \frac{1}{2} \left\{ \tau^* + \frac{1}{a\nu_1} [N(1-a) - 2(1-2a)] \right\}, \quad (9)$$

²⁾ Для определенности будем считать, что СТМ-игла находится над первым атомом цепочки.

т.е. $\tau^* = 2\tau$ в пределе $\nu_1 \rightarrow \infty$. Данный результат легко понять, если обратить внимание на то, что предел $\nu_1 \rightarrow \infty$ как раз соответствует предполагаемому нами характеру взаимодействия крайнего атома с СТМ-иглой, а возникновение множителя 2 связано с тем, что спонтанное перемагничивание может с равной вероятностью начаться с любого из двух концов цепочки.

3.2. Пределы применимости приближения

Здесь необходимо сделать несколько замечаний по поводу пределов применимости используемой нами модели. Вначале обсудим вопрос о применимости классической модели. Существует ряд хорошо известных примеров, когда квантово-механическое описание антиферромагнетика приводит к результатам существенно отличающимся от классических. Например, намагниченность подрешеток антиферромагнетика в пределе нулевой температуры оказывается меньше, чем ожидаемая с классической точки зрения [14]. А закон дисперсии магнонов в одномерном антиферромагнетике зависит от того, является ли спин атомов целым или полуцелым [15]. Однако нужно помнить, что эти результаты получены для макроскопически больших антиферромагнетиков, для которых характерны (а) трансляционная инвариантность и (б) возможность использования при решении задач длинноволнового приближения. Очевидно, что короткие атомные цепочки, о которых идет речь в статье, этими свойствами не обладают. Кроме того, подчеркнем, что в данной статье мы не обсуждаем закон дисперсии магнонов³⁾.

Обсудим более подробно вопрос о применении классического подхода к проблеме перемагничивания коротких антиферромагнитных цепочек. Для атомной цепочки конечной длины основное состояние в общем случае является невырожденным. Пусть $|1\rangle$ и $|2\rangle$ — состояния цепочки, показанные на рис. 1а,в. Тогда

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |I\rangle),$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |I\rangle),$$

где $|0\rangle$ и $|I\rangle$ — основное и первое возбужденное состояние атомной цепочки, энергии которых различаются на небольшую величину ΔE . Период кван-

³⁾ Если для коротких атомных цепочек вообще есть смысл говорить о магнонах.

товых осцилляций между состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ равен $\tau_q = 2\pi\hbar/\Delta E$. Однако если атомная цепочка находится на поверхности металла, то квантовые осцилляции оказываются подавленными за счет взаимодействия цепочки с электронным газом подложки [8]. Для цепочки из десяти атомов квантовые осцилляции можно не учитывать при температуре $T > 10^{-8}$ К. При вычислении частот переворота магнитных моментов можно также учесть вероятность туннелирования в квазиклассическом приближении [16]. Как показывают численные оценки [17, 18], эффект туннелирования пренебрежимо мал при температурах выше $T \sim 1$ К. Таким образом, при температуре выше 10 К мы можем описывать магнитный момент атома с помощью классического вектора.

При выводе формулы (7) мы рассматривали случайное блуждание только одной доменной стенки, предполагая, что среднее время τ_{walk} ее случайного блуждания много меньше среднего времени τ_+ появления новой доменной стенки. Из этих соображений в работе [9] было получено условие

$$\frac{(\nu_2 + \nu_3)^2}{\nu_1\nu_2} \gg \left(\frac{N}{2} - 1\right)^2, \quad (10)$$

при котором справедливо используемое нами однодоменное приближение. Оно определяет максимальную температуру T_{max} , при которой справедливо выражение (7). При записи условия (10) мы учли условие $\nu_1 \ll \nu_2 + \nu_3$, которое выполняется во всех практически важных случаях. С другой стороны, для того чтобы было справедливым выражение (8), необходимо выполнение условия $\tau^* \ll \tau$, которое эквивалентно условию

$$\frac{(\nu_2 + \nu_3)^2}{\nu_1\nu_2} \gg \frac{N - 1}{2}. \quad (11)$$

Видно, что условие (11) следует из (10) при $N \geq 5$. Поскольку в нашей статье речь идет о перемагничивании цепочек, состоящих их десятков или сотен атомов, условие $T < T_{max}$ является условием применимости как формулы (7), так и формулы (8).

Наконец, кратко обсудим вопрос о существовании в рассматриваемых нами цепочках дальнего порядка. Согласно теореме Мермина–Вагнера [19], в одно- и двумерной изотропной модели Гейзенберга при ненулевой температуре дальний порядок отсутствует при любом знаке обменного интеграла J . Эта теорема справедлива для бесконечно длинной цепочки, в то время как цепочку, состоящую из нескольких десятков или сотен атомов, очевидно,

нельзя считать бесконечно длинной. В случае цепочек конечной длины несколько изменяется и само понятие критической температуры T_C . Для систем, состоящих из небольшого числа атомов, параметр порядка $\eta \in [0, 1]$ не обращается в нуль ни при какой температуре, поэтому критической считают температуру, при которой достигает максимума величина $|d\eta/dT|$ [10, 20]. При этом очевидно, что если выполняется условие $\tau_{walk} \ll \tau_+$, то параметр порядка η оказывается близким к единице, т. е. температура T_{max} , найденная из формулы (10), всегда оказывается меньше критической [9]. Таким образом, из условия применимости нашей модели $T < T_{max}$ следует, что мы работаем с цепочками в антиферромагнитной фазе $T < T_C$.

3.3. Численные оценки времен перемагничивания

Полученные выше формулы (7) и (8) могут быть использованы для ответа на вопрос о том, какими характеристиками должна обладать антиферромагнитная цепочка атомов для того, чтобы ее можно было использовать для хранения информации. Рассмотрим сначала зависимость τ и τ^* от температуры. На рис. 2а представлены зависимости $\tau(T)$ и $\tau^*(T)$ для цепочки из $N = 100$ атомов. Параметры J и K выбраны типичными для одномерных атомных цепочек [20–23]: $J = 30$ мэВ и $K = 5$ мэВ. Будем считать, что для того чтобы цепочку можно было считать стабильным битом информации, необходимо, чтобы время ее спонтанного перемагничивания превышало 1 год $\approx 3 \cdot 10^7$ с. На рис. 2а мы видим, что это условие выполняется при достаточно низких температурах, $T < 22$ К. При понижении температуры возрастает также и время τ^* , которое, наоборот, хотелось бы сделать как можно меньшим. При температуре $T = 22$ К время $\tau^* = 6.8 \cdot 10^{-5}$ с, т. е. оказывается неприемлемо большим для технических применений. На рис. 2б представлены зависимости τ и τ^* от длины цепочки при $T = 20$ К, $J = 30$ мэВ и $K = 5$ мэВ. На рисунке видно, что при изменении длины цепочки от 10 до 1000 атомов время τ меняется в интервале $10^8 \div 10^{10}$ с > 1 год. При этом время τ^* может быть уменьшено до величины $6.6 \cdot 10^{-7}$ с при уменьшении длины цепочки до 10 атомов.

На рис. 3 показано, как меняются времена перемагничивания τ и τ^* цепочки из $N = 100$ атомов при температуре $T = 20$ К при варьировании параметров J и K . Поскольку изменение обменного интеграла J влияет в основном на частоту ν_1 , не входящую в выражение (8), время перемагничивания τ^*

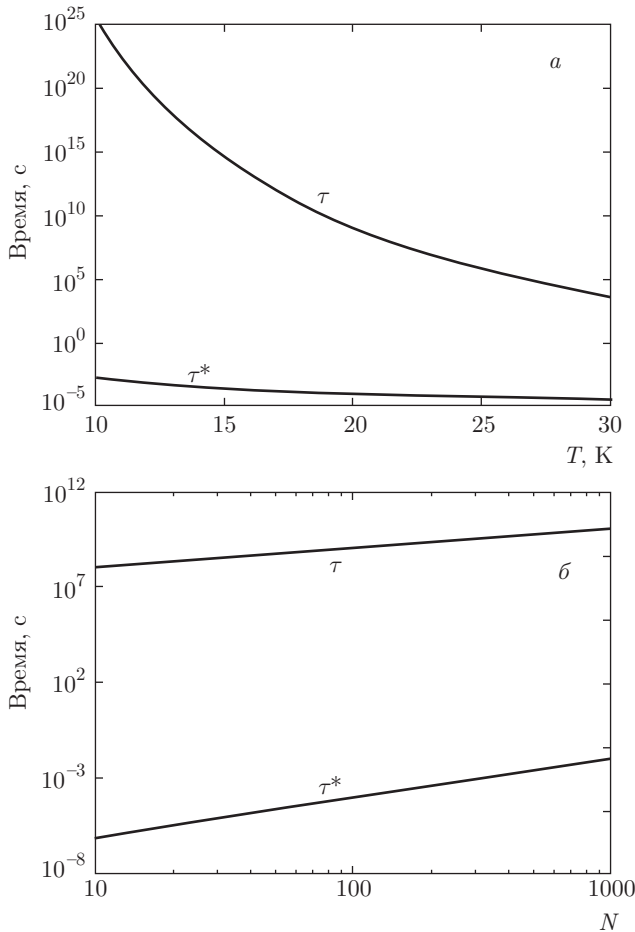


Рис. 2. Зависимость времен перемагничивания τ и τ^* от температуры T (а) и от длины N антиферромагнитной цепочки (б). Параметры гамильтониана (1): $J = 30$ мэВ и $K = 5$ мэВ

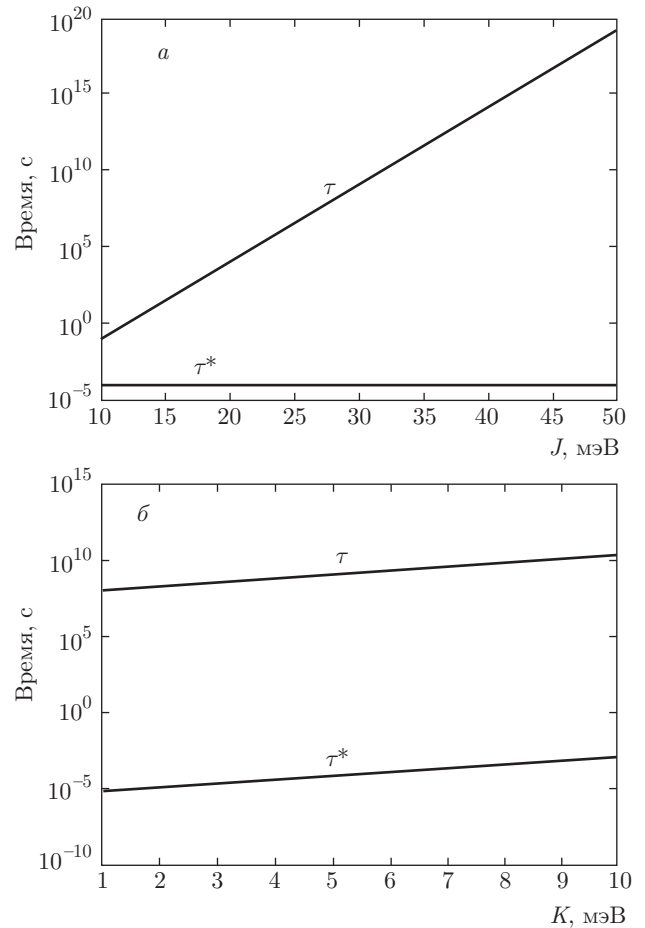


Рис. 3. Зависимость времен перемагничивания τ и τ^* антиферромагнитной цепочки из 100 атомов при температуре 20 К от обменного интеграла J (а) и от энергии магнитной анизотропии K (б)

практически не зависит от J . С другой стороны, как видно на рис. 3а, время τ может быть существенно увеличено при увеличении J . Как видно на рис. 3б, изменение энергии магнитной анизотропии атомов в интервале 1–10 мэВ приводит к изменению времен τ и τ^* на два порядка. При этом отношение τ/τ^* остается практически неизменным. Анализируя рис. 2, 3, мы приходим к выводу, что для того чтобы антиферромагнитная цепочка могла быть использована в качестве бита информации, она должна быть достаточно короткой, характеризоваться большим обменным интегралом J и низкой энергией магнитной анизотропии K . При этом нужно помнить, что формулы (7) и (8), полученные в однодоменном приближении, остаются справедливыми только при условии $KN - 2J \gg k_B T$.

3.4. Учет краевых эффектов

Далее обобщим формулы (7) и (8) на случай, когда обменный интеграл J' и энергия магнитной анизотропии K' крайних атомов цепочки отличны от параметров J и K остальных атомов [22, 23]. В этом случае частоты образования и исчезновения доменной стенки ν'_1 и ν'_2 вычисляются по формулам (4), (5), в которых нужно сделать замену $J \rightarrow J'$, $K \rightarrow K'$. Частота перемещения доменной стенки между положениями $i = 2$ и $i = N - 2$ по-прежнему вычисляется по формуле (6). Кроме того, нужно учесть еще две частоты: частоту перемещения доменной стенки из положения $i = 1$ в положение $i = 2$ (или из $i = N - 1$ в $i = N - 2$)

$$\nu'_3 = \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K + \Delta J)^2}{4Kk_B T}\right) \text{ при } 2K > |\Delta J|, \tag{12}$$

$$\nu'_3 = \nu_0 \frac{\exp(-2\Delta J/k_B T)}{1 + \exp(-2\Delta J/k_B T)} \text{ при } 2K \leq |\Delta J|$$

и частоту перемещения в обратную сторону

$$\nu''_3 = \nu_0 \exp\left(-\frac{(2K - \Delta J)^2}{4Kk_B T}\right) \text{ при } 2K > |\Delta J|, \tag{13}$$

$$\nu''_3 = \nu_0 \frac{\exp(2\Delta J/k_B T)}{1 + \exp(2\Delta J/k_B T)} \text{ при } 2K \leq |\Delta J|,$$

где $\Delta J = |J| - |J'|$.

Далее частоту перемещения доменной стенки из положения i в положение $j = i \pm 1$ будем обозначать $\nu_{i \rightarrow j}$, тогда

$$\nu_{0 \rightarrow 1} = \nu_{N \rightarrow N-1} = \nu'_1, \tag{14}$$

$$\nu_{1 \rightarrow 0} = \nu_{N-1 \rightarrow N} = \nu'_2, \tag{15}$$

$$\nu_{1 \rightarrow 2} = \nu_{N-1 \rightarrow N-2} = \nu'_3, \tag{16}$$

$$\nu_{2 \rightarrow 1} = \nu_{N-2 \rightarrow N-1} = \nu''_3, \tag{17}$$

$$\nu_{2 \rightarrow 3} = \nu_{3 \rightarrow 2} = \dots$$

$$\dots = \nu_{N-3 \rightarrow N-2} = \nu_{N-2 \rightarrow N-3} = \nu_3. \tag{18}$$

Обозначим τ_i^1 среднее время нахождения доменной стенки в i -м положении. Очевидно, что

$$\tau_0^1 = \tau_N^1 = \frac{1}{\nu'_1}, \tag{19}$$

$$\tau_1^1 = \tau_{N-1}^1 = \frac{1}{\nu'_2 + \nu'_3}, \tag{20}$$

$$\tau_2^1 = \tau_{N-2}^1 = \frac{1}{\nu''_3 + \nu_3}, \tag{21}$$

$$\tau_3^1 = \dots = \tau_{N-3}^1 = \frac{1}{2\nu_3}. \tag{22}$$

Для вычисления среднего времени спонтанного перемагничивания τ' будем считать, что в начальный момент времени доменная стенка находилась в положении $i = 0$. Следуя методике [9] вычисления среднего времени перемагничивания, введем матрицу переходов T размером $N \times N$, элементы которой равны

$$T_{ij} = \tau_j^1 \nu_{j \rightarrow i}. \tag{23}$$

В нашем случае матрица T имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 1-a' & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a' & 0 & 1/2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 & a' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b & 0 \end{pmatrix}, \tag{24}$$

где $a' = \nu'_3/(\nu'_2 + \nu'_3)$, $b = \nu''_3/(\nu''_3 + \nu_3)$. Поскольку в начальный момент времени доменная стенка находится в положении $i = 0$, вероятность ее обнаружения в первых N положениях равна $P_i^{init} = \delta_{0i}$. Выполнив вычисления аналогичные [9], получим

$$\tau' = \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{N-5}{2\nu_3} + \frac{b}{1-b} \left(\frac{1}{\nu'_3} + \frac{1}{\nu''_3} \right) \right] \times \right. \\ \left. \times \left[N - \frac{2c}{1-a'} \right] + \frac{1}{a'\nu'_1} \frac{b}{1-b} [N(1-a') - 2c] \right\}, \tag{25}$$

где $c = 3 - 1/b - 2a'$. Дополнительный множитель $1/2$ связан с тем, что спонтанное перемагничивание может начаться с одинаковой вероятностью с любого из двух концов цепочки. Легко убедиться в том, что если свойства граничных атомов не отличаются от свойств атомов в середине цепочки, то мы вернемся к формуле (7). Действительно, при $J' = J$ и $K' = K$ получаем $\nu'_1 = \nu_1$, $\nu'_2 = \nu_2$, $\nu'_3 = \nu''_3 = \nu_3$, $a' = a$, $b = 1/2$, $c = 1 - 2a$, и формула (25) переходит в (7).

Вычислим теперь время τ'^* перемагничивания цепочки при взаимодействии одного из крайних ее атомов с СТМ-иглой. Для определенности будем считать, что СТМ-игла находится над первым атомом цепочки. Мы предполагаем, что, во-первых, доменная стенка переходит в положение $i = 1$, т.е. изменяется вероятность ее обнаружения в начальный момент времени $P_i^{init} = \delta_{1i}$, а во-вторых, доменная стенка не может вернуться в положение $i = 0$, т.е. $\nu_{1 \rightarrow 0} = 0$. Тогда матрица переходов T , вычисленная по формуле (23), будет представлять собой следующую матрицу размером $(N - 1) \times (N - 1)$:

$$\begin{pmatrix} 0 & b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1/2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-b & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1/2 & 0 & a' \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b & 0 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Повторяя с этой матрицей процедуру вычисления среднего времени перемагничивания, получим

$$\tau'^* = \left[\frac{N-5}{2\nu_3} + \frac{b}{1-b} \left(\frac{1}{\nu_3'} + \frac{1}{\nu_3''} \right) \right] \times \left[N - \frac{2c}{1-a'} \right]. \quad (27)$$

Здесь множитель 1/2 не возникает, поскольку перемагничивание цепочки начинается с того конца цепочки над которым находится СТМ-игла. Сравнивая формулы (25) и (27), получаем следующее соотношение между временами τ' и τ'^* :

$$\tau' = \frac{1}{2} \left\{ \tau'^* + \frac{1}{a'\nu_1'} \frac{b}{1-b} [N(1-a') - 2c] \right\}. \quad (28)$$

Легко убедиться, как мы это делали выше, в том, что при $J' = J$ и $K' = K$ формулы (27) и (28) переходят соответственно в (8) и (9).

3.5. Численные оценки влияния краевых эффeктов

Для того чтобы понять, насколько сильно граничные атомы могут влиять на времена перемагничивания τ и τ^* , сделаем численные оценки для рассмотренного выше случая: $N = 100$, $T = 20$ К, $J = 30$ мэВ, $K = 5$ мэВ. Начнем со случая $K' = K$. На рис. 4а представлены зависимости отношений τ'/τ и τ'^*/τ^* от параметра J' слабо отличающегося от J . Мы видим, что отношение τ'/τ монотонно возрастает при увеличении J' , в то время как отношение τ'^*/τ^* имеет минимум при $J' \approx J$. При этом небольшие отклонения $|J' - J| < 2$ мэВ не приводят к большому изменению времен τ и τ^* , однако при больших изменениях $|J' - J|$ отклонения τ' и τ'^* от τ и τ^* становятся существенными и должны быть учтены при оценке времени перемагничивания. С другой стороны, если мы рассмотрим случай $J' = J$, то изменение K' не оказывает никакого влияния на времена τ и τ^* , при условии $K' < J'/2$, как это следует из формулы (4). Поскольку в большинстве практиче-

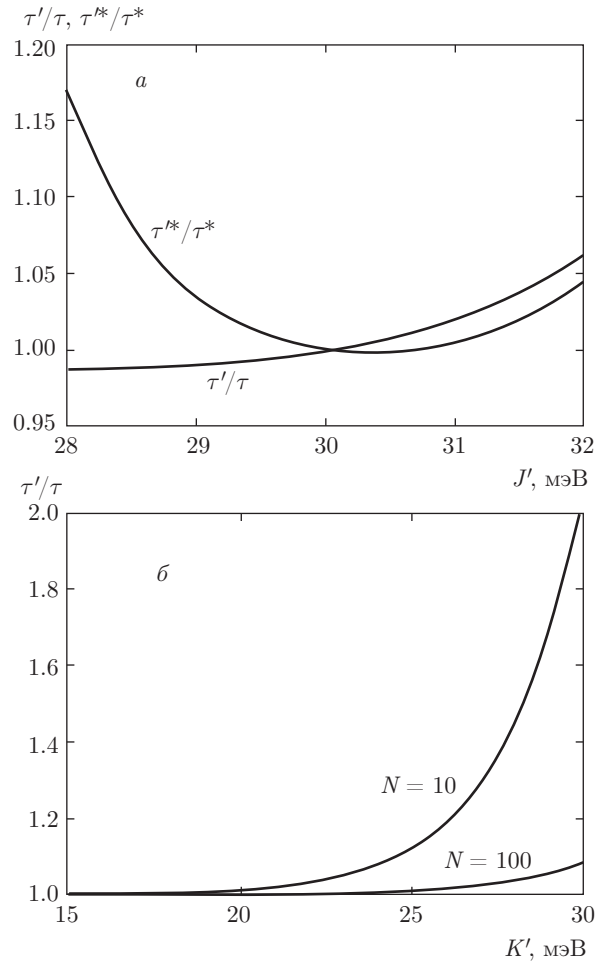


Рис. 4. Зависимость отношений времен перемагничивания τ'/τ и τ'^*/τ^* от параметра J' для цепочки из $N = 100$ атомов и $K' = K$ (а), τ'/τ от параметра K' для цепочек из $N = 10$ и $N = 100$ атомов и $J' = J$ (б). Для обоих графиков $T = 20$ К, $J = 30$ мэВ и $K = 5$ мэВ

ски важных случаев условие $K' < J'/2$ выполняется, можно сказать, что энергия магнитной анизотропии крайних атомов цепочки практически никогда не вносит вклада в оценку времен перемагничивания τ и τ^* . Если же $K' > J'/2$, то и в этом случае влияние K' на времена перемагничивания невелико. В качестве примера на рис. 4б изображены зависимости τ'/τ от K' для цепочек из $N = 10$ и $N = 100$ атомов. Из проведенного численного анализа можно сделать заключение, что при нашем выборе параметров $J = 6K$ времена перемагничивания зависят от J' в существенно большей степени, чем от K' .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученная нами формула (25) для времени τ' спонтанного перемагничивания в равной степени

справедлива как для антиферромагнитных, так и для ферромагнитных цепочек. Таким образом, мы обобщили полученную ранее [9] формулу (7) на случай, когда параметры J' и K' для крайних атомов отличаются от параметров J и K для атомов, находящихся в середине цепочки. Численный анализ показал, что в случае, когда J в несколько раз превышает K , краевыми эффектами для энергии магнитной анизотропии можно пренебречь, даже в том случае, когда $|K' - K| \sim K$, в то же время, краевые эффекты для обменного интеграла оказываются существенными и должны быть учтены уже для $|J' - J| \sim 0.1J$. Следует отметить, что для других соотношений параметров J и K краевые эффекты для энергии магнитной анизотропии также могут оказаться существенными.

Необходимо подчеркнуть, что сделанные предположения о характере взаимодействия цепочки атомов с СТМ-иглой являются довольно грубыми. Поэтому формулы (8) и (27) дают менее точную оценку времени перемагничивания в результате взаимодействия с СТМ-иглой, чем формулы (7) и (25) для времени спонтанного перемагничивания. В рамках сделанных предположений, формулы (8) и (27) могут быть использованы также и для оценки времени перемагничивания ферромагнитных цепочек. Однако в последнем случае более эффективным оказывается перемагничивание цепочки в однородном магнитном поле, рассмотренное в работе [9].

Наконец отметим, что разработанный нами метод оценки времени перемагничивания антиферромагнитных цепочек может быть с некоторыми осложнениями использован и для более перспективных антиферромагнитных наноструктур, таких как двойные цепочки атомов [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, *Nature Nanotechnology* **11**, 231 (2016).
2. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz, D. M. Eigler, and A. J. Heinrich, *Science* **335**, 196 (2012).
3. J.-P. Gauyacq, S. M. Yaro, X. Cartoixá, and N. Lorente, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 087201 (2013).
4. K. Tao, O. P. Polyakov, and V. S. Stepanyuk, *Phys. Rev. B* **93**, 161412(R) (2016).
5. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, *Nature* **416**, 301 (2002).
6. R. Cao, Z. Zhong, J. Hu, X. Zhang, B. Miao, L. Sun, B. You, D. Wu, A. Hu, W. Zhang, and H. Ding, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 081608 (2013).
7. P. Ferstl, L. Hammer, C. Sobel, M. Gubo, K. Heinz, and M. A. Schneider, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 046101 (2016).
8. J.-P. Gauyacq and N. Lorente, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 455301 (2015).
9. С. В. Колесников, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 668 (2016).
10. К. М. Тсысар, S. V. Kolesnikov, and A. M. Saletsky, *Chin. Phys. B* **24**, 097302 (2015).
11. С. В. Колесников, К. М. Цысарь, А. М. Салецкий, *ФТТ* **57**, 1492 (2015).
12. Y. Li and B.-G. Liu, *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).
13. R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
14. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
15. F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* **93A**, 464 (1983).
16. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988).
17. W. Wernsdorfer, R. Cle'rac, C. Coulon, L. Lecren, and H. Miyasaka, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237203 (2005).
18. A. S. Smirnov, N. N. Negulyaev, W. Hergert, A. M. Saletsky, and V. S. Stepanyuk, *New J. Phys.* **11**, 063004 (2009).
19. N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
20. A. G. Syromyatnikov, S. V. Kolesnikov, A. M. Saletsky, and A. L. Klavsyuk, *Mater. Lett.* **179**, 69 (2016).
21. M. C. Urdaniz, M. A. Barral, A. M. Llois, and A. Saúl, *Phys. Rev. B* **90**, 195423 (2014).
22. S. Pick, P. A. Ignatiev, A. L. Klavsyuk, W. Hergert, V. S. Stepanyuk, and P. Bruno, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 446001 (2007).
23. B. Lazarovits, L. Szunyogh, P. Weinberger, and B. Újfalussy, *Phys. Rev. B* **68**, 024433 (2003).