

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА
КВАЗИОДНОМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ АТОМОВ ПЕРЕХОДНЫХ
МЕТАЛЛОВ, АДСОРБИРОВАННЫХ НА ПРОВОДЯЩУЮ
ПОВЕРХНОСТЬ

Цели и задачи

Цель:

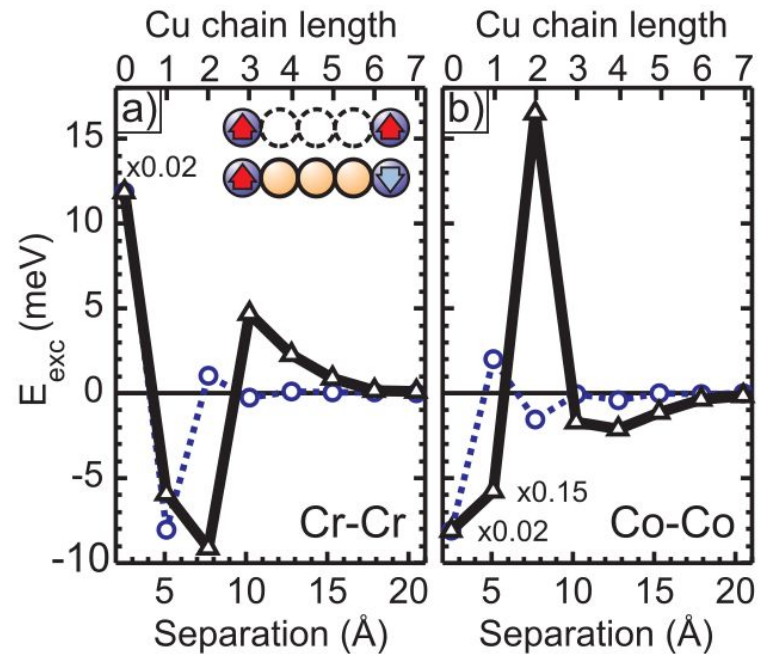
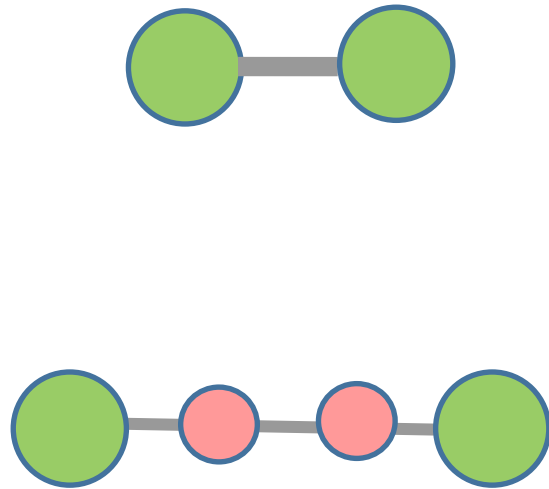
Исследовать влияние точечных локальных магнитных воздействий на поверхностные структуры атомов переходных металлов, адсорбированных на проводящую поверхность.

Задачи:

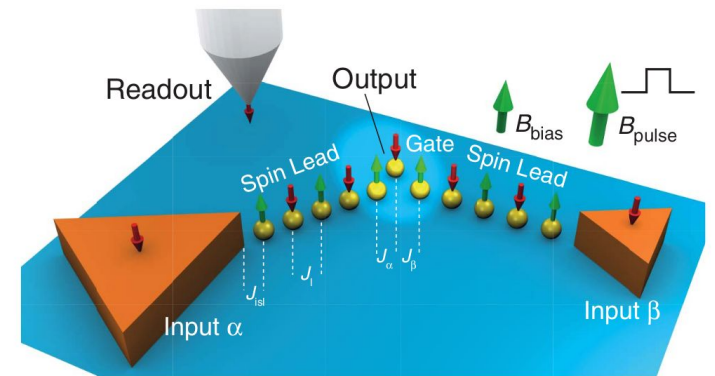
- Провести обзор ранних работ, посвященных исследованию обменных взаимодействий между атомами переходных металлов, адсорбированных на проводящую поверхность;
- Разработать компьютерную программу для моделирования спиновых систем при помощи метода Монте-Карло.

Обзор источников

Характер взаимодействия между атомами
Co, адсорбированными на поверхности
Cu(111) [1]



Логическое устройство, построенное
на основе обменных взаимодействий
между спинами атомов,
адсорбированных на подложку [2]

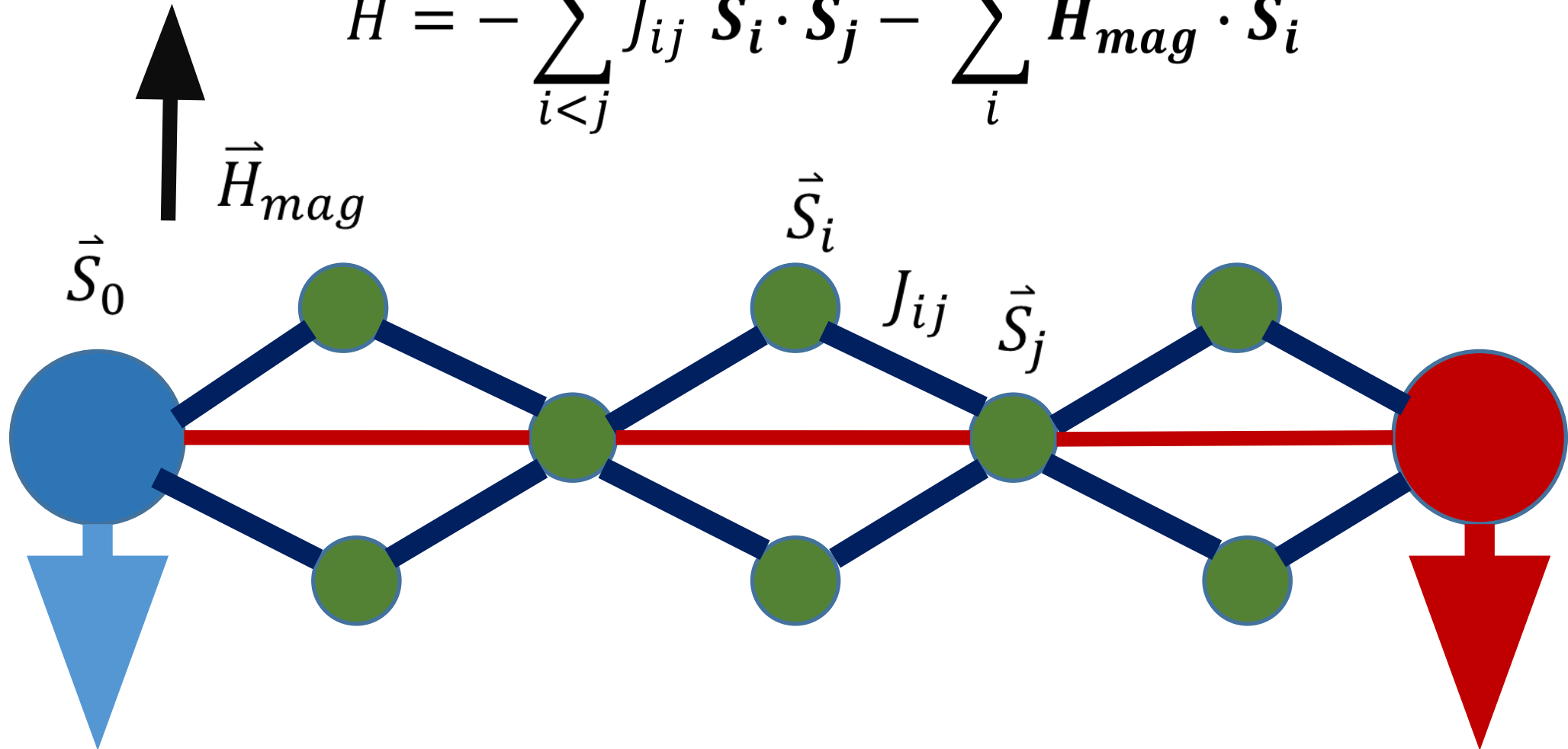


[1] P. A. Ignatiev, N. N. Negulyaev, et al., Phys. Rev. Lett., 101, 036809 (2008)

[2] Alexander Ako Khajetoorians, Roland Wiesendanger, et al., Science, 332 (2011)

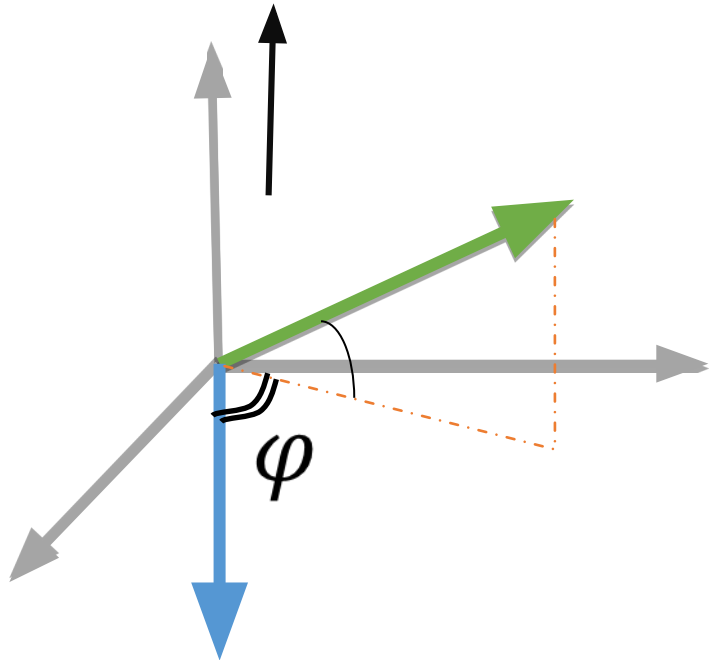
Методы исследования

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i \mathbf{H}_{mag} \cdot \mathbf{S}_i$$



Методы исследования

Трактуем точечное воздействие на уровне модели Гейзенберга



- Направим вектор магнитного поля вдоль оси Z:
- Зафиксируем спин :
- Представим в сферических координатах:

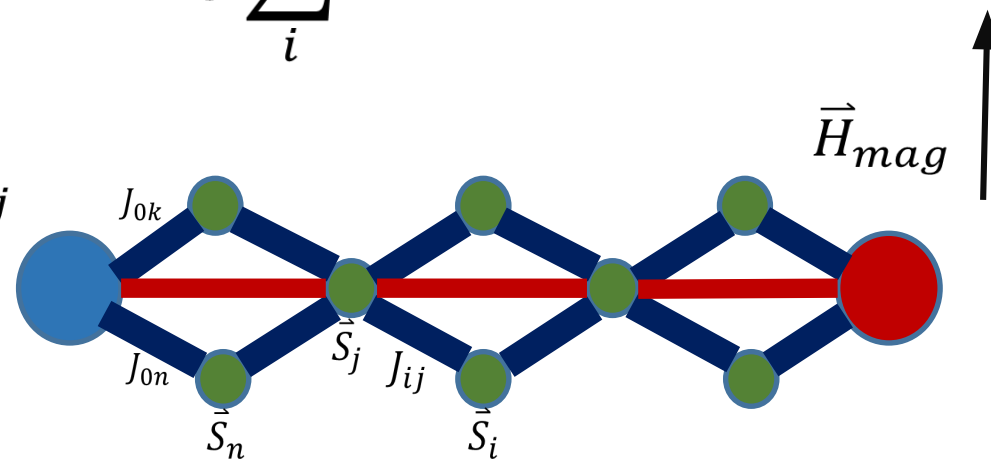
Методы исследования

Трактуем точечное воздействие на уровне модели Гейзенберга:

$$H = - \underbrace{\sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}_{\text{exchange}} - \underbrace{\sum_i \mathbf{H}_{mag} \cdot \mathbf{S}_i}_{\text{magnetic field}}$$

$$- \sum_j J_{0j} \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i \neq 0, j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - H_{mag} \sum_i |\mathbf{S}_i| \cdot \cos \theta_i$$

$$(\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_j) = -|\mathbf{S}_0| |\mathbf{S}_j| \cos \theta_j$$

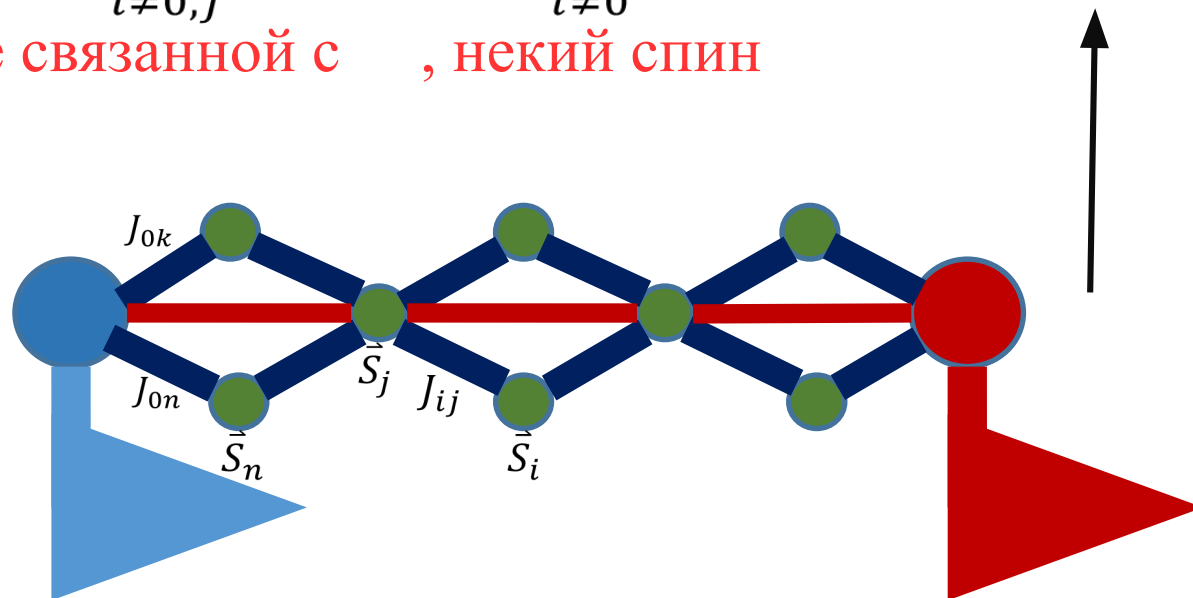


Методы исследования

$$H = H_{mag}|S_0| - |S_0| \sum_j J_{0j}|S_j| \cos \theta_j - \sum_{i \neq 0, j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i \neq 0} |S_i| \cdot \cos \theta_i$$

Выделим из части гамильтониана, не связанной с , некий спин

- На систему воздействуют три фактора:
- Анизотропия, наведенная внешним магнитным полем
- Анизотропия, наведенная намагничиванием спина (точечным воздействием)
- Температурный фактор



- Изучим скореллированность и
- Скоррелированность спинов и сводится к намагниченности

Методы исследования

$$H = H_{mag}|S_0| - |S_0| \sum_j J_{0j}|S_j| \cos \theta_j - \sum_{i \neq 0, j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i \neq 0} |S_i| \cdot \cos \theta_i$$

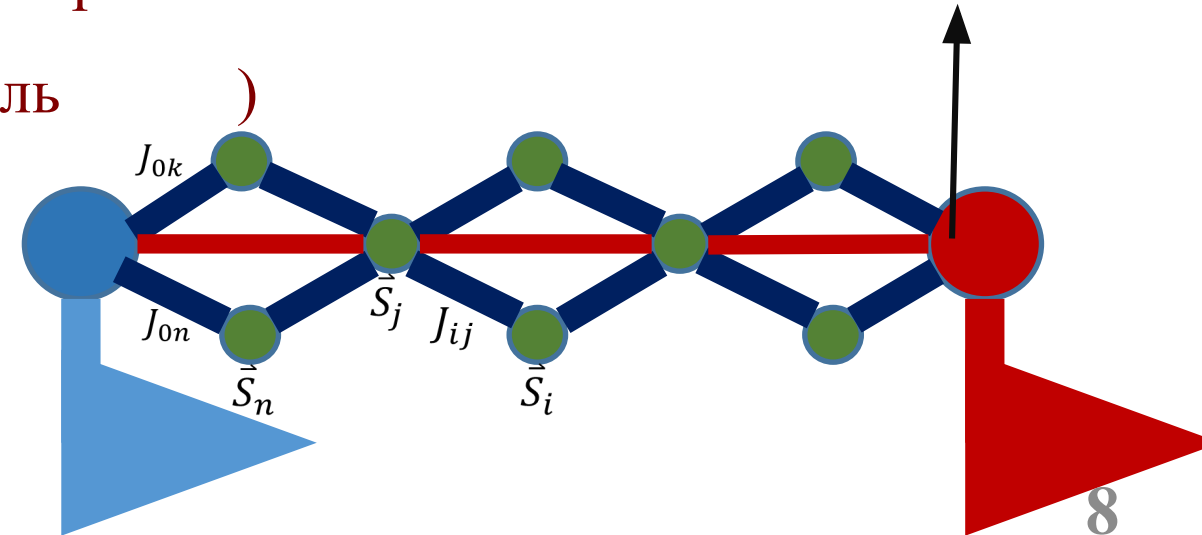
- Внешнее магнитное поле малое: в единицах J

(- ось намагничивания)

- и зафиксированный спин противоположно

направлены (направление против энергетически

менее выгодно, нежели направление вдоль

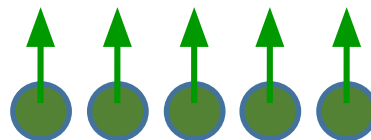


Методы исследования

$$H = H_{mag}|S_0| - |S_0| \sum_j J_{0j}|S_j| \cos \theta_j - \sum_{i \neq 0, j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i \neq 0} |S_i| \cdot \cos \theta_i$$

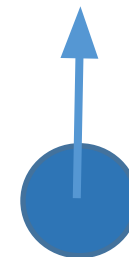
- Каждый спин в системе единичной длины:
- Спины и рассматриваются как спиновые

агломераты:

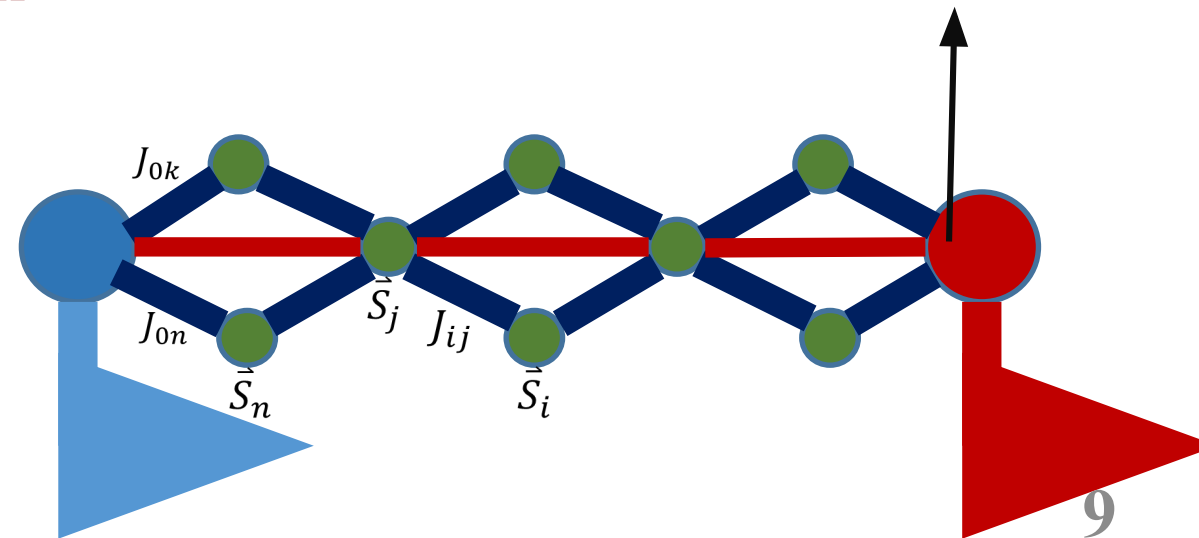


аппроксимируется

как



- Рассматриваем только ферромагнитные и антиферромагнитные взаимодействия



Методы исследования

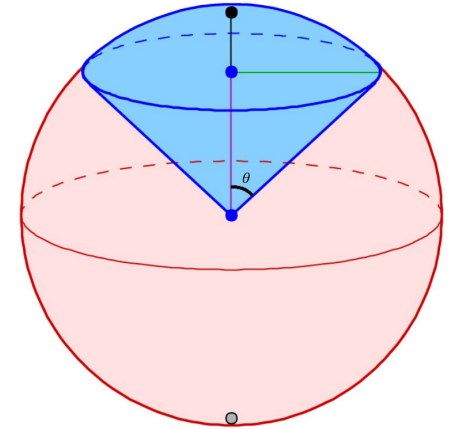
Для исследования проведем численный эксперимент при помощи метода Монте-Карло

Для этого была разработана программа на языке C++, реализующая реалистичное моделирование поведения спиновых систем

В ходе моделирования следующие средне-наблюдаемые:

- Намагниченность спина
- Энергия системы E

Также была разработана вспомогательная программа для конструирования спиновых произвольной конфигурации цепочек и формирования входных файлов для моделирования



1. Генерация начального состояния системы
2. Смещение углов i -го спина θ_i и φ_i на некоторое значение в пределах некоторого диапазона («пробное» состояние спина)
3. Вычисление разницы энергий δH между «пробным» и исходным состояниями системы
4. $\delta H < 0$ – то состояние принимается
5. $\delta H > 0$, то состояние принимается с вероятностью $e^{\delta H/k_B T}$
6. Возвращаемся к шагу 2



Методы исследования

Окно вспомогательной программы

Параметры
спиновой
системы

Интерактивный
конструктор

The screenshot shows the 'Monte Carlo Preferences' window with the following sections:

- Basic parameters:** Number of spins: 32, Jafm: 1.0, Jfm: 5.0, Initial temperature: 0.0, Final temperature: 0.2, Multiplier: 0.25, Magnetic field: 0.1, Debug mode: checked.
- Frozen spins:** Number of frozen spins: 0, ID of output spin: 31. A table for frozen spins configuration is shown below:

ID	Phi	Theta
1	0	180.0

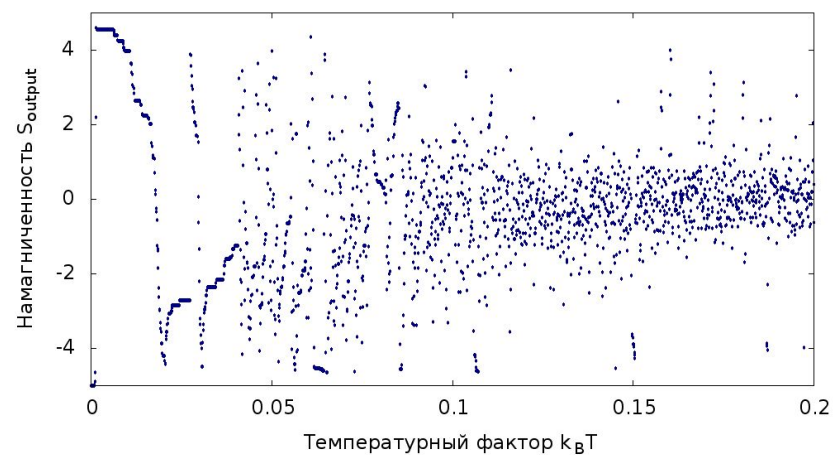
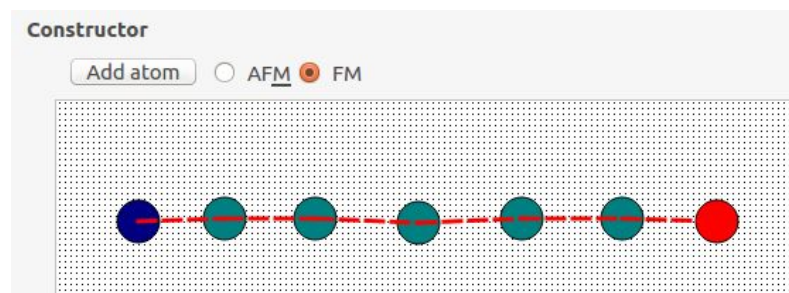
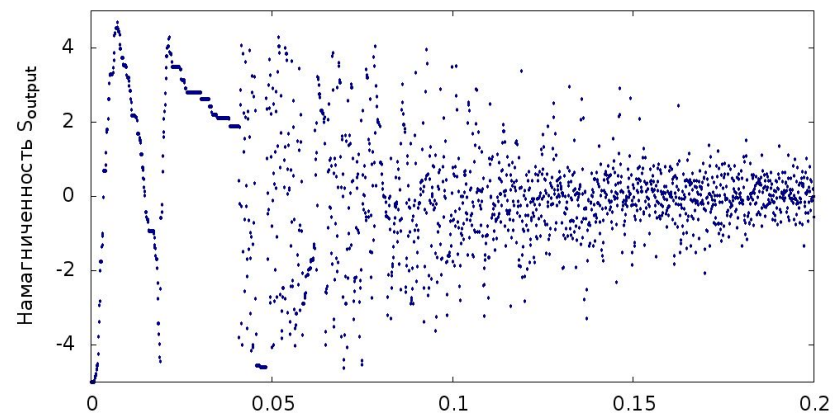
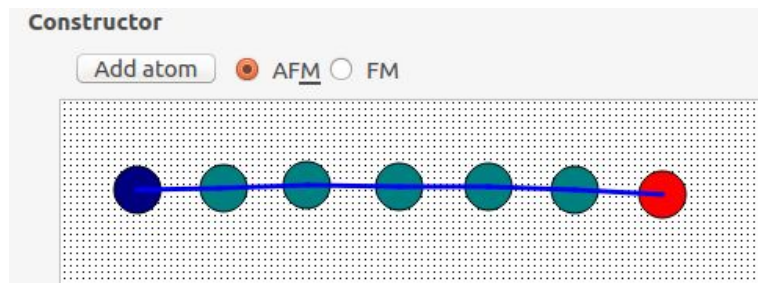
Buttons: Calculate dimers, Calculate rombs.
- Exchange:** Number of couples: 39. Information: Output mode for atom 31 is on. Basic.txt contains:

```
32
1
0.0
0.2
0.25
0.1
1 5.000
2 1.000
3 1.000
4 1.000
5 1.000
```

Buttons: Calculate dimers, Calculate rombs.
- Temperature mode:** Increasing kT (selected), kT++ step: 1000, Step of kT: 0.0001. Length of wire: 1. Buttons: Dimers, EAD, Rombs, Start MC, Stop MC, E0 = null.
- GnuPlot axial scale:** Step, kT, Energy, Magnet (-5, 5) input fields.
- Constructor:** Add atom button, AFM/FM radio buttons. A 2D lattice of atoms is shown with a central atom highlighted in red. Buttons: plot E(kT), plot E(step), plot M(kT), plot M(step), plot (E - E_0)(kT), Close pictures.

Результаты

Рассмотрим простейшие конфигурации:

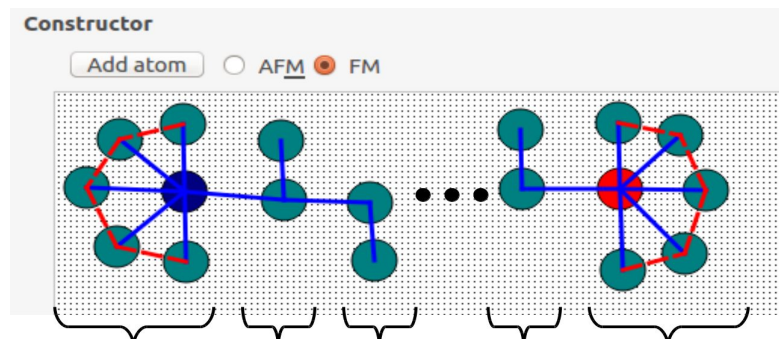


Значит, попробуем усложнить геометрию цепочки

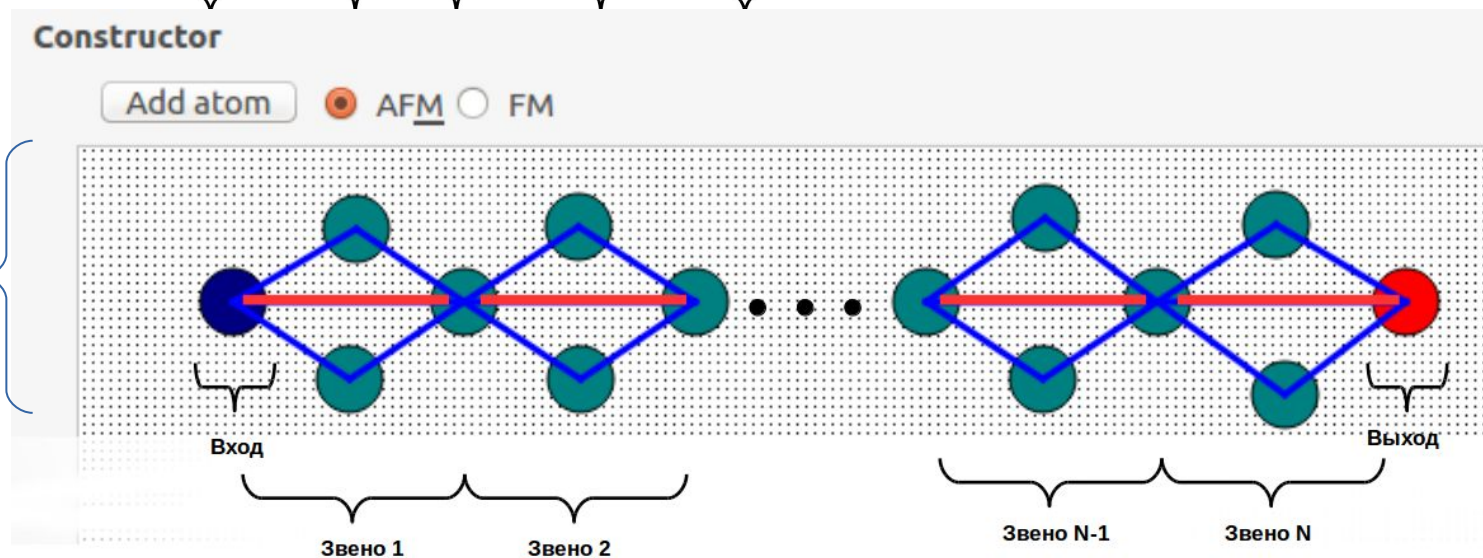
Результаты

Перейдем к более сложным конфигурациям

“Димеры”



“Ромбы”

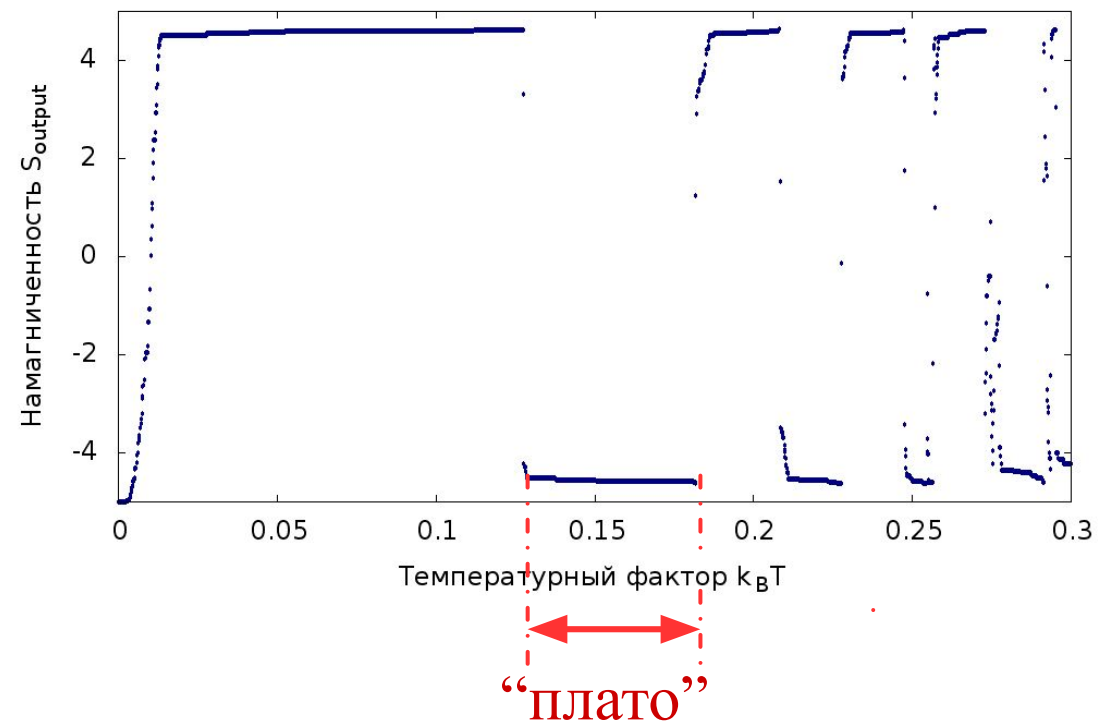
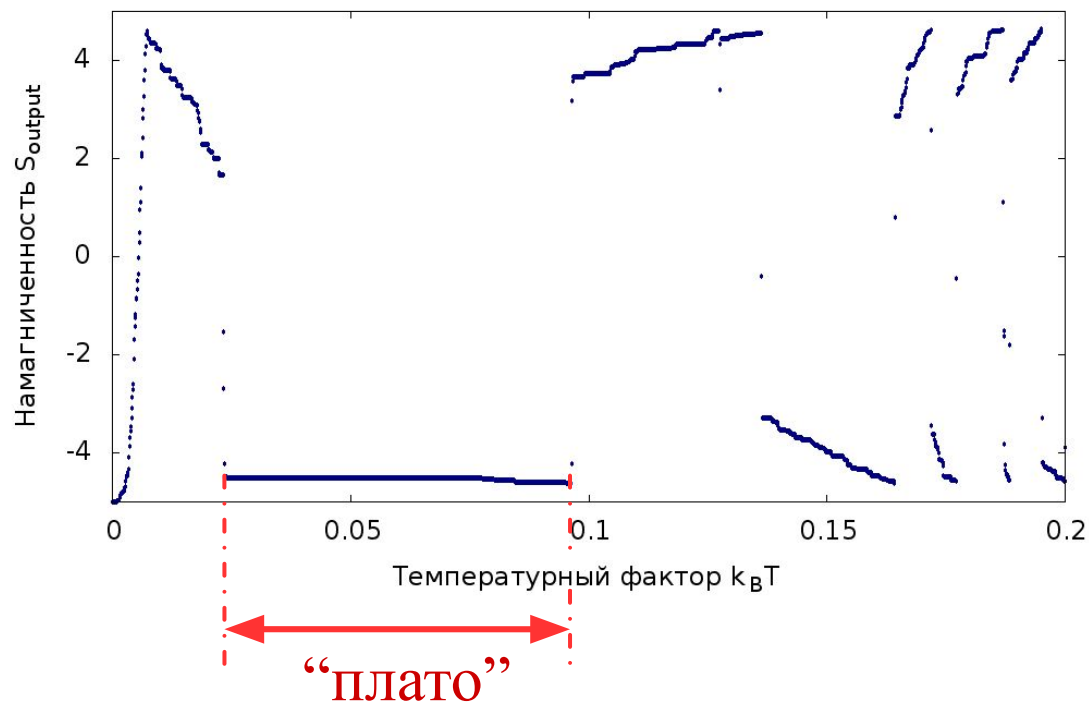


Результаты

Графики зависимости проекции намагниченности спина при длине цепочки $L = 7$

• “димеры”

• “ромбы”



Результаты

Таким образом, нас интересуют такие параметры “плато” как:

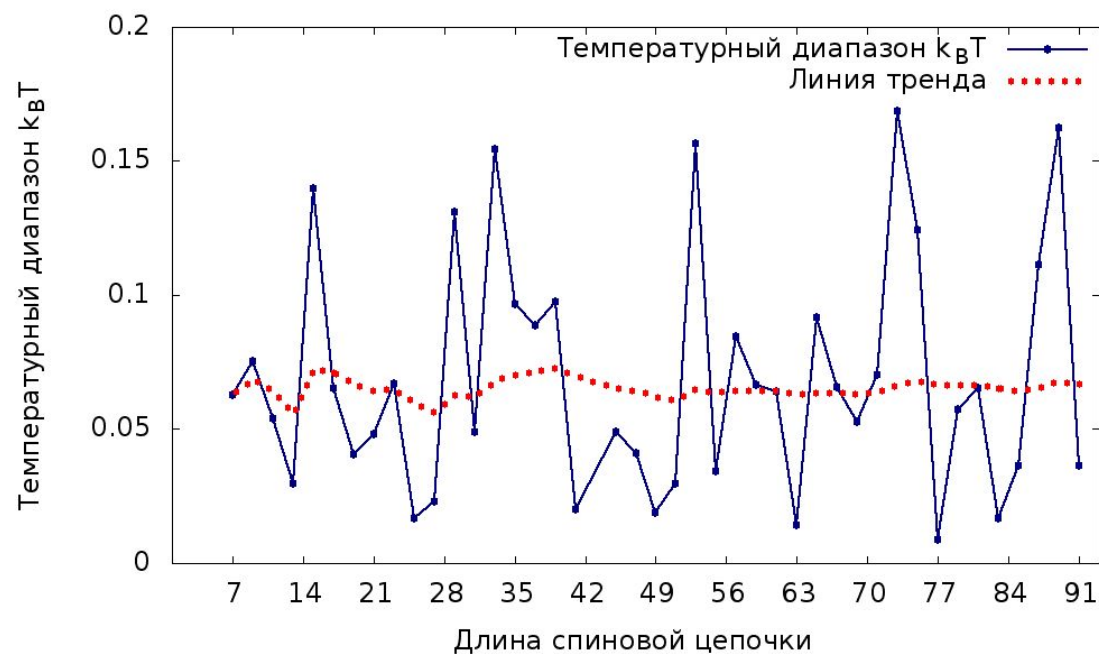
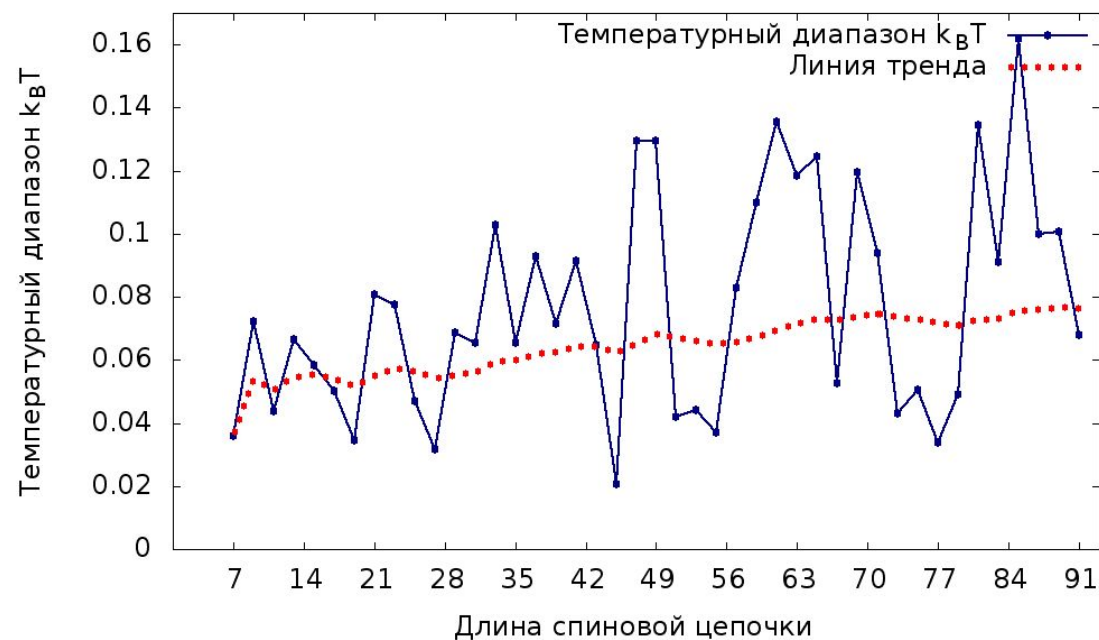
- температурная ширина “плато”
- температура возникновения “плато”
- **Рассмотрим, как эти характеристики меняются в зависимости от изменения длины цепочки**

Результаты

Температурная ширина “плато” для цепочек типов:

• “димеры”

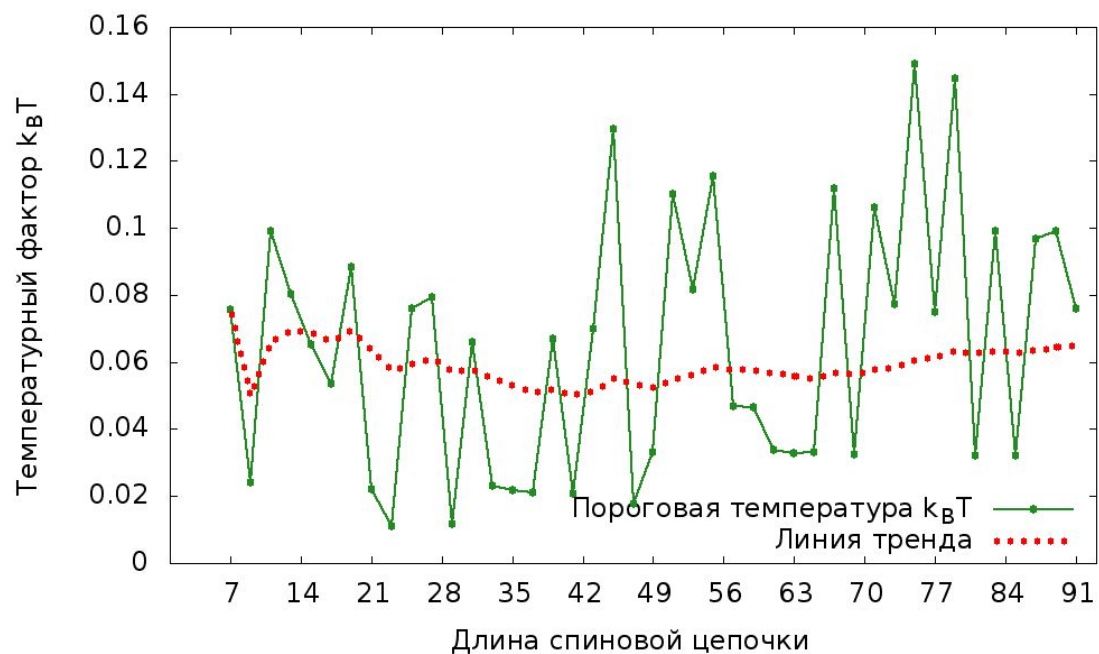
• “ромбы”



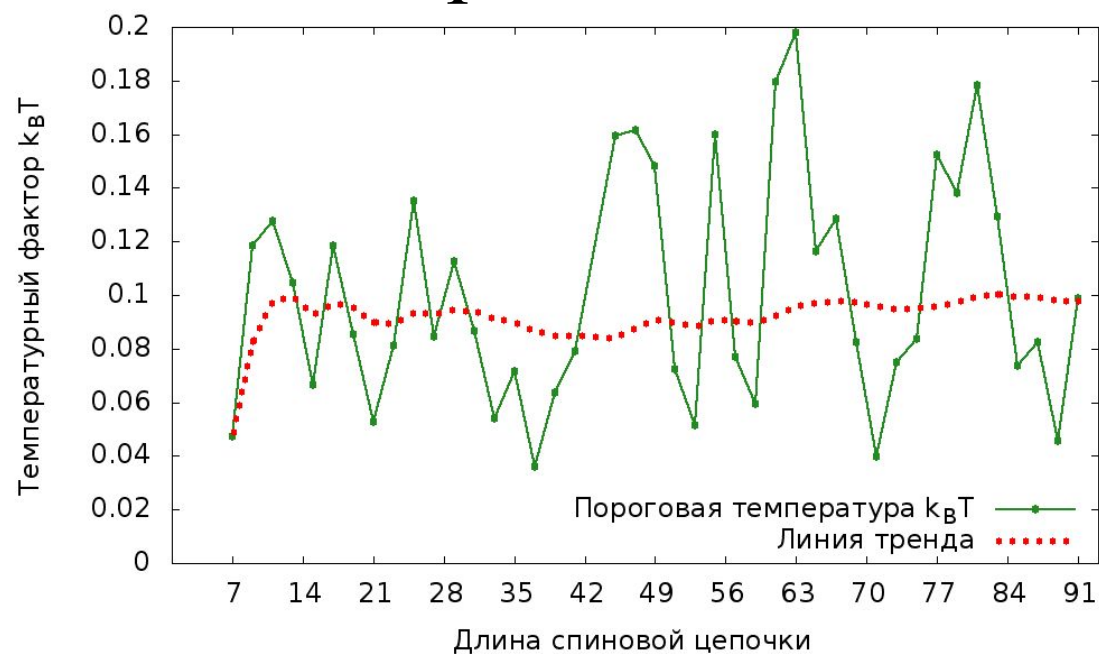
Результаты

Температура возникновения “плато”

• “димеры”



• “ромбы”



Заключение

- “Плато” стабильно для обеих рассмотренных конфигураций;
- Температурная ширина “плато” и температура зарождения “плато” воспроизводятся неизменными при каждом запуске моделирования для каждой конфигурации;
- Ширина “плато” и температура зарождения “плато” не подавляются с ростом длины спиновой цепочки.