Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 12, с. 833 – 847

Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор)

И. С. Лобанов[+*], *М. Н. Поткина*[+*], *В. М. Уздин* [+*1)]

[+]*Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, 199034 С.-Петербург, Россия*

[*]*Университет ИТМО, физический факультет, 197101 С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 8 мая 2021 г.
После переработки 18 мая 2021 г.
Принята к публикации 20 мая 2021 г.

Представлен статистический подход для оценки устойчивости магнитных состояний нано- и микроструктур относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий. Он предполагает построение многомерной энергетической поверхности системы, поиск на ней путей с минимальным перепадом энергии между локально устойчивыми состояниями, расчет частот магнитных переходов между соответствующими магнитными конфигурациями при произвольных температурах в гармоническом приближении теории переходного состояния. Приведены результаты исследования времен жизни квазидвумерных магнитных структур с топологической защитой. Показано влияние магнитных характеристик среды, ограниченной геометрии образца, немагнитных дефектов и внешнего магнитного поля на времена жизни топологических магнитных состояний.

DOI: 10.31857/S1234567821120090

1. Введение. Внутренняя структура, динамика и устойчивость магнитных состояний являются важнейшими вопросами фундаментального наномагнетизма и новых технологий в спинтронике. Принципиальными проблемами здесь являются уменьшение характерных размеров магнитных элементов, увеличение скорости магнитной записи и передачи информации, энергоэффективность разрабатываемых систем. В любом устройстве на основе магнитных материалов во время работы происходят процессы перемагничивания и изменение магнитных состояний системы в целом или ее частей. Эти процессы зависят от пространственного размера элементов. С одной стороны, их уменьшение позволяет менять магнитное состояние, прикладывая меньшее воздействие, с другой – магнитные состояния становятся менее устойчивыми. Взаимодействие с тепловым резервуаром может привести к их самопроизвольному изменению и потере информации, содержащейся в магнитной конфигурации. Таким образом, теоретический расчет устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций и случайных возмущений, количественной оценкой которого могут служить времена жизни магнитных состояний, выходит на первый план. Для магнитной памяти, например, желательно, чтобы время жизни соответствующих магнитных состояний составляло десятки лет при комнатной температуре. При этом пространственный размер отдельного бита должен быть как можно меньше, составляя от одного до нескольких десятков нанометров. Создание магнитных носителей, в которых могут существовать такие локализованные структуры, – сложная задача, имеющая большой теоретический и практический интерес.

Один из подходов к решению этой задачи заключается в использовании "топологических" магнитных текстур, имеющих отличный от нуля "топологический заряд" q [1, 2]. Для квазидвумерных систем с непрерывным распределением намагниченности

$$q = \frac{1}{4\pi}\iint \mathbf{S}(\mathbf{r})\cdot\left[\frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial x}\times\frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial y}\right]dx\,dy,$$

где $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ – единичный трехмерный вектор, направленный вдоль намагниченности в точке $\mathbf{r}$. Топологический заряд – целое число, показывающее, сколько раз вектор $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ покрывает единичную сферу. Он сохраняется при непрерывном изменении намагниченности и, таким образом, переход из состояния с $q \neq 0$ в состояние $q = 0$, например, ферромагнитное (ФМ), при непрерывном изменении намагниченности невозможен. Это должно обеспечить "топологическую защиту" магнитных структур относительно тепловых

1)e-mail: v_uzdin@mail.ru

флуктуаций [3], и делает их перспективными кандидатами для создания сверхплотной и быстрой магнитной памяти нового поколения, элементов искусственных нейронных сетей и других спинтронных устройств [4, 5].

Однако в реальных магнитных системах, где магнитные моменты локализованы на узлах дискретной кристаллической решетки, о топологической защите можно говорить лишь в рамках приближенного описания, и возникает проблема численного расчета времен жизни таких магнитных состояний.

Иерархия масштабов, характерная для магнитных систем, делает задачу оценки времен жизни чрезвычайно трудной для стохастического моделирования. Частоты осцилляций отдельных магнитных моментов, образующих магнитные состояния, даже на наномасштабе на 10–20 порядков могут превосходить частоты переходов между самими состояниями [6]. Поэтому численное решение уравнений динамики для магнитных моментов и стандартные методы Монте-Карло не позволяют адекватно рассчитывать времена жизни и частоты магнитных переходов при температурах, представляющих практический интерес. Здесь, однако, может быть использована теория переходного состояния (ТПС) для магнитных степеней свободы [7, 8]. Этот статистический подход предполагает рассмотрение многомерной энергетической поверхности системы, как функции параметров, задающих направление всех магнитных моментов, составляющих систему, поиск на ней локальных минимумов, соответствующих основному и метастабильным состояниям системы, и путей с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ), задающих наиболее вероятные механизмы магнитных переходов. Максимум вдоль ПМПЭ соответствует седловой точке первого порядка на энергетической поверхности, которая определяет энергетический барьер между состояниями. В гармоническом приближении, когда форма энергетической поверхности аппроксимируется в минимумах и седловой точке квадратичной функцией по всем переменным, для частот магнитных переходов удается получить выражение, соответствующее закону Аррениуса. Такой подход был первоначально использован для расчета скоростей химических реакций [9], диффузии атомов на поверхности при эпитаксиальном росте [10], а сейчас является одним из наиболее признанных методов оценки частот магнитных переходов в наноструктурах [11, 12, 13, 14]. Хотя эта теория успешно используется для анализа устойчивости топологических магнитных структур, целый ряд принципиальных вопросов остается открытым, как с точки зрения разработки самого теоретического метода, так и его применения к конкретным магнитным структурам. Некоторые из этих вопросов обсуждаются в настоящей работе.

В разделе 2 рассмотрен вопрос о построении многомерной энергетической поверхности системы и поиске на ней ПМПЭ между локально устойчивыми состояниями. Наряду с "методом подталкивания упругой лентой" и методом струн, представлен метод усеченного ПМПЭ, позволяющий искать седловые точки первого порядка на поверхностях с миллионами степеней свободы и, таким образом, рассчитывать структуры микронного масштаба с атомным разрешением [15], и метод следования минимальной моде для магнитных систем [16], дающий возможность искать седловые точки первого порядка, если задано только начальное состояние, но конечное состояние неизвестно. С помощью этого метода иногда удается найти механизмы перехода в неожиданные конечные состояния, хотя он и более сложен, чем алгоритмы, используемые в случаях, где конечное состояние предопределено.

Раздел 3 посвящен методам расчета предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса для времен жизни магнитных структур. Хотя в гармоническом приближении ТПС для предэкспоненциального фактора может быть получен аналитический ответ, он содержит детерминант матрицы Гессе в седловой точке и локальных минимумах на энергетической поверхности. Его расчет для размерности энергетической поверхности миллион и больше – сложная задача, которая, однако, может быть решена, если взаимодействия короткодействующие и матрица Гессе разреженная [17]. В разделах 4, 5 и 6 представлены результаты расчетов энергетических барьеров и времен жизни различных топологических систем: скирмионов разного размера в ферро- и антиферромагнитных средах, скирмионов на магнитных дорожках, в присутствии немагнитных примесей и внешнего магнитного поля, антискирмионов. В заключении подводятся итоги и представлены некоторые направления развития теоретического подхода для описания более широкого класса систем.

2. Энергетическая поверхность для магнитных систем. Минимумы и седловые точки. Для описания квазидвумерных топологических магнитных структур будем использовать обобщенную модель Гейзенберга, в рамках которой энергетическая поверхность задается следующим выражением:

$$E = -\sum_{\langle i,j\rangle}(J\mathbf{S_i}\cdot\mathbf{S_j}+\mathbf{D_{ij}}\cdot[\mathbf{S_i}\times\mathbf{S_j}])-\sum_{i}(\mu\mathbf{S_i}\cdot\mathbf{B}+KS_{i,z}^{2}). \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{S_i}$ – трехмерный вектор единичной длины, направленный вдоль магнитного момента на узле i. Параметры гейзенберговского обмена J и вектора Дзялошинского–Мория (ДМ) $\mathbf{D_{ij}}$ будем считать отличными от нуля только для моментов на соседних узлах. Ось анизотропии $\mathbf{e_z}$ и магнитное поле $\mathbf{B}$ перпендикулярны плоскости системы. Константы анизотропии $K > 0$ и величины магнитных моментов μ одинаковы на всех узлах решетки.

Магнитная конфигурация задается набором всех векторов $\mathbf{S_i}$. Энергетическая поверхность представляет собой функционал энергии от всех переменных, которые задают направления $\mathbf{S_i}$. Такими переменными могут служить полярные θ_i и азимутальные ϕ_i углы, задающие направление каждого вектора. Если число узлов составляет 10^6 (что соответствует, например, системе 1000 на 1000 узлов на квадратной решетке), то размерность энергетической поверхности составит $2{\cdot}10^6$. При этом вблизи полюсов $\theta_i = 0, \pi$ угол ϕ_i плохо определен, что усложняет проведение расчетов. Чтобы обойти эту трудность, можно использовать стереографическую проекцию [18] или выбрать в качестве координат ортогональные матрицы [19]. Ниже будут приведены результаты расчетов в декартовых координатах в касательном пространстве к многообразию $\|\mathbf{S_i}\| = 1$. При этом для корректного задания матрицы Гессе необходимо ввести множители Лагранжа [17].

В выражение (1) не включена энергия магнитного диполь-дипольного взаимодействия, которое может играть существенную роль для стабилизации топологических структур микронного масштаба [20]. Для наноразмерных структур этот вклад, как показывают расчеты [21], может быть учтен перенормировкой параметра анизотропии при сохранении вида ПМПЭ. Все методы, обсуждаемые далее, применимы и для систем с явным учетом дипольного вклада, хотя численные расчеты больших систем более трудоемки из-за дальнодействующего характера взаимодействия.

Поиск локальных минимумов на энергетической поверхности, соответствующих основному и метастабильным состояниям, может быть проведен стандартными методами, например, с использованием метода сопряженных градиентов [19] или метода Ньютона и его производных. Более сложна задача поиска седловых точек первого порядка, отвечающих минимуму по всем направлениям, кроме одного, и максимуму вдоль оставшегося направления, но именно эти точки определяют энергетические барьеры между локально устойчивыми состояниями. Седловые точки можно найти, как максимум вдоль ПМПЭ, который соединяет локально устойчивые магнитные состояния. Если эти состояния заранее известны, можно использовать следующие вычислительные методы:

2.1. Геодезический метод подталкивания упругой лентой (ГМПУЛ) [22]. Путь аппроксимируется дискретным набором образов состояний системы, $p_0, \dots p_N$, которым сопоставляются точки на энергетической поверхности, где p_0 и p_N соответствуют начальному и конечному локально устойчивым состояниям. Расстояние вдоль пути называют координатой реакции. За начальное приближение пути часто берется геодезическая между p_0 и p_N. В каждой точке пути p_n определяется касательный вектор τ^n с помощью следующей процедуры [23]. На участках возрастания и убывания энергии вдоль пути задается вектор $\hat{\tau}^n$:

$$\hat{\tau}^n = \begin{cases} \tau^n_+, & E(p_{n+1}) > E(p_n) > E(p_{n-1}), \\ \tau^n_-, & E(p_{n+1}) < E(p_n) < E(p_{n-1}), \end{cases}$$

где $\tau^n_+ = p_{n+1} - p_n$ и $\tau^n_- = p_n - p_{n-1}$. Если $E(p_n)$ – локальный максимум или минимум вдоль пути, то $\hat{\tau}^n$ определяется взвешенной суммой τ^n_+ и τ^n_-, которая непрерывно переходит к приведенным выше соотношениям, когда зависимость энергии вдоль пути становится монотонной. За касательный вектор τ^n выбирается единичный вектор вдоль $\hat{\tau}^n$.

Образы соединяются искусственными "пружинами", которые не позволяют им скатиться в минимумы по энергетической поверхности. Жесткость пружин в большинстве реализаций ГМПУЛ выбирается одинаковой для всех образов. Однако увеличение жесткости пружин для образов, находящихся вблизи максимума энергии вдоль пути, увеличивает стабильность алгоритмов, особенно квазиньютоновского типа. В этом случае образ с наибольшей энергией "подтягивает" к себе остальные образы системы, обеспечивая лучшее разрешение вблизи седловой точки, которая представляет основной интерес для оценки устойчивости относительно тепловых флуктуаций [24, 25]. Силы упругости должны быть сопоставимы по величине с градиентом энергии, чтобы обеспечить сходимость к ПМПЭ.

Далее проводится релаксация системы образов под действием проекции сил упругости f_n на направление касательной к пути и проекции антиградиента энергии на направление, ортогональное к пути:

$$F_n = -\nabla E(p_n) + (\nabla E(p_n) \cdot \tau^n)\tau^n + f_s \cdot \tau^n,$$

где $f_n = k[|p_{n+1} - p_n| - |p_n - p_{n-1}|]$ и через $|p_{n+1} - p_n|$ обозначено расстояние между $n+1$ и n образами вдоль пути.

Наличие пружин обеспечивает почти равномерное распределение образов вдоль пути в равновесном состоянии. В подпространстве, ортогональном касательной к пути, образы расположены в минимуме и поэтому имеют максимальный статистический вес среди близких состояний. Введение искусственных подталкивающих пружинок дало название методу “подталкивания упругой лентой”. Алгоритм ГМПУЛ также учитывает постоянство длины векторов $\mathbf{S_i}$, так что касательные вектора к пути проецируются на касательное подпространство к магнитным моментам. Он может быть использован и в рамках моделей коллективизированного магнетизма, когда величины магнитных моментов определяются в результате самосогласованных расчетов при фиксированных направлениях на каждом узле решетки [26, 27].

Когда ПМПЭ найден, образ с максимальной энергией дает оценку для энергии седловой точки. Для более точного определения этой энергии можно использовать метод “взбирающегося образа” (*climbing image*) [24], позволяющий точно определить седловую точку. В этом случае выбирается образ $p_{\max}$ с наибольшей энергией вдоль пути, убираются силы упругости искусственных пружин, действующие на него, и включается дополнительная сила, равная градиенту энергии вдоль пути, которая заставляет образ двигаться в направлении увеличения энергии:

$$F_{\max} = -\nabla E(p_{\max}) + 2(\nabla E(p_{\max}) \cdot \tau^{\max})\tau^{\max}.$$

Правило оптимизации других образов вдоль пути не изменяется, а сами образы служат для определения одной степени свободы, для которой выполняется максимизация энергии. Поскольку цепочка образов сходится к ПМПЭ, она дает хорошее приближение энергетической поверхности вдоль координаты реакции вблизи седловой точки. После того, как максимальная энергия вдоль пути найдена, плотность образов по разные стороны от седловой точки может быть различна. Можно выбрать два или более образов, которые “взбираются” к седловой точке, если требуется исследовать ее окрестность более подробно.

ГМПУЛ был впервые использован для расчета активационного барьера для коллапса скирмиона в работе [22]. С тех пор ГМПУЛ использовался для более детального анализа механизмов исчезновения [21], а также исследования взаимодействия скирмионов с магнитным полем, границами образца и дефектами [28, 29]. ГМПУЛ сейчас стал стандартным методом исследования устойчивости двумерных систем с магнитными скирмионами [30–32] и трехмерных топологических систем [18, 33] (хотя не всегда правильно реализован, см. [34]).

2.2. Метод струн [35, 36] основан на эволюции гладких кривых с внутренней параметризацией (струн), динамика которых приводит к ПМПЭ между локально устойчивыми начальным и конечным состояниями. Он аналогичен ГМПУЛ, но вместо упругих пружин, равномерно распределяющих образы вдоль пути, здесь используется другой алгоритм. Сначала образы смещаются под действием поперечной составляющей реальной силы. Затем путь аппроксимируется, например, при помощи интерполяции сплайнами, находится его длина и положение образов корректируется так, чтобы они были расположены на одинаковом расстоянии друг от друга вдоль пути. Алгоритм “взбирающегося образа” здесь также может быть реализован для точного определения положения седловой точки.

2.3. Метод следования минимальной моде [16, 37] может быть использован, когда известно только начальное состояние системы, соответствующее локальному минимуму на энергетической поверхности. Он позволяет найти ближайшие седловые точки первого порядка, определяющие сценарии перехода в различные конечные состояния, которые априори неизвестны. Начиная с точки, близкой к минимуму, на каждом шаге итерации система перемещается в направлении собственного вектора гессиана энергии, соответствующего минимальному собственному числу. При этом в подпространстве, ортогональном этому вектору, проводят релаксацию к состоянию с минимальной энергией. Поиск минимального собственного значения не требует больших вычислительных затрат и может быть проведен, например, с помощью алгоритма Ланцоша [38]. Вычисления минимальной моды можно избежать, если релаксировать одновременно два состояния, сохраняя расстояние между ними, как это делается в методе димера. Тогда эти состояния упорядочиваются вдоль соответствующего минимальной моде собственного вектора [39]. Когда минимальное собственное число становится отрицательным, метод следования минимальной моде реализует процедуру, аналогичную алгоритму “взбирающегося образа”, обеспечивая сходимость к седловой точке первого порядка. Выбирая разные начальные состояния вблизи минимума, можно получить несколько седловых точек, каждая из которых соответствует определенному механизму ухода из начального состояния. Этот метод, реализованный для магнитных систем [16], позволил получить магнитный переход, соответствующий образованию двух скирмионов из одного, сопровождающийся удвоением топологического заряда системы. Энергия активации такого процесса оказалась сравнима с энергией активации для коллапса скирмиона.

2.4. Метод усеченного ПМПЭ [15] позволяет найти часть полного пути, включающую седловую точку. Именно седловая точка и ее окрестность важны для определения частот перехода между магнитными конфигурациями в рамках теории переходного состояния. Для коллапса скирмиона конфигурация состояния в седловой точке представляет собой на атомном масштабе относительно небольшую неколлинеарную структуру даже для скирмионов микронного масштаба. Это позволяет получать активационные барьеры и времена жизни таких состояний без расчета полного ПМПЭ, который оказывается трудно найти из-за того, что вдали от седловой точки размер структуры становится большим и требуется слишком большой объем компьютерной памяти.

В рамках этого метода выделяется один из образов, называемый якорем, например с максимальной энергией, и рассматривается часть пути фиксированной длины, включающая этот образ. Необходимо, чтобы часть образов выделенного участка находилась с одной стороны, а часть – с другой от гребня, разделяющего начальное и конечное состояния на энергетической поверхности. На концах рассматриваемого отрезка пути ставится условие обращения в нуль только поперечной составляющей градиента энергии. После этого проводится оптимизация пути, например, как в методе струн, и перераспределение образов на участке. В отличии от метода струн в методе усеченного ПМПЭ образы перераспределяются по части пути фиксированной длины вокруг седловой точки. Якорь не участвует в перераспределении, а на следующей итерации в качестве якоря выбирается ближайший к нему образ.

В качестве якоря может быть выбрано одно из локально устойчивых состояний, например, начальное или конечное. Тогда его положение не меняется в процессе работы алгоритма, но необходимо, чтобы второй конец участка пути находился за областью переходного состояния. Это требует качественного понимания формы энергетической поверхности и общей структуры переходного состояния.

В общем случае энергетическая поверхность, задаваемая обобщенной моделью гейзенберговского типа, представляет собой многообразие большой размерности, которая для реальных топологических систем, рассматриваемых на атомном масштабе, может составлять миллион и более. Для наглядного представления энергетической поверхности и понимания возможных сценариев магнитных переходов полезным является построение двумерной энергетической поверхности в предположении, что направления всех магнитных моментов можно задать, используя всего два параметра. Такой подход применялся в работе [40], где процесс перемагничивания спиновой пружины моделировался движением доменной стенки в магнитомягком магнетике, а параметрами, задающими магнитную конфигурацию, служили положение и ширина доменной стенки. Для топологических магнитных структур, таких как скирмионы, существуют аналитические выражения, приближенно описывающие профиль скирмиона и его магнитную конфигурацию, полученные на основе сравнения с данными эксперимента [41, 42, 20]. Эти соотношения, содержащие всего несколько параметров, достаточно хорошо воспроизводят локально устойчивые скирмионные состояния. Будем считать, что и в неравновесном состоянии, при магнитных трансформациях магнитная конфигурация по-прежнему задается тем же набором параметров и только их значения меняются в процессе перехода. Тогда размерность энергетической поверхности будет равна числу таких параметров. Рассмотрим магнитные конфигурации, использованные в работе [20] в рамках модели с непрерывно распределенной намагниченностью, включающей наряду с вкладами (1) магнитное диполь-дипольное взаимодействие. Расчеты структуры, состоящей из слоев магнитного материала и тяжелого металла, проводились в приближении эффективной среды с перенормированными параметрами. Локализованное топологическое состояние задавалось тремя переменными: радиусом скирмиона R, шириной его доменной стенки Δ и углом ψ, который составляют магнитные моменты на границе скирмиона с радиальным направлением. Вклады в энергию, включая дипольное взаимодействие, могут быть оценены аналитически [20]. Это позволяет построить энергетическую поверхность системы в зависимости от R и Δ, представленную на рис. 1.

Значения параметров выбраны следующими: обменная жесткость магнитного материала $\mathcal{A} = 2.5$ пДж/м; параметр ДМ $\mathcal{D} = 6.5 \cdot 10^{-4}$ Дж/м^2; константа анизотропии $\mathcal{K} = 0.2$ пДж/м; магнитное поле $B = 0.27$ Тл; намагниченность насыщения $M_s = 0.35$ МА/м; полная толщина образца $d = 126.4$ нм. Угол ψ фиксирован и равен 0.

ПМПЭ между скирмионами разного размера представлен на рис. 1 белой линией с образами, показанными белыми кружками. Видно, что в процессе перехода от большого скирмиона к малому сначала уменьшается радиус скирмиона, а потом, уже после седловой точки, уменьшается и ширина

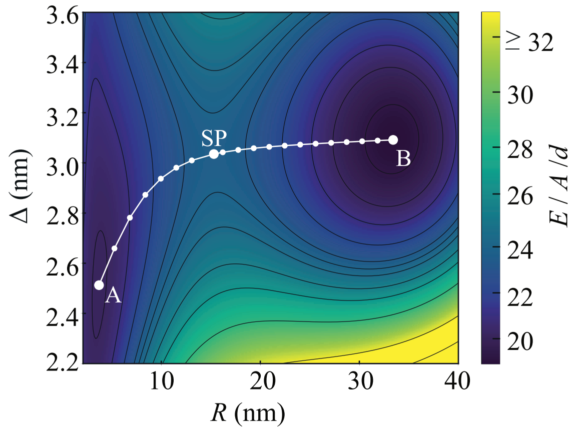

Рис. 1. (Цветной онлайн) Энергетическая поверхность для системы, определяемой радиусом скирмиона и шириной доменной стенки. Показан ПМПЭ между скирмионными состояниями, стабилизированными взаимодействием ДМ (A) и дипольным взаимодействием (B)

его доменной стенки. Отметим, что масштаб по осям на рис. 1 различен, и поэтому расстояние между образами выглядит не одинаковым.

3. Частоты магнитных переходов и времена жизни магнитных состояний. Теория переходного состояния для магнитных степеней свободы предполагает, что магнитные моменты – классические объекты с заданной энергией взаимодействия, определяемой, например, уравнением (1), и что магнитные переходы являются медленными процессами по сравнению с колебаниями отдельных моментов, так что распределение Больцмана устанавливается и поддерживается во всей доступной области на энергетической поверхности до переходного состояния включительно. Более того, траектории на энергетической поверхности предполагаются реактивными, т.е. переходят из начального в конечное состояние, пересекая разделяющую поверхность только один раз [8, 43].

В рамках ТПС для времен жизни магнитных состояний можно получить закон Аррениуса:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B \mathrm{T}}\right), \tag{2}$$

где $\Delta E = E_{sp} - E_{\min}$ определяется энергией в седловой точке E_{sp} по отношению к энергии в начальном состоянии $E_{\min}$. Если в седловой точке и минимуме, соответствующем начальному состоянию, используется гармоническое приближение для формы энергетической поверхности, то предэкспоненциальный фактор τ_0 зависит от гессианов энергии в этих точках. Матрицу Гессе $H[S^0]$ в стационарном магнитном состоянии $S^0 \equiv \{\mathbf{S_i^0}\}$ можно привести к особенно простому виду [17] в декартовых координатах в касательном пространстве к многообразию $\mathcal{M}$, определяемому условием $\|\mathbf{S_i}\| = 1$. Для этого выражение для энергии (1) представим в виде $E[S] = S\cdot(AS/2 - \mu\mathbf{B})$, где оператор A включает парные взаимодействия и анизотропию. Обозначим через $\tilde{A}$ сужение оператора A на касательное пространство к $\mathcal{M}$ в S^0. Тогда внедиагональные элементы гессиана H совпадают с матрицей $\tilde{A}$. Диагональные элементы H получаются вычитанием из матрицы $\tilde{A}$ множителей Лагранжа $\lambda_i = \mathbf{S_i^0}\cdot\nabla_{\mathbf{i}} E[S^0]$, учитывающих кривизну многообразия $\mathcal{M}$ [17]. Здесь $\nabla_{\mathbf{i}}$ обозначает градиент по координатам вектора $\mathbf{S_i}$. Отметим, что матрица оператора A разреженная, и такую же структуру имеет матрица Гессе H.

Введем собственный ортонормированный базис для гессиана H:

$$He^n = \zeta^n e^n, \quad e^n \cdot e^m = \delta_{n,m}.$$

Раскладывая малые приращения около стационарной точки S^0 в касательном пространстве $\mathcal{M}$ по этому базису

$$\Delta = \sum_{n=1}^{2N} \Delta^n e^n, \tag{3}$$

получим энергию в окрестности этой точки в виде

$$E = E^0 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{2N} \zeta^n (\Delta^n)^2 + o(\Delta^2). \tag{4}$$

Если в начальный момент система находилась в состоянии вблизи минимума $S^{\min}$ энергии, то вероятность обнаружить ее в элементе конфигурационного пространства dS можно представить в виде

$$dP = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} dS,$$

где нормировочная константа $Z = \int e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} dS$. В приближении (4) имеем:

$$Z = e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} \frac{(2\pi k_B T)^N}{\sqrt{\det H[S^{\min}]}}.$$

Число переходов из начального в конечное состояние в единицу времени $k = 1/\tau$ можно оценить как произведение вероятности попасть в окрестность седловой точки (переходного состояния) на скорость ухода из нее в направлении конечного состояния.

$$k = \frac{1}{Z}\int_{v^\perp > 0} v^\perp(\Delta) e^{-\frac{E^{sp}}{k_B T}} d\Delta\,,$$

где $v^\perp$ – компонента скорости dS/dt, ортогональная поверхности, проходящей через седловую точку и разделяющей начальное и конечное состояние. Разделяющая поверхность строится ортогонально собственному вектору e^1, соответствующему отрицательному собственному значению ζ^1. Интеграл берется по части разделяющей поверхности, где скорость направлена в сторону конечного состояния.

Эта скорость может быть найдена из уравнения Ландау–Лифшица в гармоническом приближении. Вблизи седловой точки это уравнение можно записать в виде [17]

$$\frac{d\Delta_{sp}}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} S^{sp} \times H(S^{sp})\Delta_{sp}, \tag{5}$$

где γ – гиромагнитное отношение, μ – величина магнитного момента. Компоненту скорости, ортогональную разделяющей поверхности можно найти следующим образом:

$$v^\perp = e^1_{sp} \cdot \frac{d\Delta_{sp}}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} e^1_{sp} \cdot (S^{sp} \times H[S^{sp}]\Delta_{sp}).$$

Подставляя разложение (3) для Δ, получаем:

$$v^\perp = \sum_i a^i_{sp}\Delta^i_{sp}, \quad a^i_{sp} = \frac{\gamma}{\mu}\zeta^i_{sp} e^1_{sp} \cdot (S^{sp} \times e^i_{sp}),$$

где a^i_{sp} представляет собой скорость роста перпендикулярной составляющей скорости $v^\perp$ в направлении собственного вектора гессиана энергии e^i_{sp}. Очевидно, что $a^1_{sp} = 0$.

Теперь для частоты переходов k имеем:

$$k = \frac{e^{-\frac{E_{sp}}{k_B T}}}{Z} \int_{\mathcal{Z}} \exp\left(-\frac{\sum_j \zeta^j_{sp}(\Delta^j_{sp})^2}{2k_B T}\right) \sum_i a^i_{sp}\Delta^i_{sp} d\Delta,$$

где суммирование идет по части $\mathcal{Z}$ разделяющей поверхности (т.е. $a^1_{sp} = 0$), на которой $\sum_i a^i_{sp}\Delta^i_{sp} > 0$. Если сделать замену $\Delta^j_{sp}\sqrt{\zeta^j_{sp}/k_B T} \mapsto \hat{\Delta}^j$, выражение под знаком exp приводится к виду минус квадрат длины вектора $\hat{\Delta}$, что приводит нас к интегралу Гаусса с дополнительным линейным по $\hat{\Delta}$ множителем. Введем теперь произвольный новый ортогональный базис, так чтобы этот линейный множитель совпадал с одной из новых координат y_1, что соответствует выбору базисного вектора вдоль $v^\perp$. Тогда условие $v^\perp > 0$ принимает вид $y_1 > 0$, а ответ с точностью до постоянного множителя сводится к произведению гауссовых интегралов и интеграла $\int_0^\infty y_1 e^{-y_1^2} dy_1$.

В результате получаем для частот перехода:

$$k = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\sum_{i=2}^{2N} \frac{(a^i_{sp})^2}{\zeta^i_{sp}}} \sqrt{\frac{\det H[S^{\min}]}{\prod_{j=2}^{2N} \zeta^j_{sp}}} e^{-\frac{E^{sp}-E^{\min}}{k_B T}}. \tag{6}$$

Это выражение, соответствующее закону (2), совпадает с полученным в работе [8], если $\det H[S^{\min}]$ в минимуме записать через произведение собственных чисел $\prod_j \zeta^j_{\min}$.

Выражение для частоты магнитных переходов может быть записано в несколько другом виде, более удобном для численных расчетов, особенно в случае систем с большим числом степеней свободы. Для этого запишем уравнение движения (5) для состояния на ПМПЭ вблизи седловой точки $S = S^{sp} + \epsilon \mathbf{e}^1_{sp}$ ($\epsilon \to 0$) и рассмотрим величину

$$\frac{1}{\epsilon}\frac{dS}{dt} = \frac{\gamma\zeta^1_{sp}}{M} S^{sp} \times e^1_{sp} \equiv \frac{de^1_{sp}}{dt},$$

которая представляет собой поперечную компоненту скорости состояний на ПМПЭ вблизи седловой точки. Определим

$$b^i = e^i_{sp} \cdot \frac{de^1_{sp}}{dt}.$$

Величины b^i и a^i_{sp} связаны соотношением:

$$a^i_{sp} = -\frac{\zeta^i_{sp}}{\zeta^1_{sp}} b^i = \frac{\zeta^i_{sp}}{|\zeta^1_{sp}|} b^i.$$

Теперь (6) можно записать в виде:

$$k = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\sum_{i=2}^{2N} \frac{\zeta^i_{sp}}{|\zeta^1_{sp}|}(b_i)^2} \sqrt{\frac{\det H[S^{\min}]}{|\det H[S^{sp}]|}} e^{-\frac{E^{sp}-E^{\min}}{k_B T}}. \tag{7}$$

Сумма по собственным значениям в (7) представляет собой значение квадратичной формы матрицы $H[S^{sp}]$ на векторе b:

$$\sum_i \zeta^i_{sp}(b^i)^2 = b \cdot H[S^{sp}]b.$$

Оно может быть вычислено в произвольном базисе, включая исходный базис, в котором задавалась магнитная конфигурация и, таким образом, не требуется поиск всех собственных значений гессиана.

Уравнение для частот перехода (7) содержит отношение детерминантов гессианов энергии в соответствующих точках энергетической поверхности. Обычно оно рассчитывается как отношение произведения собственных значений гессиана [11–14]. Однако для систем, содержащих миллионы степеней свободы, найти все собственные числа гессиана не представляется возможным стандартными методами. Поэтому расчеты микронных систем с атомным разрешением вплоть до последнего времени не проводились. Прогресс в этом направлении был достигнут недавно, пользуясь разреженностью матриц Гессе [17]. Взаимодействие между магнитными моментами носит короткодействующий характер, следовательно матрица Гессе может быть представлена в блочно-трехдиагональном виде. Блочное разложение Холецкого [38] позволяет записать рекуррентное соотношение на элементы блочной диагонали, соответствующие подсистемам первоначальной системы с фиксированной одной из пространственных координат, значительно понижая размерность задачи. Предложенный метод позволяет вычислять определители гессианов для систем микронного масштаба с атомным разрешением.

4. Скирмион на треке. Одно из наиболее активно развивающихся направлений разработки устройств на основе топологических систем связано с возможностью их движения под действием спин-поляризованного тока по магнитным дорожкам заданной архитектуры [44–47]. Когда скирмион или другой локализованный объект находится на магнитной дорожке, близость границы дорожки, ее кривизна и структурные дефекты могут существенно влиять на устойчивость системы относительно тепловых флуктуаций [48, 49]. Для очень узких дорожек, когда их ширина становится существенно меньше равновесного размера уединенного скирмиона, возможна его трансформация в пару доменных стенок [50]. Скирмион может разрушиться при проходе сужения на треке, двигаясь под действием спин-поляризованного тока [51]. Поэтому проблема оценки времен жизни топологических структур в условиях ограниченной геометрии здесь особенно важна.

Расчеты равновесных состояний скирмионов на магнитной дорожке показывают, что их размер начинает уменьшаться, когда ширина дорожки становится порядка удвоенного диаметра скирмиона [29, 52]. Аналогичный эффект отмечался по результатам расчета скирмионов в нанодиске в рамках микромагнитной модели [53]. При этом меняется и активационный барьер для коллапса скирмиона, прежде всего, за счет увеличения его энергии в метастабильном равновесном состоянии. Было найдено два сценария исчезновения скирмиона: один соответствует уменьшению размера неколлинеарной структуры и ее исчезновению внутри образца, другой – уходу за границу дорожки. ПМПЭ для каждого сценария вместе с магнитными конфигурациями в седловой точке представлены на рис. 2 для разных ширин дорожки. Параметры соответствуют скирмионам, наблюдаемым экспериментально в системе PdFe/Ir(111) методами туннельной микроскопии ($\mu B = 0.093 J, K = 0.07 J, D_{ij} = 0.32 J, J = 7$ мэВ) [54, 29].

Возможность исчезновения скирмиона за счет ухода за границу трека исследовалась для широкой по сравнению с размером скирмиона дорожки в работах [32, 30]. Как видно из рис. 2, ПМПЭ содержит в этом случае горизонтальный участок, соответствующий свободному перемещению скирмиона вдали от границы. При приближении скирмиона к границе, его энергия начинает расти, но седловая точка при переходе соответствует состоянию, когда почти весь он все еще находится на треке. При этом магнитная конфигурация в седловой точке не сильно отличается по размеру и внешнему виду от скирмиона в равновесном состоянии.

Для коллапса внутри трека размер структуры в окрестности седловой точки значительно меньше, чем в начальном равновесном состоянии, и он не так сильно взаимодействует с границами. Поэтому энергия системы в переходном состоянии слабее зависит от ширины дорожки, чем в начальном, равновесном. При уходе скирмиона через границу его энергия практически не меняется, пока он не подойдет к границе достаточно близко. И здесь зависимость энергии в переходном состоянии от ширины трека меньше, чем в начальном равновесном состоянии, где на узких треках обе границы действуют на скирмион одновременно. Поэтому барьер, который нужно преодолеть для уничтожения скирмиона уменьшается, а для его зарождения из ФМ состояния – увеличивается, с уменьшением ширины дорожки. Исчезновение скирмиона на границе требует более низкой энергии активации, чем внутри образца. Барьер для зарождения скирмиона увеличивается, когда ширина трека уменьшается, но он всегда ниже вблизи границы, чем внутри трека.

Оценка предэкспоненциального множителя в законе скорости Аррениуса в рамках гармонического приближения теории переходного состояния дает значение порядка 10^{12} с$^{-1}$ для коллапса и 10^{9} с$^{-1}$ для выхода через границу на самом широком треке шириной 70 атомов. Это вместе с оценкой энергии активации позволяет оценить время жизни скирмиона. Оказалось, что для первого случая оно составляет более 3 лет, а для второго – около полумесяца при температуре 10 К. При комнатной температуре такие скирмионы нестабильны.

Поведение барьеров меняется при увеличении магнитного поля, направленного противоположно намагниченности в центре скирмиона. Такое поле, как и границы трека, приводит к уменьшению размера скирмиона. Энергия метастабильных скирмионов в сильных полях увеличивается, а их равновесное число и устойчивость относительно тепловых

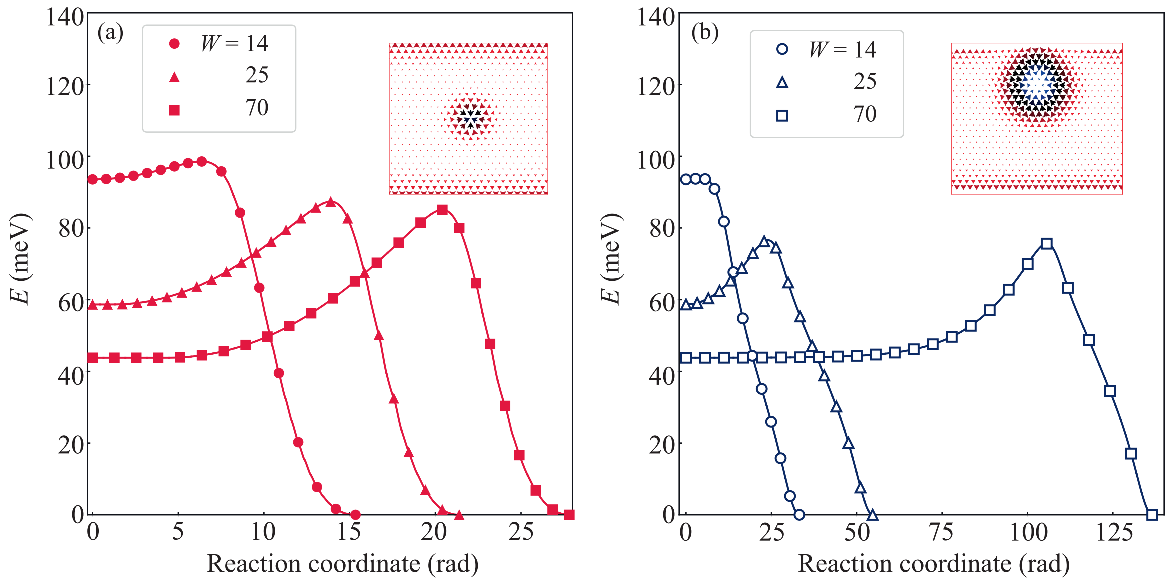

Рис. 2. (Цветной онлайн) ПМПЭ для переходов из состояния уединенного скирмиона на треке в ферромагнитное состояние при разной ширине трека W. (a) – Коллапс внутри трека. (b) – Уход за границу трека. На вставках показана магнитная конфигурация в седловых точках для $W = 25$ атомных слоев

флуктуаций уменьшается. Это должно проявляться в особенностях топологического эффекта Холла, связанного с рассеянием электронов проводимости на скирмионах [55], а также в предсказанной теоретически возможности наблюдения квантового туннелирования скирмионного состояния в ФМ при сверхнизких температурах [56]. На рисунке 3 приведена зависимость энергии активации уничтожения скирмионов в зависимости от ширины трека при трех разных значениях внешнего поля. Видно, что при поле $B = 3.75$ Тл барьер для радиального коллапса скирмиона выше барьера для его ухода через границу для всех значений W, что согласуется с результатами расчетов [32] для широкой дорожки. При $B = 4.6$ Тл барьеры близки, но для узкого трека ($W < 27$) энергия активации ниже для ухода через границу, а для широкого – для исчезновения внутри трека. При $B = 6.3$ Тл барьер для коллапса более чем в 2 раза ниже, чем для ухода. При этом величина барьеров уменьшается с увеличением поля.

ПМПЭ для скирмиона на дорожке шириной $W = 30$ слоев в различных магнитных полях показаны на рис. 4. Рисунок 4a соответствует коллапсу внутри трека, 4b – уходу скирмиона через границу. Видно, что энергия в седловой точке при уходе через границу сильно увеличивается с ростом магнитного поля, в то время, как для коллапса внутри образца это увеличение гораздо меньше. Из-за этого с увеличением поля барьер для ухода через границу трека становится больше, чем для коллапса. Барьер для зарождения скирмиона из ФМ состояния в больших полях становится меньше внутри трека, чем на его границе.

5. Скирмионы в антиферромагнетике, антискирмионы. Наряду с квазидвумерными скирмионами в тонких ферромагнитных слоях и многослойных системах существует множество других топологических структур, представляющих интерес для фундаментального магнетизма и приложений [57]. Одним из перспективных направлений является использование ферримагнитных и антиферромагнитных (АФ) хиральных материалов в качестве носителей локализованных топологических состояний. В этих системах удалось получить устойчивые при комнатных температурах скирмионы размером от десяти нм, перемещающиеся под действием тока со скоростями выше 1 км/с [58, 59]. Если скирмионы в ФМ материалах движутся по отношению к току под некоторым углом, называемым углом Холла [60], то в ферримагнетиках этот угол существенно уменьшается, а в АФ материалах – обращается в нуль [61, 62]. В синтетических антиферромагнетиках, состоящих из ФМ слоев с антиферромагнитным межслойным взаимодействием [63], при комнатной температуре были экспериментально получены скирмионы размером 10 нм, антиферромагнитно связанные в соседних слоях [64]. Анализ устойчивости и оценка времен жизни топологических состояний, в частности, скирмионов, в антиферромагнетиках могут быть выполнены в рамках ТПС, как и для ФМ материалов [65].

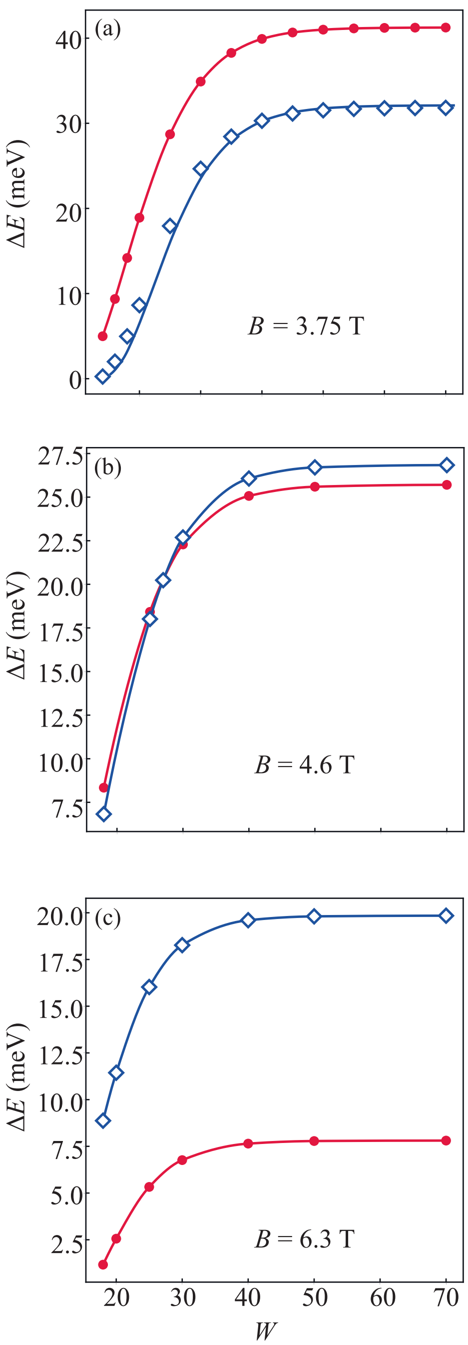

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость барьера для коллапса скирмиона от ширины трека W при различных значениях внешнего поля B. (a) – $B = 3.75$ Тл, (b) – $B = 4.6$ Тл, (c) – $B = 6.3$ Тл. Красные кружки соответствуют радиальному коллапсу скирмиона, синие ромбы – уходу через границу трека

Особый интерес представляет сравнение свойств таких структур в ФМ и АФ материалах [66]. В результате аналитических и численных расчетов было показано, что магнитное поле оказывает противоположное влияние на скирмионы в двух типах материалов: увеличивает радиус скирмиона в антиферромагнетиках, в то время как в ферромагнетиках радиус уменьшается, когда поле направлено против намагниченности в центре скирмиона. Частоты процессов коллапса скирмионов и самопроизвольного ухода через границу магнитной дорожки уменьшаются при увеличении магнитного поля в случае АФ материала. Напротив, эти процессы значительно усиливаются с увеличением поля в ФМ. Расчеты на основе обобщенной модели Гейзенберга (1) показали, что в отсутствие магнитного поля энергетические поверхности ФМ и АФ систем полностью эквивалентны. В присутствии магнитного поля энергетические поверхности оказываются близкими, если определенным образом (квадратично по полю) изменить параметр анизотропии. В этом случае активационные барьеры должны совпадать. Однако, как показывают расчеты, времена жизни скирмионов в ФМ и АФ материалах различны [66]. Причина заключается в разной динамике скирмионов в этих системах, приводящей к разным вкладам в предэкспоненциальный фактор при расчете частот магнитных переходов. То, что включение магнитного поля для АФ сред соответствует перенормировке константы анизотропии в ФМ материале, означает, что энергию активации для коллапса скирмиона в АФ материале можно получить без дополнительных расчетов из имеющихся данных для ФМ скирмионов.

Другой топологической магнитной структурой, активно изучаемой в последнее время, является антискирмион, несущий противоположный скирмиону топологический заряд [3]. Один из сценариев формирования скирмионов заключается в рождении пары скирмион-антискирмион с последующим коллапсом нестабильного антискирмиона [67]. Устойчивая при комнатной температуре антискирмионная решетка была получена в тетрагональных сплавах Гейслера Mn–Pt–Sn с анизотропным взаимодействием ДМ [68]. В отличие от скирмиона, антискирмион не является радиально симметричным и движется в определенных направлениях вдоль электрического тока, т.е. с углом Холла, равным нулю [69]. Несмотря на то, что скирмион и антискирмион выглядят по-разному, существует преобразование R, переводящее одно состояние в другое, обеспечивающее анизотропный обмен ДМ, но сохраняющее неизменной энергетическую поверхность системы. Для векторов $\mathbf{S_i}$ оно имеет вид:

$$R(S_x, S_y, S_z) = (S_x, -S_y, -S_z).$$

R должно быть применено не только к $\mathbf{S_i}$, но и ко всем другим векторам, входящим в формулу для

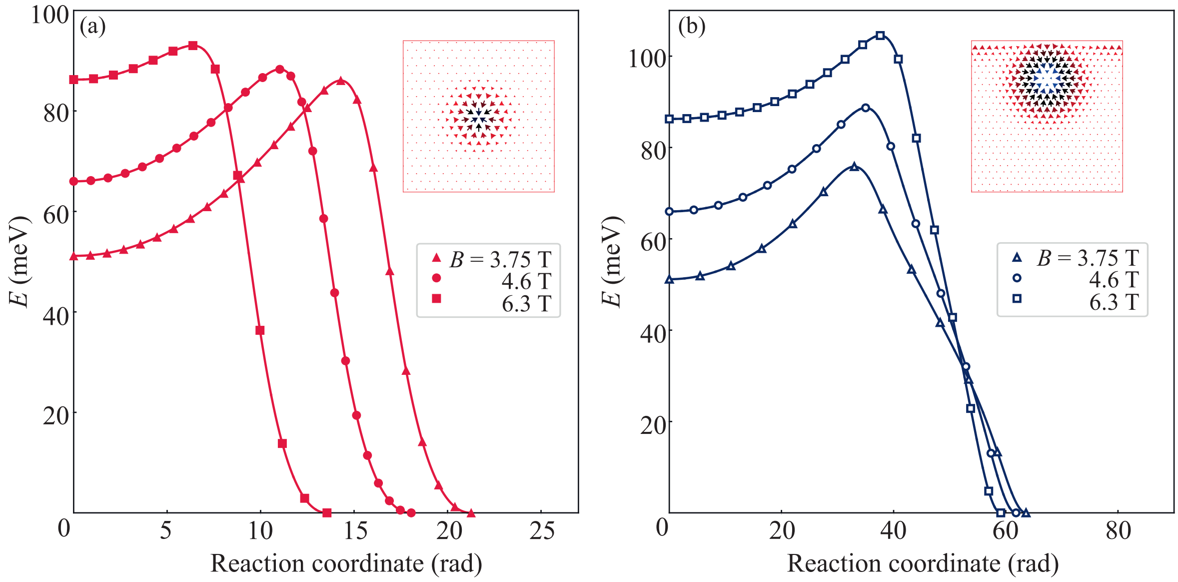

Рис. 4. (Цветной онлайн) ПМПЭ для переходов из состояния уединенного скирмиона в ФМ состояние в разных внешних полях на треке шириной $W = 30$ слоев. (a) – Коллапс внутри трека. (b) – Уход за границу трека. На вставках показана магнитная конфигурация в седловых точках для поля $B = 4.6$ Тл

энергии (1). Инвариантность энергетической поверхности и уравнений Ландау–Лифшица в отсутствие токов относительно преобразования R означает, что времена жизни скирмионов и антискирмионов в системах, связанных с этим преобразованием, совпадают. Анализ уравнений движения в присутствии токов позволяет без проведения вычислений определить направление вектора плотности тока, вдоль которого антискирмион будет двигаться с нулевым углом Холла. Преобразование R не сохраняет энергию дипольного магнитного взаимодействия, так что для систем, где это взаимодействие играет существенную роль, необходим дополнительный анализ [70].

Времена жизни антискирмиона в сплаве Гейслера Mn–Pt–Sn исследовались на основе гармонического приближения ТПС в работе [71]. Расчеты были выполнены для серии состояний, описываемых дискретной моделью с разной постоянной решетки и числом магнитных моментов. Параметры модели выбирались таким образом, чтобы все системы соответствовали одной и той же непрерывной модели. Если постоянная решетки уменьшается в N раз, то для двумерной системы обменная константа J не меняется, параметр ДМ уменьшается в N раз, а магнитный момент и параметр анизотропии – в N^2 раз. Экспериментальному значению постоянной решетки и магнитных параметров соответствовало значение $N = 20$. Система содержала $45N \times 45N$ магнитных моментов с периодическими граничными условиями. На рисунке 5 представлены зависимости энергии антискирмиона в равновесном состоянии E_m и в седловой точке при его коллапсе E_{sp} от параметра N. На вставке приведена зависимость от N предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса. Расчеты показали, что за устойчивость антискирмиона при комнатной температуре отвечает большая энергия активации для коллапса, в то время как предэкспоненциальный множитель имеет характерную величину 10^{12} с$^{-1}$, несмотря на большое количество спинов. Таким образом, энергетические, а не энтропийные эффекты определяют большое время жизни антискирмиона, наблюдаемое в эксперименте. Расчеты системы микромагнитного масштаба с атомным разрешением с более чем миллионом степеней свободы удалось провести благодаря использованию метода усеченного ПМПЭ и рекуррентного расчета детерминантов гессиана энергии вместо его диагонализации.

6. Дефекты и немагнитные примеси. Для практического использования магнитных скирмионов важным вопросом является влияние структурных дефектов атомного масштаба на устойчивость и динамику топологических магнитных состояний. Локальные дефекты могут выступать притягивающими или отталкивающими центрами, приводя к формированию связанных состояний и деформации магнитного профиля скирмиона [72, 73], изменению траектории движения под действием тока [74]. Протяженные дефекты могут образовывать “рельсы”, позволяющие перемещать скирмионы вдоль заданных траекторий [75, 76]. При этом проблему устойчивости маг-

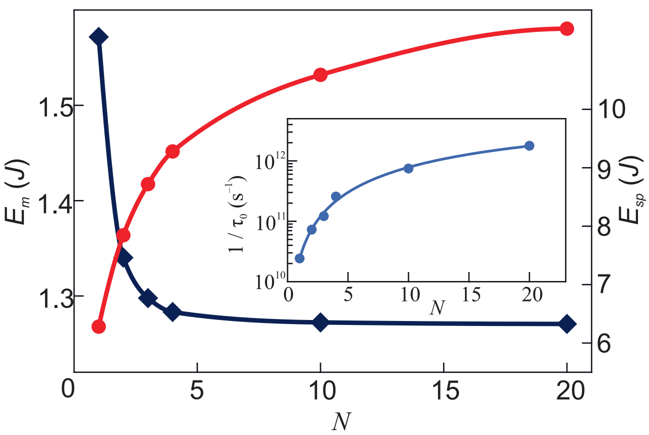

Рис. 5. (Цветной онлайн) Энергия равновесного антискирмиона в локальном минимуме E_m (синяя линия с ромбами) и в седловой точке E_{sp} при коллапсе (красная линия с кружками) как функция масштабного параметра N. На вставке – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса в зависимости от N. Параметр $J = 110$ мэВ

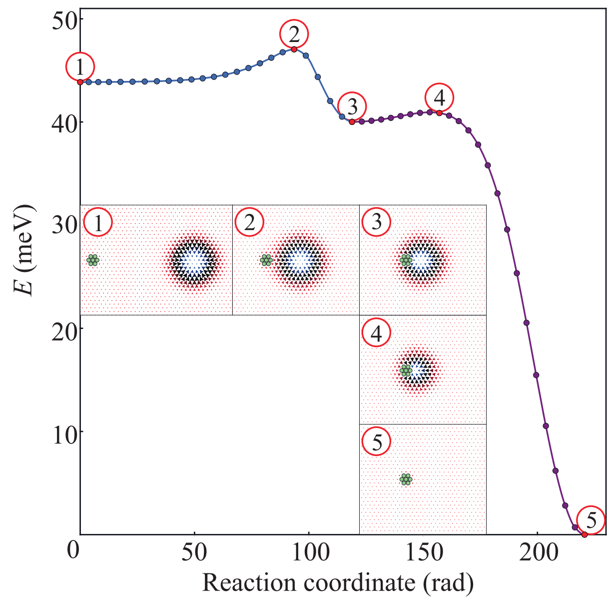

Рис. 6. (Цветной онлайн) ПМПЭ для скирмиона в присутствии немагнитного дефекта. Участок 1-2-3 соответствует пути от состояния скирмиона вдали от немагнитного кластера из 7 атомов до скирмиона, локализованного на кластере. Участок 3-4-5 представляет собой ПМПЭ от скирмиона, локализованного на кластере до немагнитного кластера в ФМ образце. На вставках показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ. Состояния 2 и 4 соответствуют седловым точкам. Скирмион локализован внутри трека шириной $W = 61$ атом

нитных состояний при совместном воздействии ограниченной геометрии образца и точечных или протяженных дефектов необходимо решать при проектировании любых устройств, использующих скирмионы или другие топологические структуры.

Эффекты влияния немагнитных примесей на устойчивость и локализацию скирмионов в ФМ и АФ материалах исследовались в работах [29, 66]. Одновременное влияние границ трека и кластеров разного размера из немагнитных атомов на стабильность скирмионных состояний анализировалось в работе [52].

На рисунке 6 показан ПМПЭ для присоединения скирмиона к немагнитному кластеру, и для его последующего коллапса. Кластер состоит из 7 немагнитных атомов, компактно расположенных в узлах треугольной двумерной решетки. На вставках представлены магнитные конфигурации в равновесных локально устойчивых состояниях и в седловых точках. Немагнитный дефект повышает вероятность исчезновения скирмиона, поскольку барьер для коллапса в этом случае оказался существенно меньше, чем в отсутствие дефекта. Энергия активации для зарождения скирмиона также существенно понижается. Это объясняет тот факт, что под действием тока с иглы туннельного микроскопа скирмионы обычно появляются вблизи структурных дефектов [77]. Исследовалось влияние внешнего магнитного поля на связанное состояние скирмиона на немагнитном дефекте в ФМ и АФ материалах. Расчеты позволяют утверждать, что АФ скирмион отрывается от примеси легче, чем ФМ, и этот эффект тем больше, чем больше напряженность поля [66]. Анализ одновременного влияния границ образца и дефектов различного размера показал, что для достаточно узких треков и больших дефектов скирмион, образующий связанное состояние, скорее разрушится под действием тока, чем диссоциирует, и будет двигаться как свободная частица. Это важно учитывать при разработке устройств, в которых скирмионные состояния перемещаются по магнитным дорожкам.

7. Заключение. ТПС для магнитных степеней свободы позволяет получить количественные оценки устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций при произвольных температурах. Анализ ПМПЭ и энергетических поверхностей систем дает возможность найти наиболее вероятные сценарии магнитных переходов, в том числе переходов с изменением топологического заряда уединенных скирмионов и упорядоченных систем взаимодействующих скирмионов, интенсивно изучаемых в последнее время теоретически [78] и экспериментально [79]. Исследование многомерных энергетических поверхностей открывает новые возможности для предсказания механизмов возможных трансформаций состояний не только для квазидвумерных магнитных структур, но и трехмерных магнитных [18, 80–82] и жидкокристаллических конфигураций [83–85]. Однако исследование трехмерных систем требует увеличения размерности энергетической поверхности, особенно если необходимо атомное разрешение. Теория может быть использована и для структур, которые описываются моделями коллективизированного магнетизма, например, моделью Александера–Андерсона [26, 27] или в методе функционала плотности, но в этих случаях объем расчетов существенно увеличивается и приходится ограничиться относительно небольшим числом атомов. Для системы, описываемой обобщенной моделью Гейзенберга со взаимодействиями конечного радиуса (1), удается провести количественные оценки времен жизни магнитных состояний для систем, включающих миллионы степеней свободы, используя разреженность гессиана энергии. При наличии дальнодействующего магнитного диполь-дипольного взаимодействия гессиан не является разреженной матрицей. Однако, если записать вклад дипольного взаимодействия в энергию в терминах полей размагничивания, формально можно сделать это взаимодействие локальным, увеличив число степеней свободы и размерность энергетической поверхности. Это позволяет обобщить описанные выше методы [17] на системы микронного масштаба с дипольным взаимодействием.

Часть описанных выше результатов была получена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований 18-02-00267-А, 19-32-90048-Аспиранты и Фонда развития теоретической физики и математики БАЗИС (проект 19-1-1-12-1,2). Методы расчета времен жизни магнитных состояний для систем с миллионами степеней свободы были развиты при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках совместного проекта РНФ-Гельмгольц 19-42-06302.

1. А. А. Белавин, А. М. Поляков, Письма в ЖЭТФ **22**, 503 (1975).
2. А. Н. Богданов, Д. А. Яблонский, ЖЭТФ **95**, 178 (1989).
3. N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. **8**, 899 (2013).
4. G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri, and M. Kläui, J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 423001 (2016).
5. A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. **2**, 1 (2017).
6. S. Krause, G. Herzog, T. Stapelfeldt, L. Berbil-Bautista, M. Bode, E. Y. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **103**, 127202 (2009).
7. W. T. Coffey, D. A. Garanin, and D. J. McCarthy, Adv. Chem. Phys. **117**, 483 (2001).
8. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B **85**, 184409 (2012).
9. P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, Rev. Mod. Phys. **62**, 251 (1990).
10. A. F. Voter and J. D. Doll, J. Chem. Phys. **82**, 80 (1985).
11. G. Fiedler, J. Fidler, J. Lee, T. Schrefl, R. L. Stamps, H. B. Braun, and D. Suess, J. Appl. Phys. **111**, 093917 (2012).
12. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. Lett. **110**, 020604 (2013).
13. L. Desplat, D. Suess, J. V. Kim, and R. L. Stamps, Phys. Rev. B **98**, 134407 (2018).
14. A. S. Varentcova, S. von Malottki, M. N. Potkina, G. Kwiatkowski, S. Heinze, and P. F. Bessarab, npj Comp. Mater. **6**, 193 (2020).
15. I. S. Lobanov, M. N. Potkina, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Nanosystems: Phys., Chem., Math. **8**, 586 (2017).
16. G. P. Müller, P. F. Bessarab, S. M. Vlasov, F. Lux, N. S. Kiselev, S. Blügel, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. Lett. **121**, 197202 (2018).
17. I. S. Lobanov and V. M. Uzdin, arXiv:2008.06754v1 [cond-mat.mtrl-sci].
18. F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, and N. S. Kiselev, Phys. Rev. Lett. **115**, 117201 (2015).
19. A. V. Ivanov, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Commun. **260**, 107749 (2020).
20. F. Büttner, I. Lemesh, and G. S. Beach, Sci. Rep. **8**, 4464 (2018).
21. I. S. Lobanov, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B **94**, 174418 (2016).
22. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Commun. **196**, 335 (2015).
23. G. Henkelman and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **113**, 9978 (2000).
24. G. Henkelman, B. P. Uberuaga, and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **113**, 9901 (2000).
25. A. V. Ivanov, D. Dagbartsson, J. Tranchida, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, J. Phys. Condens. Matter **32**, 345901 (2020).
26. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B **89**, 214424 (2014).
27. A. Ivanov, P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Nanoscale **9**, 13320 (2017).
28. V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, P. F. Bessarab, and H. Jónsson, J. Magn. Magn. Mat. **459**, 236 (2018).
29. V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, P. F. Bessarab, and H. Jónsson, Physica B **549**, 6 (2018).

30. D. Cortés-Ortuno, W. Wang, M. Beg, R. A. Pepper, M. A. Bisotti, R. Carey, M. Vousden, T. Kluyver, O. Hovorka, and H. Fangohr, Sci. Rep. **7**, 4060 (2017).
31. S. von Malottki, B. Dupé, P. F. Bessarab, A. Delin, and S. Heinze, Sci. Rep. **7**, 12299 (2017).
32. P. F. Bessarab, G. P. Müller, I. S. Lobanov, F. N. Rybakov, N. S. Kiselev, H. Jónsson, V. M. Uzdin, S. Blügel, L. Bergqvist, and A. Delin, Sci. Rep. **8**, 3433 (2018).
33. M. Hoffmann, G. P. Müller, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **124**, 247201 (2020).
34. S. Rohart, J. Miltat, and A. Thiaville, Phys. Rev. B **93**, 214412 (2016).
35. E. Weinan, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden, Phys. Rev. B **66**, 052301 (2002).
36. P. Heistracher, C. Abert, F. Bruckner, C. Vogler, and D. Suess, IEEE Trans. Magn. **54**, 7206105 (2018).
37. R. A. Olsen, G. J. Kroes, G. Henkelman, A. Arnaldsson, and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **121**, 9776 (2004).
38. G. H. Golub and C. F. van Loan, *Matrix computations*, JHU press, Baltimore (2013), v. 3.
39. G. Henkelman and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **111**, 7010 (1999).
40. M. Moskalenko, P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, AIP Advan. **6**, 025213 (2016).
41. N. Romming, A. Kubetzka, C. Hanneken, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **114**, 177203 (2015)
42. O. Boulle, J. Vogel, H. Yang et al. (Collaboration), Nat. Nanotech. **11**, 449 (2016).
43. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Z. Phys. Chem. **227**, 1543 (2013).
44. S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science **320**, 190 (2008).
45. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotechnol. **8**, 152 (2013).
46. Z. R. Yan, Y. Z Liu, Y. Guang, J. F. Feng, R. K. Lake, G. O. Yu, and X. F. Han, Phys. Rev. Appl. **14**, 044008 (2020).
47. H. Zhang, D. Zhu, W. Kang, Y. Zhang, and W. Zhao, Phys. Rev. Appl. **13**, 054049 (2020).
48. J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, Nat. Nanotechnol. **8**, 742 (2013).
49. V. L. Carvalho-Santos, M. A. Castro, D. Salazar-Aravena, D. Laroze, R. M. Corona, S. Allende, and D. Altbir, Appl. Phys. Lett. **118**, 172407 (2021).
50. Y. Zhou and M. Ezawa, Nat. Commun. **5**, 4652 (2014).
51. D. Suess, C. Vogler, F. Bruckner, P. Heistracher, and F. Slanovc, Sci. Rep. **9**, 4827 (2019).
52. M. N. Potkina, I. S. Lobanov, and V. M. Uzdin, Nanosystems: Phys., Chem., Math. **11**, 628 (2020).
53. J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville, and F. Fert, Nat. Nanotechnol. **8**, 839 (2013).
54. J. Hagemeister, N. Romming, K. von Bergmann, E. V. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, Nat. Commun. **6**, 8455 (2015).
55. K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, E. Lähderanta, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B **98**, 214407 (2018).
56. S. M. Vlasov, P. F. Bessarab, I. S. Lobanov, M. N. Potkina, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, New J. Phys. **22**, 083013 (2020).
57. V. M. Kuchkin, B. Barton-Singer, F. N. Rybakov, S. Blügel, B. J. Schroers, and N. S. Kiselev, Phys. Rev. B **102**, 144422 (2020).
58. L. Caretta, M. Mann, F. Büttner, K. Ueda, B. Pfau, C. M. Günther, P. Hessing, A. Churikova, C. Klose, M. Schneider, and D. Engel, Nat. Nanotechnol. **13**, 1154 (2018).
59. S. Woo, K. M. Song, X. Zhang et al. (Collaboration), Nat. Commun. **9**, 959 (2018).
60. K. Litzius, I. Lemesh, B. Krüger et al. (Collaboration), Nature Phys. **13**, 170 (2017).
61. J. Barker and O. A. Tretiakov, Phys. Rev. Lett. **116**, 147203 (2016).
62. X. Zhang, Y. Zhou, and M. Ezawa, Sci. Rep. **6**, 24795 (2016).
63. R. A. Duine, K. J. Lee, S. S. P. Parkin, and V. D. Stiles, Nature Phys. **14**, 217 (2018).
64. W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, and A. Fert, Nat. Mater. **19**, 34 (2020).
65. P. F. Bessarab, D. Yudin, D. R. Gulevich, P. Wadley, M. Titov, and O. A. Tretiakov, Phys. Rev. B **99**, 140411 (2019).
66. M. N. Potkina, I. S. Lobanov, H. Jónsson, and V. M. Uzdin, J. Appl. Phys. **127**, 213906 (2020).
67. W. Koshibae and N. Nagaosa, Nat. Commun. **7**, 10542 (2016)
68. A. K. Nayak, V. Kumar, T. Ma, P. Werner, E. Pippel, R. Sahoo, F. Damay, U. K. Röβler, C. Felser, and S. S. P. Parkin, Nature **548**, 561 (2017).
69. S. Huang, C. Zhou, G. Chen, H. Shen, A. K. Schmid, K. Liu, and Y. Wu, Phys. Rev. B **96**, 144412 (2017).
70. L. Camosi, N. Rougemaille, O. Fruchart, J. Vogel, and S. Rohart, Phys. Rev. B **97**, 134404 (2018).
71. M. N. Potkina, I. S. Lobanov, O. A. Tretiakov, H. Jónsson, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B **102**, 134430 (2020).
72. C. Hanneken, A. Kubetzka, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, New J. Phys. **18**, 055009 (2016).
73. I. L. Fernandes, J. Bouaziz, S. Blügel, and S. Lounis, Nat. Commun. **9**, 4395 (2018).
74. J. Müller and A. Rosch, Phys. Rev. B **91**, 054410 (2015).
75. J. Castell-Queralt, L. González-Gómez, N. Del-Valle, A. Sanchez, and C. Navau, Nanoscale **11**, 12589 (2019).
76. D. Stosic, T. B. Ludermir, and M. V. Milošević, Phys. Rev. B **96**, 214403 (2017).

77. N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, Science **341**, 636 (2013).
78. В. Е. Тимофеев, А. О. Сорокин, Д. Н. Аристов, Письма в ЖЭТФ **109**, 200 (2019).
79. М. В. Сапожников, О. В. Ермолаева, Е. В. Скороходов, Н. С. Гусев, М. Н. Дроздов, Письма в ЖЭТФ **107**, 378 (2018).
80. H. R. O. Sohn, S. M. Vlasov, V. M. Uzdin, A. O. Leonov, and I. I. Smalyukh, Phys. Rev. B **100**, 104401 (2019).
81. S. M. Vlasov, V. M. Uzdin, and A. O. Leonov, J. Phys. Condens. Matter **32**, 185801 (2020).
82. A. O. Leonov, I. M. Tambovtcev, I. S. Lobanov, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B **102**, 174415 (2020).
83. A. V. Ivanov, P. F. Bessarab, E. V. Aksenova, V. P. Romanov, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. E **93**, 042708 (2016).
84. S. S. Tenishchev, A. D. Kiselev, A. V. Ivanov, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. E **100**, 062704 (2019).
85. S. S. Tenishchev, I. M. Tambovtcev, A. D. Kiselev, and V. M. Uzdin, J. Mol. Liq. **325**, 115242 (2021).