

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

## Цели и задачи

### Цель:

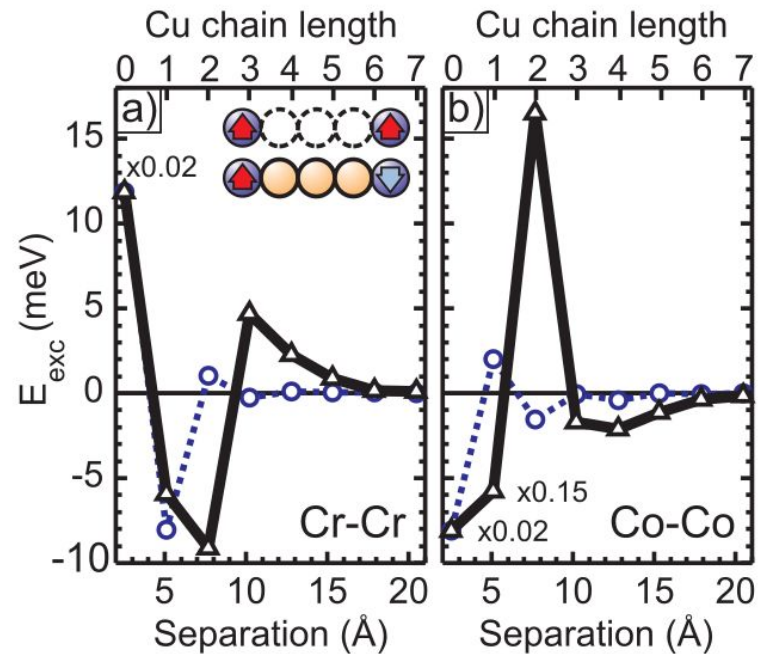
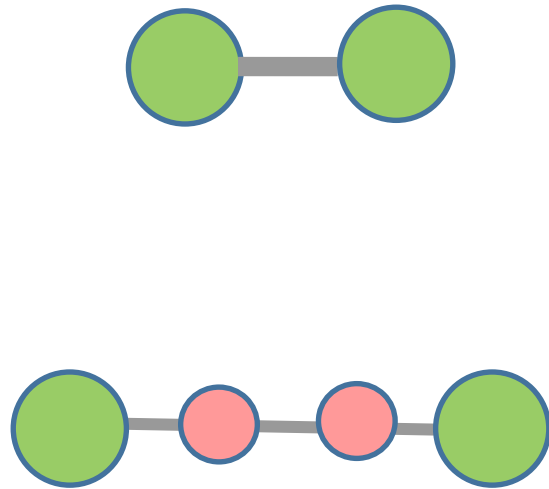
Исследовать влияние точечных локальных магнитных воздействий на поверхностные структуры атомов переходных металлов, адсорбированных на проводящую поверхность.

### Задачи:

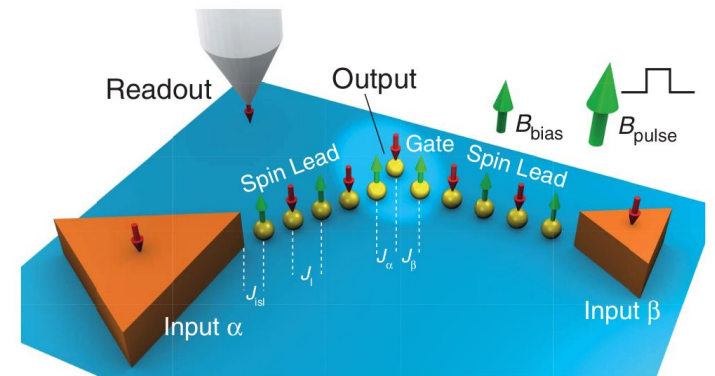
- Провести обзор ранних работ, посвященных исследованию обменных взаимодействий между атомами переходных металлов, адсорбированных на проводящую поверхность;
- Разработать компьютерную программу для моделирования спиновых систем при помощи метода Монте-Карло.

# 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]

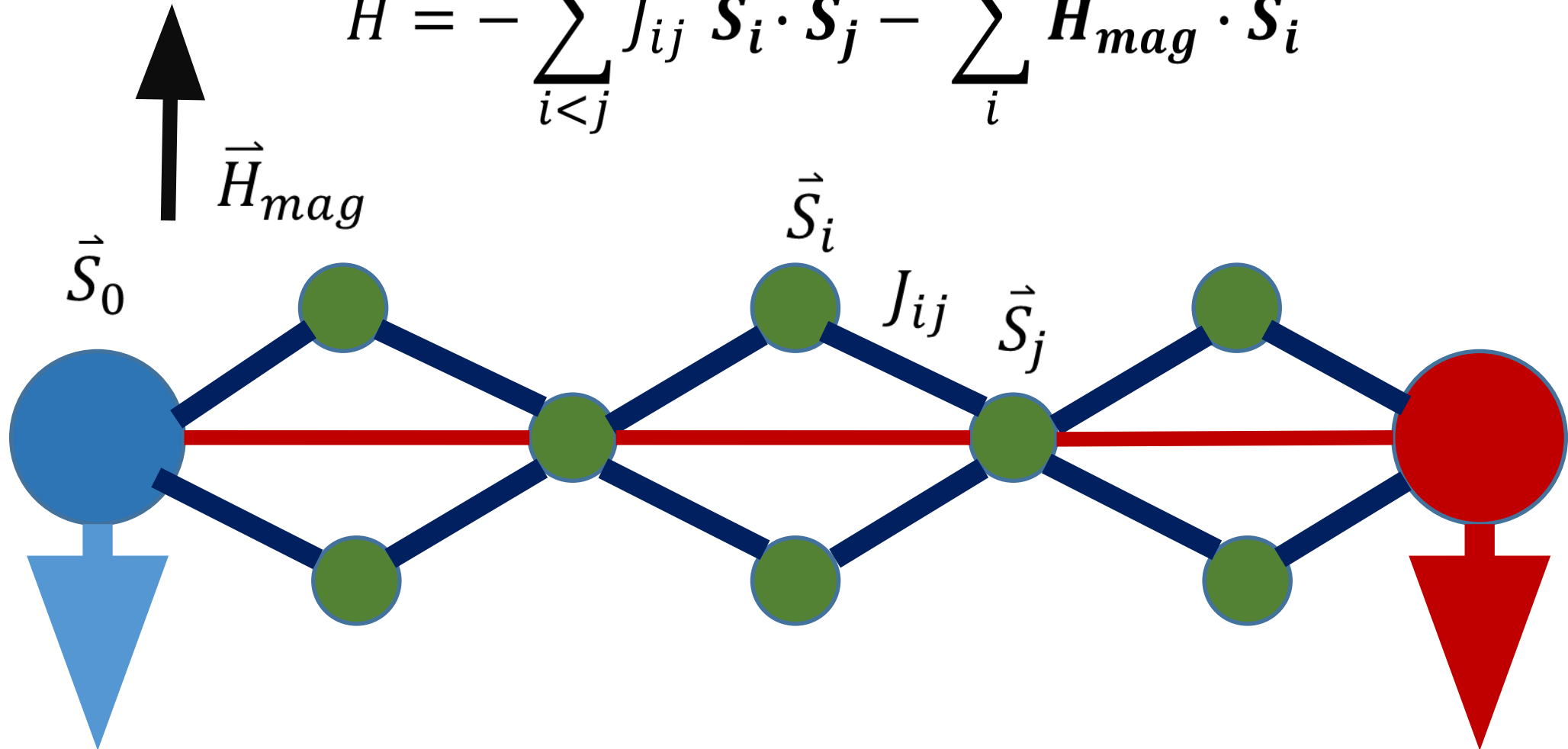


[1] P. A. Ignatiev, N. N. Negulyaev, et al., Phys. Rev. Lett., 101, 036809 (2008)

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

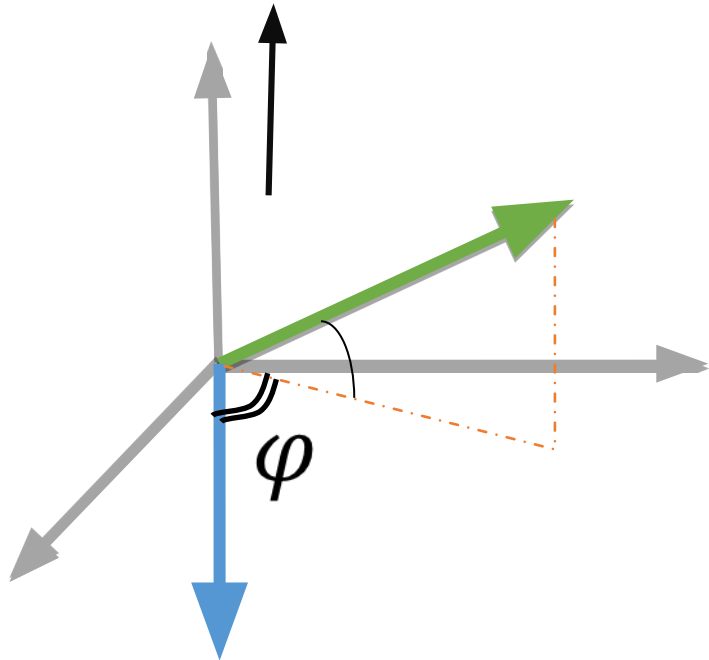
# Методы исследования

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



## Методы исследования

Трактуем точечное воздействие на уровне модели Гейзенберга



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

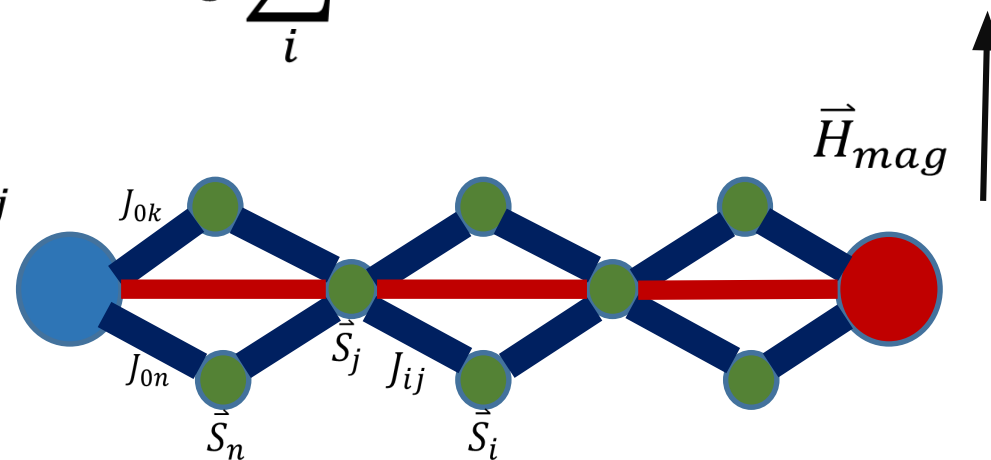
## Методы исследования

Трактуем точечное воздействие на уровне модели Гейзенберга:

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

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

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

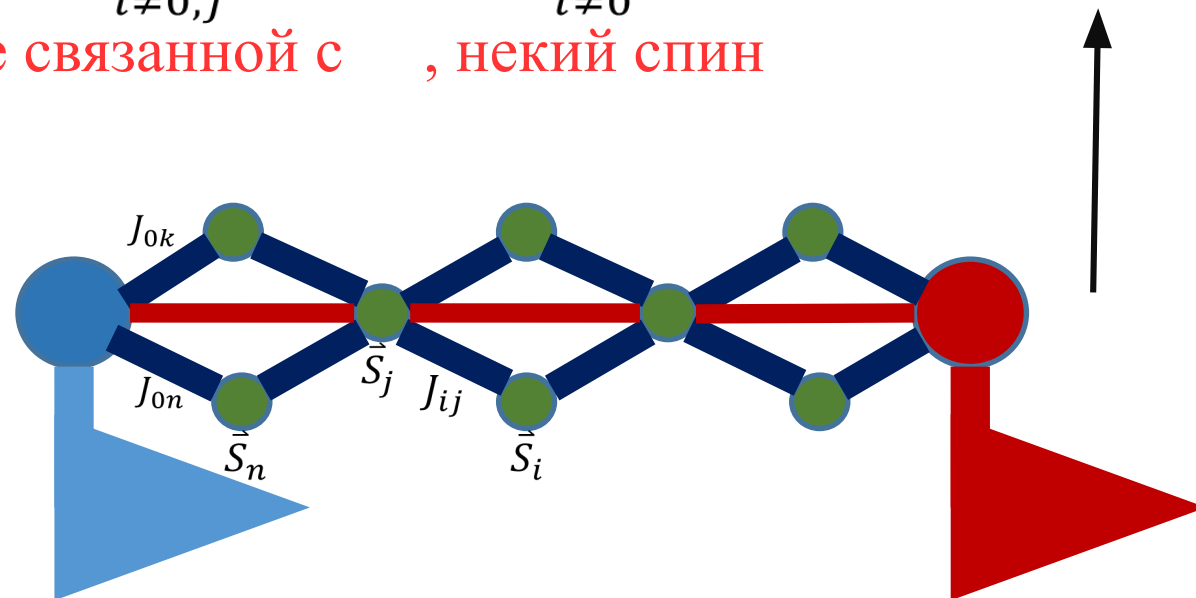


## Методы исследования

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

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

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

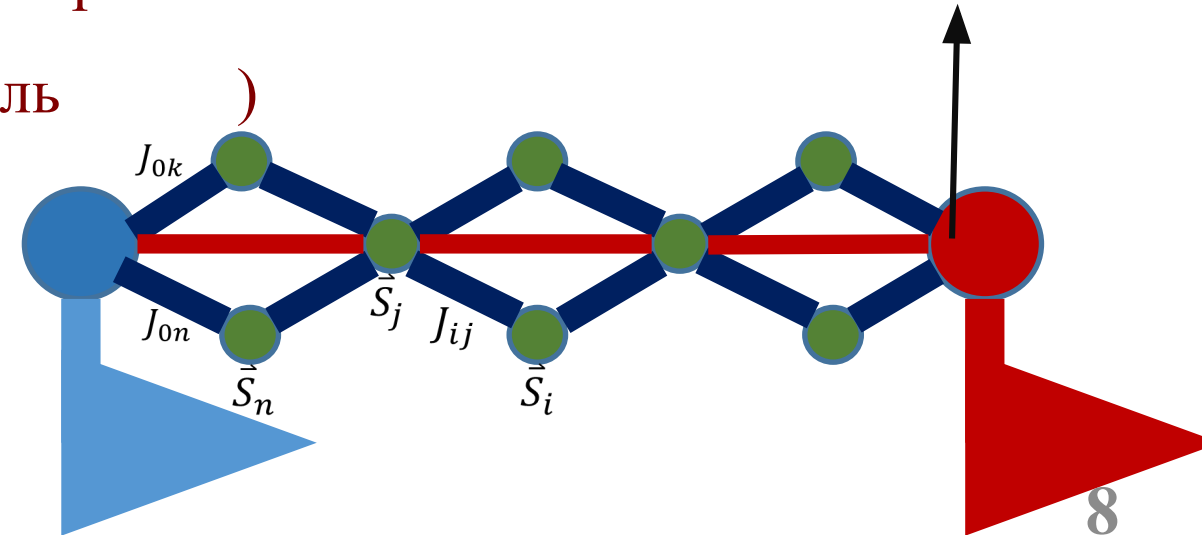
- Внешнее магнитное поле малое: в единицах J

( - ось намагничивания)

- и зафиксированный спин противоположно

направлены (направление против энергетически

менее выгодно, нежели направление вдоль



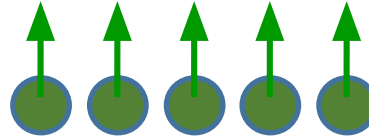


## Методы исследования

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

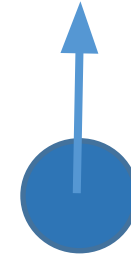
- Каждый спин в системе единичной длины:
- Спины и рассматриваются как спиновые

агломераты:

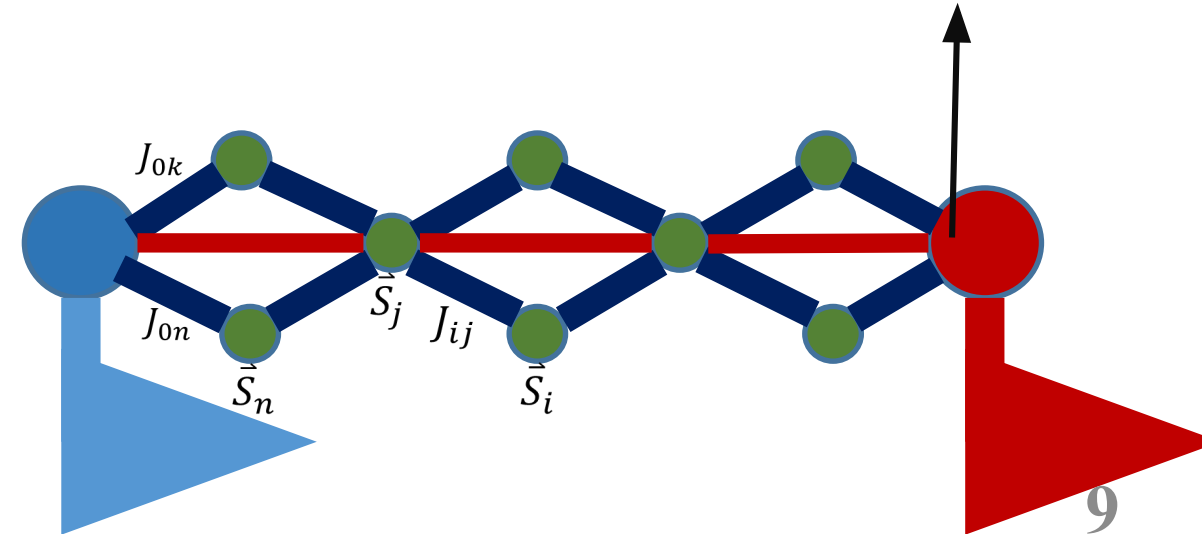


аппроксимируется

как



- Рассматриваем только ферромагнитные и антиферромагнитные взаимодействия



# Методы исследования

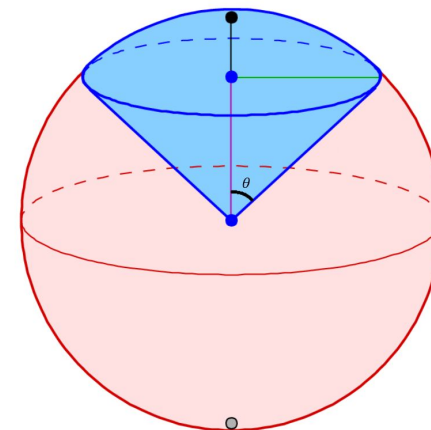
Для исследования проведем численный эксперимент при помощи метода Монте-Карло

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  $\theta_i$  и  $\varphi_i$  на некоторое значение в пределах некоторого диапазона («пробное» состояние спина)
3. Вычисление разницы энергий  $\delta H$  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

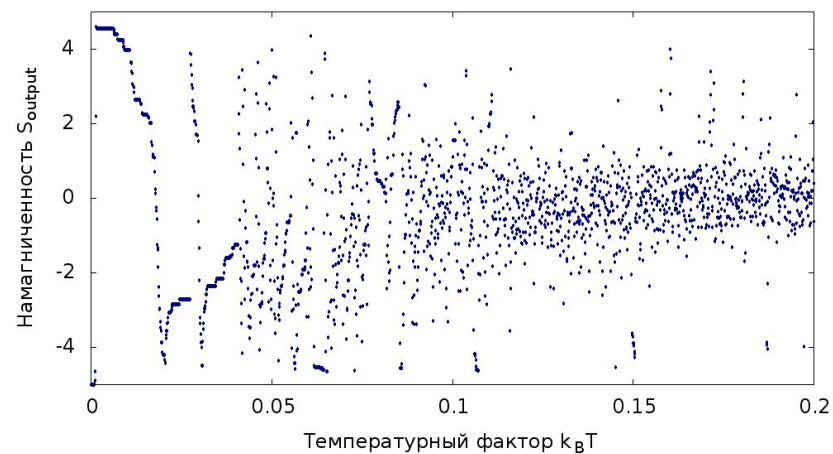
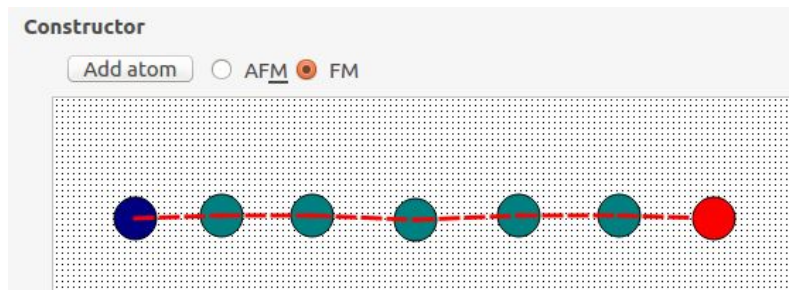
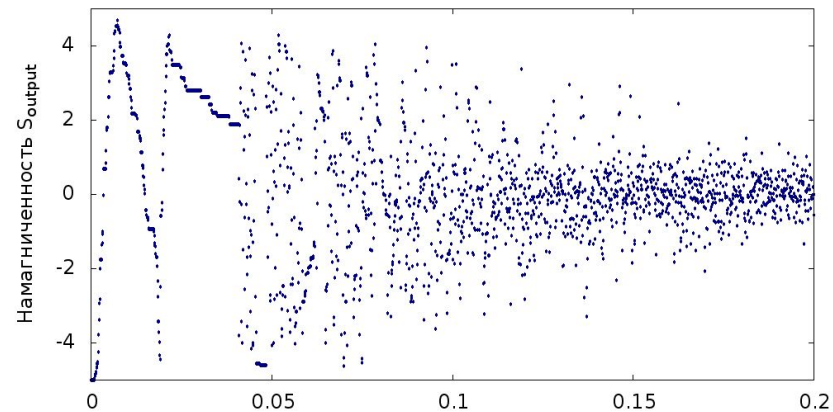
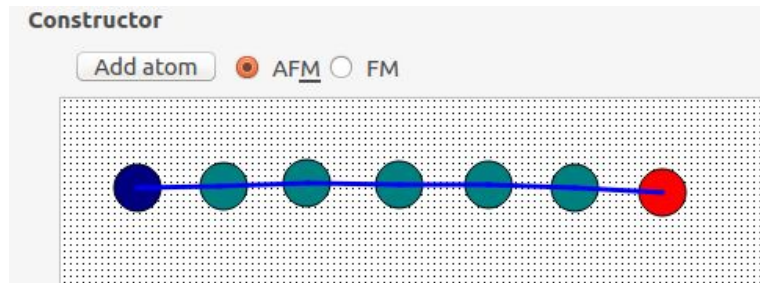
Buttons: Calculate dimers, Calculate rombs.
- Exchange:** Number of couples: 39. Information: Output mode for atom 31 is on. Basic.txt contains:

```
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, E0 = null.
- GnuPlot axial scale:** Step, kT, Energy, Magnet (-5 to 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:

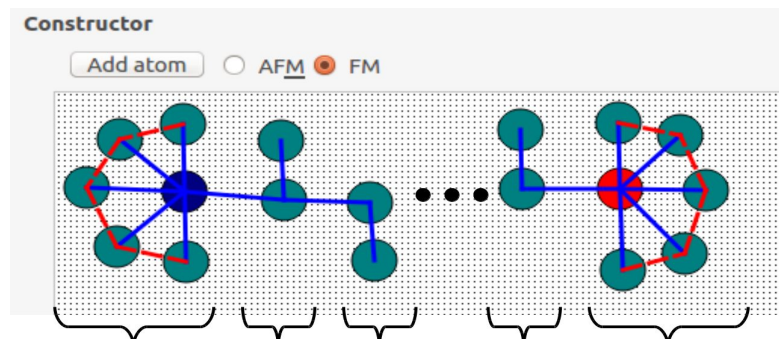


Значит, попробуем усложнить геометрию цепочки

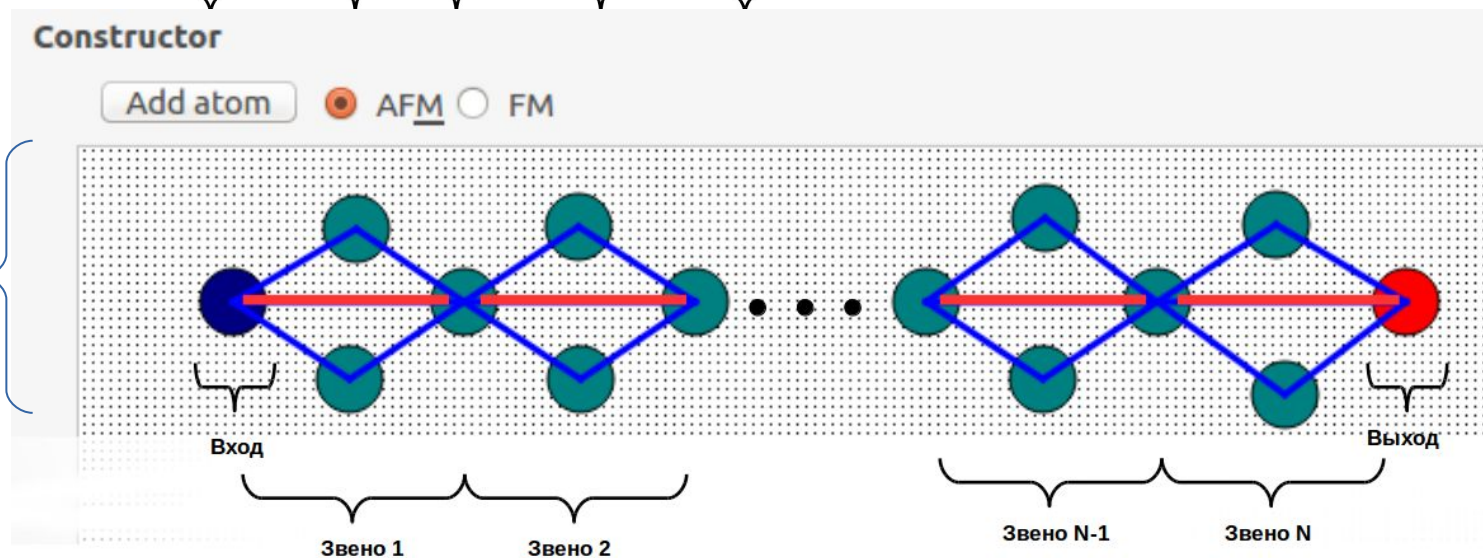
# Результаты

Перейдем к более сложным конфигурациям

“Димеры”



“Ромбы”

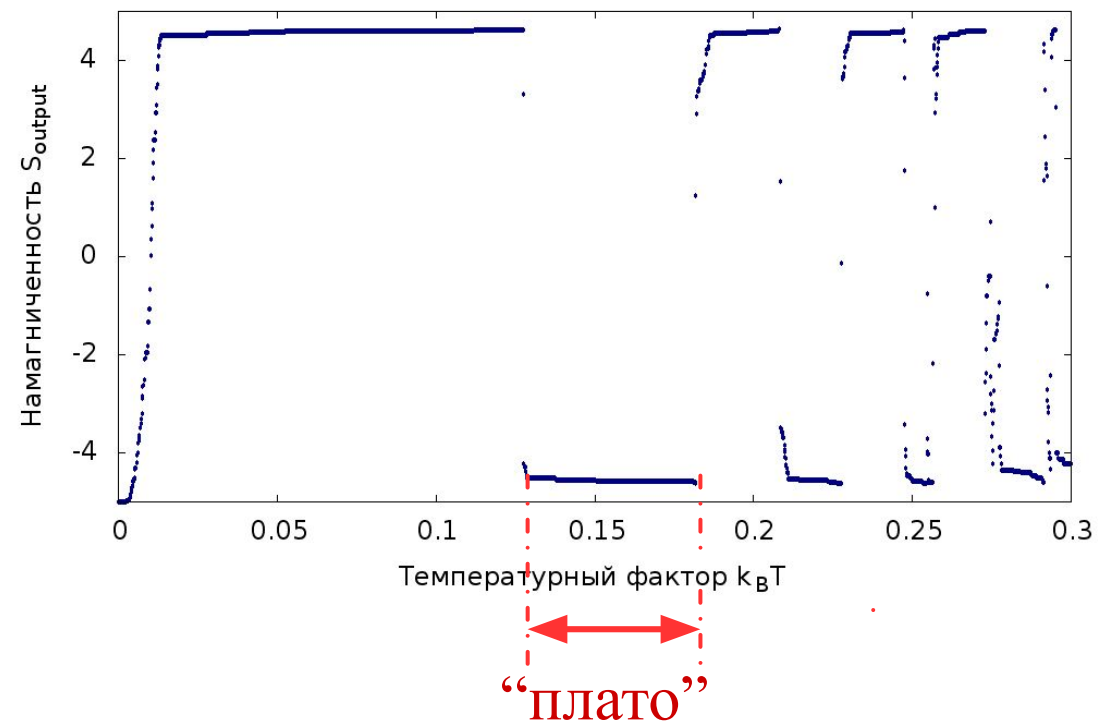
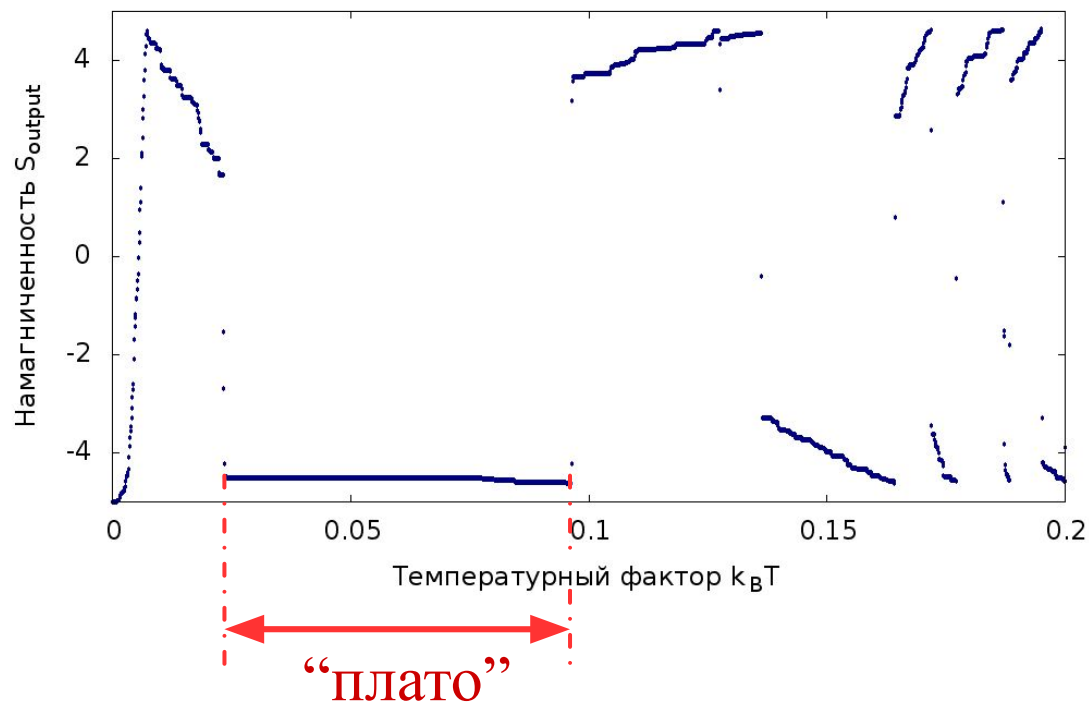


# Результаты

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

• “димеры”

• “ромбы”



## Результаты

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

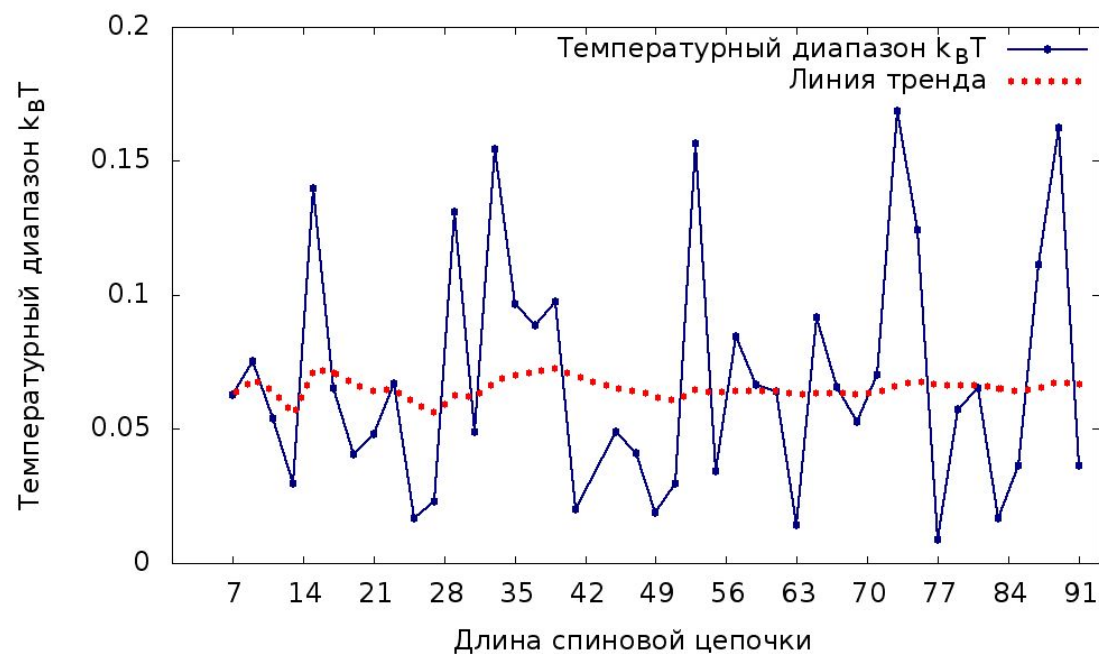
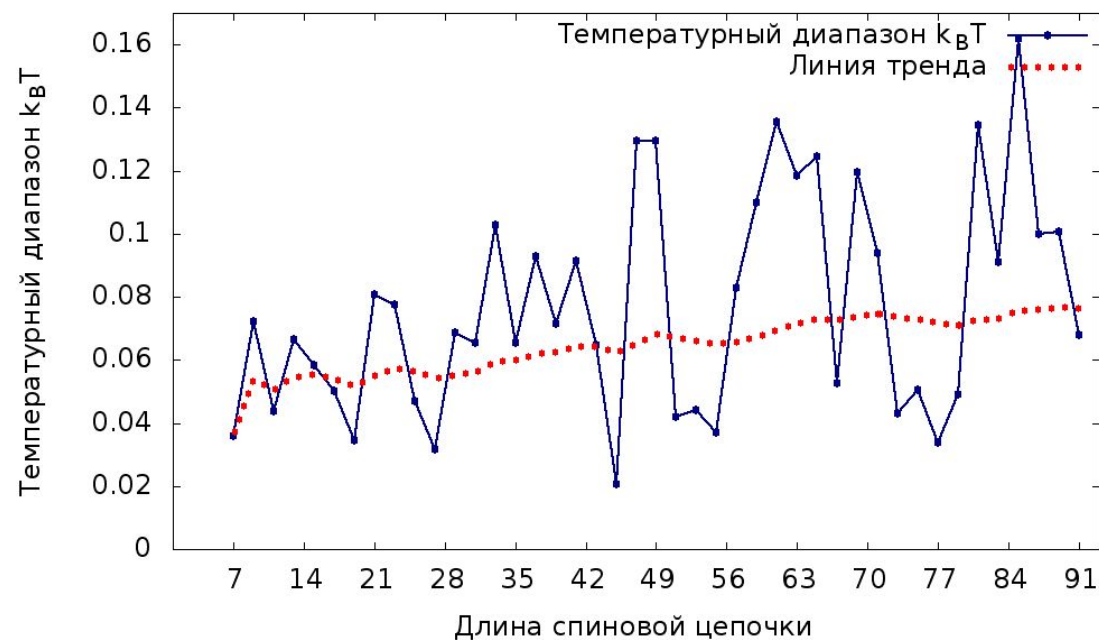
- температурная ширина “плато”
- температура возникновения “плато”
- **Рассмотрим, как эти характеристики меняются в зависимости от изменения длины цепочки**

# Результаты

Температурная ширина “плато” для цепочек типов:

• “димеры”

• “ромбы”

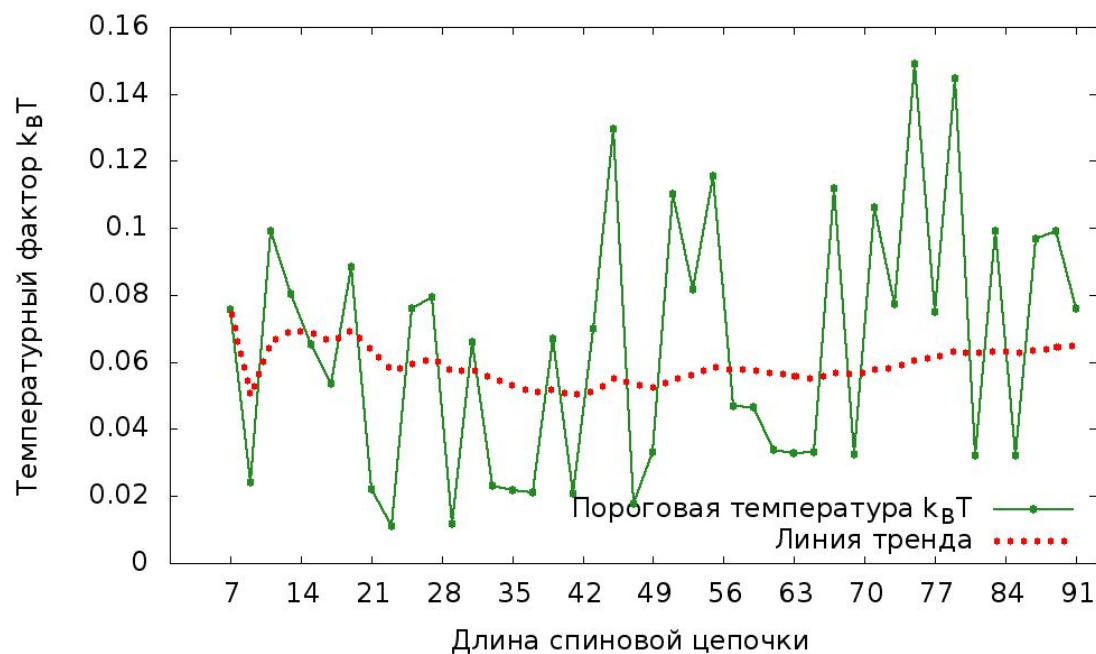




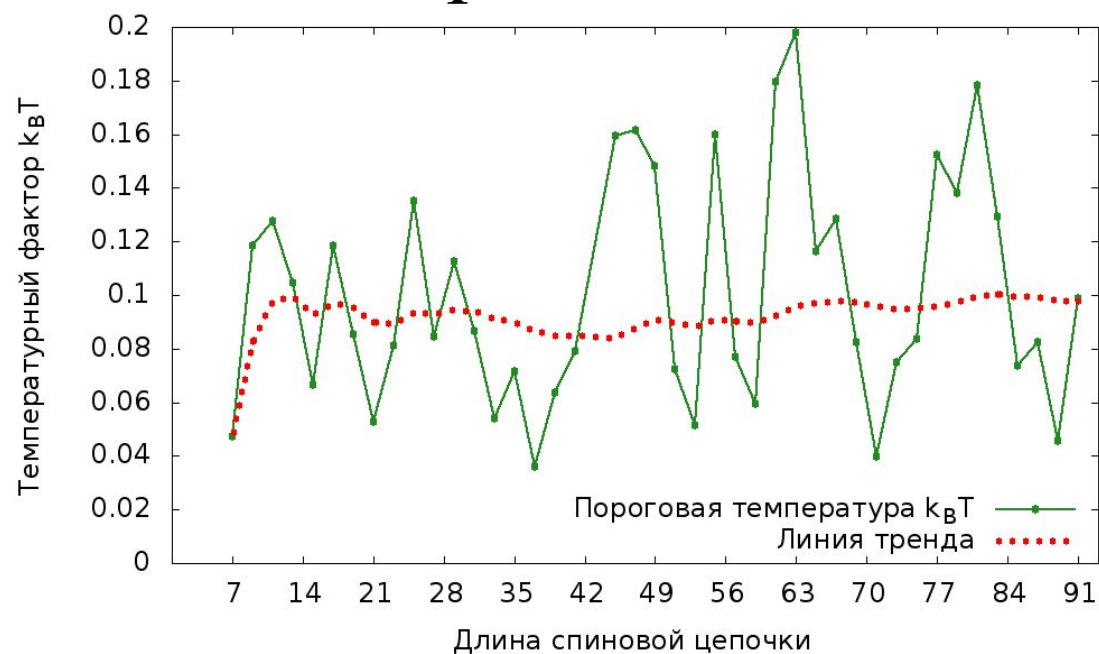
# Результаты

## 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.