

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**  
**Інститут високих технологій**

Завідувач кафедри нанофізики конденсованих середовищ  
проф. Валерій Антонович Скришевський  
Протокол №\_\_\_\_ засідання кафедри  
від “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2021 р.

**Фазові переходи в антиферромагнітному кільці,  
індуковані зовнішнім магнітним полем**

Випускна кваліфікаційна робота бакалавра  
студента спеціальності

105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

**Єлизавети БОРИСЕНКО**

Наукові керівники

док. фіз.-мат. наук, проф. **Денис ШЕКА**

канд. фіз.-мат. наук **Олександр ПИЛИПОВСЬКИЙ**

Оцінка захисту роботи

---

**Київ 2021**

## Реферат

Випускна кваліфікаційна робота бакалавра: 44 стор., 12 рис., 1 додаток, 49 джерел.

У роботі описано орієнтаційні фазові переходи в антиферомагнітному спіновому ланцюжку у формі кільця під дією зовнішнього постійного однорідного магнітного поля в неперервній класичній моделі. Досліджено рівноважні стани системи та встановлено просторові розподіли параметрів порядку в них. Побудовано фазову діаграму антиферомагнітного кільця в магнітному полі та встановлено області стійкості основних станів в залежності від кривини кільця та значень зовнішнього поля.

**Ключові слова:** АНТИФЕРОМАГНЕТИК, СПІНОВИЙ ЛАНЦЮЖОК У ФОРМІ КІЛЬЦЯ, КРИВОЛІНІЙНИЙ МАГНЕТИЗМ, СПІН-ФЛОП ПЕРЕХІД

# ЗМІСТ

<b>Вступ</b>	<b>4</b>
<b>1 Огляд літератури</b>	<b>6</b>
1.1 Магнітні взаємодії.....	6
1.2 Орієнтаційні фазові переходи в антиферомагнетиках .....	11
1.3 Криволінійні квазіодновимірні антиферомагнетики.....	15
1.4 Методи одержання та властивості одновимірних АФМ ланцюжків .	17
1.5 Висновки до розділу .....	20
<b>2 Результати роботи</b>	<b>21</b>
2.1 Постановка задачі.....	21
2.2 Модель системи.....	21
2.3 Спін-флоп перехід.....	24
2.3.1 Вихровий стан .....	25
2.3.2 Опіон стан .....	27
2.4 Спін-фліп перехід.....	30
2.5 Фазова діаграма рівноважних станів.....	32
<b>Висновки</b>	<b>34</b>
<b>Додаток А. Спін-граткові моделювання</b>	<b>43</b>

## Вступ

Сучасний розвиток нанотехнологій дозволяє запис, обробку та зчитування інформації з використанням елементарних носіїв атомних масштабів, де визначальну роль має спін окремого електрону [1, 2]. Технологічно можливим є створення спін-залежних пристроїв на основі феромагнітних матеріалів, проте наявність так званих паразитних полів (або полів розмагнічування) призводить до взаємного впливу попередньо ізольованих комірок і заважає подальшому зменшенню геометричних розмірів таких логічних пристроїв. Вплив паразитних полів можна послабити, використовуючи різні феромагнітні сполуки, магнітні моменти яких між собою орієнтуються антипаралельно. Але такі штучно створені антиферомагнетики (далі АФМ) не є повністю скомпенсованими, в той час як в природних АФМ сполуках поля розмагнічування є нехтовно малими. Це дозволяє щільне розміщення таких структур та зменшення енергоспоживання пристроїв, створених на їх основі [3].

Окрім вищезгаданих можливостей мініатюризації, АФМ-спінтроніка характеризується частотами перемикавання в терагерцовому діапазоні, що на кілька порядків перевищує значення цих частот для феромагнетиків, і дозволяє спостерігати швидко спінову динаміку цих матеріалів. До того ж, серед природних магніто-впорядкованих речовин АФМ впорядкування зустрічається частіше, ніж феромагнітне. Антиферомагнетики можуть бути напівпровідниками та металами, або ж проявляти діелектричні чи металічні властивості в залежності від спінової поляризації прикладеного електричного струму. Це дозволяє комбінування різних властивостей для побудови нових спінтронних пристроїв та налаштування їх параметрів у широкому діапазоні [3, 4, 5].

Окремо від оптимізації роботи пристроїв за допомогою зміни їх матеріальних параметрів, відгук магнітних нанооб'єктів можна модифікувати змінюючи їх геометричні параметри, що активно вивчається для феромагнетиків [6]. Зокрема, локальні геометричні викривлення зразків індукують ефективні взаємодії, вплив яких призводить до порушення просторової симетрії інверсії, виникнення і стабілізації магнітних текстур, параметри яких залежать від геометричних властивостей магнетика та різних магнітокіральних ефектів [7, 8]. Однак властивості криволінійних антиферомагнетиків досліджено значно менше порівняно з феромагнетиками, хоча нещодавні теоретичні дослідження також вказують на можли-

вість модифікації фізичних властивостей хелікоїдальних АФМ ланцюжків за допомогою зміни таких параметрів як кривина та кручення [9].

Сучасні технології синтезу наноматеріалів дозволяють створення різних типів криволінійних нанорозмірних систем: вирощування нанодротів довільної конфігурації за допомогою сфокусованого електронного променя [10], синтез квазіодновимірних магнітних ланцюжків різної форми [11, 12], відкритих і замкнених спінових кілець у складі органічних молекул [13, 14] та ін., тому теоретичні дослідження фундаментальних властивостей таких систем наразі є актуальними.

Дану роботу присвячено теоретичним дослідженням рівноважних станів та фазових переходів в антиферомагнітних спінових кільцях в зовнішньому магнітному полі та пошуку принципових відмінностей їх властивостей від прямих спінових ланцюжків. Визначено вплив викривленості спінового ланцюжка на параметри цих переходів та основні стани, області їх стійкості.

# Розділ 1. Огляд літератури

## 1.1. Магнітні взаємодії

Розглядаючи магнітні властивості твердих тіл, всі кристалічні речовини можна поділити на дві групи: магнітовпорядковані, тобто ті, в яких магнітні моменти окремих атомів мають впорядковану орієнтацію, та ті, в яких магнітне впорядкування відсутнє. Макроскопічно наявність і тип магнітного впорядкування визначається поведінкою речовини в зовнішньому магнітному полі, тобто її магнітною сприйнятливостю. Зокрема, серед магнітовпорядкованих речовин виділяють феромагнетики (мають ненульовий спонтанний магнітний момент за відсутності зовнішнього магнітного поля та температур, нижчих від температури Кюрі), антиферомагнетики (описуються сукупністю підґраток, що є повністю скомпенсованими за намагніченістю за відсутності зовнішнього поля) і ферити (є сукупністю неповністю скомпенсованих підґраток, мають малий спонтанний магнітний момент) [15].

Антиферомагнітне впорядкування речовини зберігається за температур, нижчих від температури Нееля  $T_N$  : магнітна сприйнятливість АФМ зразка в цілому завжди є малою, проте її величина зростає за температур порядку  $T_N$  і має максимум при  $T = T_N$  . За температур  $T > T_N$  речовина переходить в парамагнітний стан і її магнітна сприйнятливість спадає за законом Кюрі–Вейса.  $T_N$  також називають характерною температурою порядку АФМ речовин, і її величину може бути визначено в термінах коефіцієнтів молекулярних полів кристалу [16].

На мікроскопічному рівні магнітне впорядкування речовини виникає через зв'язок між напрямками спінів електронів її окремих атомів, який обумовлений кореляцією між просторовою симетрією хвильової функції та величиною сумарного спіну системи електронів внаслідок принципу нерозрізненості однакових частинок. Кулонівську взаємодію атомів з урахуванням цього квантового ефекту, що визначає залежність енергії системи від взаємної орієнтації її магнітних моментів, називають *обмінною взаємодією* [15].

Обмінна взаємодія є інваріантною відносно одночасних поворотів всіх магнітних моментів. Густина обмінної енергії визначається гамільтоніаном Гайзенберга [15, 17]:

$$H_{\text{ex}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

де  $\mathbf{S}_i$  — оператор спіну атома в  $i$ -му вузлі ґратки,  $J_{i,j}$  — обмінний інтеграл  $i$ -го і  $j$ -го атомів, що враховує відстань між ними. Енергія обмінної взаємодії двох атомів визначається ступенем перекриття їх хвильових функцій, тому величина обмінного інтегралу експоненційно спадає зі збільшенням відстані між атомами. Завдяки цьому величину  $J_{i,j}$  можна вважати відмінною від нуля тільки якщо  $i$ -й та  $j$ -й атоми є сусідніми. Для феромагнітно впорядкованих речовин значення обмінних інтегралів є додатними відповідно до означення (1), завдяки чому в основному стані за температур, нижчих від температури Кюрі, спінові моменти всіх атомів мають однакову орієнтацію.

Мікроскопічну теорію антиферомагнетизму можна побудувати в припущенні, що такий кристал являє собою сукупність декількох магнітних підґраток, кожна з яких має ненульову густину магнітного моменту. АФМ найпростішої структури складаються з двох еквівалентних підґраток: мінімуму енергії відповідає антипаралельна орієнтація спінів сусідніх атомів (які належать різним підґраткам), тому обмінну енергію таких кристалів можна записати за допомогою гайзенберівського гамільтоніану (1) з  $J_{i,j} < 0$  [15].

Критерієм наявності АФМ впорядкування є кристалографічна еквівалентність підґраток, тобто наявність елемента кристалічної групи симетрії, що переводить одну підґратку в іншу (або належність всіх магнітних вузлів кристалу єдиній ґратці Браве) [18]. Далі розглядаємо лише колінеарні двопідґраткові АФМ в припущенні рівномодульної моделі [17]. Згідно з цим припущенням на намагніченості окремих підґраток  $M_\nu$ ,  $\nu = 1, 2$ , (магнітні моменти одиниці об'єму) накладається наступна умова:

$$M_1^2 = M_2^2 = M_0^2 = \text{const.} \quad (2)$$

Вектор магнітного моменту  $i$ -го атома  $\nu$ -ї підґратки зі спіном  $\mathbf{S}_{\nu_i}$  вводиться як  $\mathbf{M}_{\nu_i} = g\mu_B\mathbf{S}_{\nu_i}$ , де  $g$  — фактор Ланде,  $\mu_B$  — магнетон Бора.

Якщо характерні масштаби неоднорідностей розподілу  $\mathbf{M}_{\nu_k}$  значно більші за постійну кристалічної ґратки  $a_0$ , можливий опис магнетика в наближенні суцільного середовища, де намагніченості підґраток є неперервними функціями координат, тобто перехід  $\mathbf{M}_{\nu_k} \rightarrow \mathbf{M}_\nu(\mathbf{r})$ , де  $\mathbf{r}$  — радіус вектор [17].

Для подальшого опису зручно ввести вектори сумарної намагніченості та Не-

еля (або феро– і антиферомагнетизму) у кожній точці простору [17]:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(\mathbf{r}) &= \frac{\mathbf{M}_1(\mathbf{r}) + \mathbf{M}_2(\mathbf{r})}{2 |M_0|}, \\ \mathbf{n}(\mathbf{r}) &= \frac{\mathbf{M}_1(\mathbf{r}) - \mathbf{M}_2(\mathbf{r})}{2 |M_0|}. \end{aligned} \quad (3)$$

Вектор  $\mathbf{n}$  можна ввести двома способами, що є фізично еквівалентними, і відрізняються лише за знаком. Вектор феромагнетизму є інваріантним відносно цих двох визначень. Ці вектори є характерними параметрами порядку АФМ систем: при  $|\mathbf{n}| = 1$ ,  $\mathbf{m} = 0$ , впорядкування системи є колінеарно антиферомагнітним, якщо ж  $\mathbf{n} = 0$ ,  $|\mathbf{m}| = 1$ , — АФМ порядок втрачається (впорядкування стає феромагнітним).

Умова (2) накладає певні обмеження на вектори Нееля та сумарної намагніченості: для кожного значення  $\mathbf{r}$  мають виконуватись наступні співвідношення

$$\mathbf{n}^2(\mathbf{r}) + \mathbf{m}^2(\mathbf{r}) = 1, \quad \mathbf{n}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) = 0. \quad (4)$$

В наближенні суцільного середовища обмінна енергія АФМ має наступний вигляд [17]:

$$\begin{aligned} E_{\text{ex}} &= \int W^{\text{ex}}(\mathbf{r}) dV, \\ W^{\text{ex}}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{2} J_{1,2} (\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2) + \frac{1}{2} J'_{1,2,i,k} a_0^2 \frac{\partial \mathbf{M}_1}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{M}_2}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (5)$$

де  $J_{1,2}$ ,  $J'_{1,2,i,k}$  — константи однорідного і неоднорідного обміну відповідно, які можна виразити через обмінні інтеграли в дискретному гамільтоніані (1). У термінах векторів Нееля та сумарної намагніченості густину обмінної енергії (5) можна записати як [17]

$$W^{\text{ex}}(\mathbf{r}) = J \mathbf{m}^2 + \frac{1}{2} J' a_0^2 \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x_i}, \quad (6)$$

де  $J$ ,  $J'_i$  — перераховані з  $J_{1,2}$ ,  $J'_{1,2,i,k}$  обмінні константи.

Магнітоанізотропні взаємодії визначають залежність енергії системи від напрямків її магнітних моментів відносно кристалографічних осей матеріалу, завдяки чому певні напрямки орієнтації спінів є енергетично вигіднішими, ніж інші. Вони мають релятивістське походження, тому є слабкішими за обмінні. До ре-

лятивістських взаємодій в магнетиках належать одноіонна, міжіонна анізотропії, диполь-дипольна взаємодія та взаємодія Дзялошинського–Морії.

*Одноіонна анізотропія* встановлює залежність енергії магнетика від орієнтації його параметрів порядку відносно осей кристалу, що є наслідком спіно-орбітальної взаємодії. Спіновий момент окремого атома зв'язаний з його орбітальним моментом, енергетично вигідний напрям якого визначається електричним полем кристалічної ґратки. Оператор спіно-орбітальної взаємодії для атома з орбітальним і спіновим моментами кількості руху  $\mathbf{L}$  і  $\mathbf{S}$  має вигляд  $H_{so} = \rho (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})$ , де  $\rho$  — константа спіно-орбітальної взаємодії. Ефективний оператор орбітального моменту, наведеного спіном атома  $\mathbf{S}$ , має компоненти  $L_i = k_{ik} S_k$ , де вигляд тензора  $k_{ik}$  визначається симетрією оточення атома [15, 17]. Це дозволяє перейти до ефективного гамільтоніану для одного атома:  $H_{so} \rightarrow \rho k_{ik} S_i S_k$ . Для одноосьових АФМ гамільтоніан одноіонної анізотропії з константою  $K_s$  має вигляд [19]

$$H_{\text{anis}(s)} = -K_s \sum_i \frac{\mathbf{M}_i}{|\mathbf{M}_i|} \cdot \mathbf{e}_A^2, \quad (7)$$

де  $\mathbf{e}_A$  — одиничний вектор вибраного напрямку в кристалі, що визначається симетрією та електричним полем даної кристалічної ґратки. Існування одноіонної анізотропії можливе лише за значень спінів атомів  $S \geq 1$  [19].

*Міжіонна анізотропія* є наслідком взаємодії спінового моменту кожного атома з орбітальними моментами інших атомів, і її внесок в енергію магнетика визначається наступним гамільтоніаном з константою  $K_l$  [19]

$$H_{\text{anis}(l)} = -K_l \sum_{i,j} \frac{\mathbf{M}_i}{|\mathbf{M}_i|} \cdot \mathbf{e}_A \frac{\mathbf{M}_j}{|\mathbf{M}_j|} \cdot \mathbf{e}_A. \quad (8)$$

В наближенні суцільного середовища повну енергію анізотропії АФМ можна записати як [17]

$$E_{\text{anis}} = -\frac{1}{2} \int_V h \left[ K (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_A)^2 + K' (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e}_A)^2 \right] dV, \quad (9)$$

де  $K, K'$  — макроскопічні константи анізотропії. Якщо  $K, K' > 0$ ,  $\mathbf{e}_A$  називають легкою віссю намагнічування: орієнтація спінових моментів вздовж цієї осі відповідає мінімуму енергії. Для анізотропії типу важка вісь (або легка площина)  $K, K' < 0$ , і енергетично вигідна конфігурація магнітних моментів буде належа-

ти площині, що перпендикулярна осі анізотропії.

*Диполь-дипольна взаємодія*, тобто взаємодія кожного магнітного моменту системи із ефективним магнітним полем, створеним всіма іншими магнітними моментами, визначається гамільтоніаном [17]

$$H_{\text{dip}} = -\frac{1}{2} \sum_{v,j} \mathbf{M}_j \cdot [\mathbf{H}_N(\mathbf{r}_{vj}) + \mathbf{H}_F(\mathbf{r}_{vj})], \quad (10)$$

де  $\mathbf{H}_N(\mathbf{r}_{vj})$ ,  $\mathbf{H}_F(\mathbf{r}_{vj})$  — близькодіюча та далекодіюча складові дипольного поля відповідно. Доданок  $-\frac{1}{2} \sum_{v,j} [\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{H}_N(\mathbf{r}_{vj})]$  є одним із джерел міжіонної анізотропії. Далекодіюче дипольне поле, яке залежить лише від розподілу сумарної намагніченості, можна подати у вигляді [17]

$$\mathbf{H}_F(\mathbf{r}_{vj}) = -2 |M_0| \int d^3r \frac{\mathbf{m}(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}_{vj} - \mathbf{r}|^3} - 3 \frac{(\mathbf{r}_{vj} - \mathbf{r}) [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}_{vj} - \mathbf{r})]}{|\mathbf{r}_{vj} - \mathbf{r}|^5}, \quad (11)$$

або  $\mathbf{H}_F(\mathbf{r}_{vj}) = 2 |M_0| \mathbf{H}_M + \frac{4\pi}{3} \mathbf{m}$ , де  $\frac{4\pi}{3} \mathbf{m}$  — поле Лоренца,  $\mathbf{H}_M$  — поле, створене поверхневими і об'ємними “магнітними зарядами”, яке є розв'язком рівнянь магнітостатики [17]

$$\text{rot } \mathbf{H}_M = 0, \quad \text{div } \mathbf{H}_M = -4\pi \text{div } \mathbf{m}. \quad (12)$$

Для АФМ внесок далекодіючої частини диполь-дипольної взаємодії зазвичай є малим через мале значення сумарної намагніченості.

*Взаємодія Дзялошинського–Морії*, або антисиметрична обмінна взаємодія, виникає як наслідок порушення просторової симетрії інверсії кристалу. Вплив цієї взаємодії призводить до появи намагніченості в таких кристалах, структурна симетрія яких дозволяє існування спонтанного магнітного моменту за відсутності зовнішнього магнітного поля. Існування слабкого феромагнетизму є можливим, якщо існує фаза з відмінним від строго колінеарно антиферомагнітного розподілом спінових моментів, проте її магнітна симетрія є ідентичною до симетрії колінеарної АФМ фази. Наприклад, в кристалі  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  в залежності від температури стійкими є два стани: з антипаралельною орієнтацією сусідніх спінів вздовж осі симетрії кристалу, та стан, в якому спіни атомів відхилені від площини симетрії в бік один до одного на невеликий кут, що дає компоненту намагніченості перпендикулярну до цієї площини [20].

В залежності від групи симетрії кристалу дозволеними (тобто інваріантними відносно всіх перетворень цієї групи симетрії) доданками в енергії, які є джерелом слабого феромагнетизму, можуть бути доданки виду  $m_l n_k$ ,  $m_l n_l$ ,  $m_l n_k^2$ , або вищого порядку за  $n$  та їх комбінації ( $k, l = x, y, z$ ) [20, 21, 18]. В АФМ виділяють два типи взаємодії Дзялошинського–Морії: антисиметричний, утворений доданками вигляду  $(m_l n_k - n_l m_k)$  і симетричний, що за своєю природою схожий на анізотропію (доданки виду  $m_l n_k$ ). Взаємодія симетричного типу характеризується енергією виду [19]

$$E_{DMI_S} = - \int D_{lk}(\mathbf{n}) m_l n_k dV, \quad (13)$$

де тензор  $D_{lk}(\mathbf{n})$  містить парні ступені компонент  $n$  і його вигляд визначається симетрією АФМ. Енергію антисиметричної частини можна подати як [17]

$$E_{DMI_A} = - \int \mathbf{D} \cdot [\mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_2] dV = -2 M_0^2 \int \mathbf{D} \cdot [\mathbf{n} \times \mathbf{m}] dV, \quad (14)$$

де  $\mathbf{D}$  — феноменологічна константа, напрямком цього вектора є перпендикулярним до площини, утвореної  $\mathbf{M}_1$ ,  $\mathbf{M}_2$ . При перестановці  $\mathbf{M}_1$ ,  $\mathbf{M}_2$  векторний добуток змінює знак на протилежний, проте  $\mathbf{D}$  також змінює знак, і енергія залишається незмінною. Для кристалів, в яких присутні елементи симетрії трансляції та інверсії, існування взаємодії Дзялошинського–Морії є неможливим [19].

В зовнішньому магнітному полі  $\mathbf{H}^{\text{ext}}$  внесок в повну енергію системи дає *Зееманівська взаємодія*, яка намагається зорієнтувати всі магнітні моменти системи за напрямком прикладеного поля:

$$E_z = -2 |M_0| \int (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}^{\text{ext}}) dV. \quad (15)$$

Основний стан АФМ визначається мінімумом його повної енергії, що є сумою енергій всіх взаємодій, наявних в даному магнетикі.

## 1.2. Орієнтаційні фазові переходи в антиферомагнетиках

Серед фазових переходів в магнетиках розрізняють магнітні структурні (відбувається зміна кристалохімічної структури) та орієнтаційні фазові переходи, під час яких змінюється лише магнітний орієнтаційний стан без зміни кристалохімі-

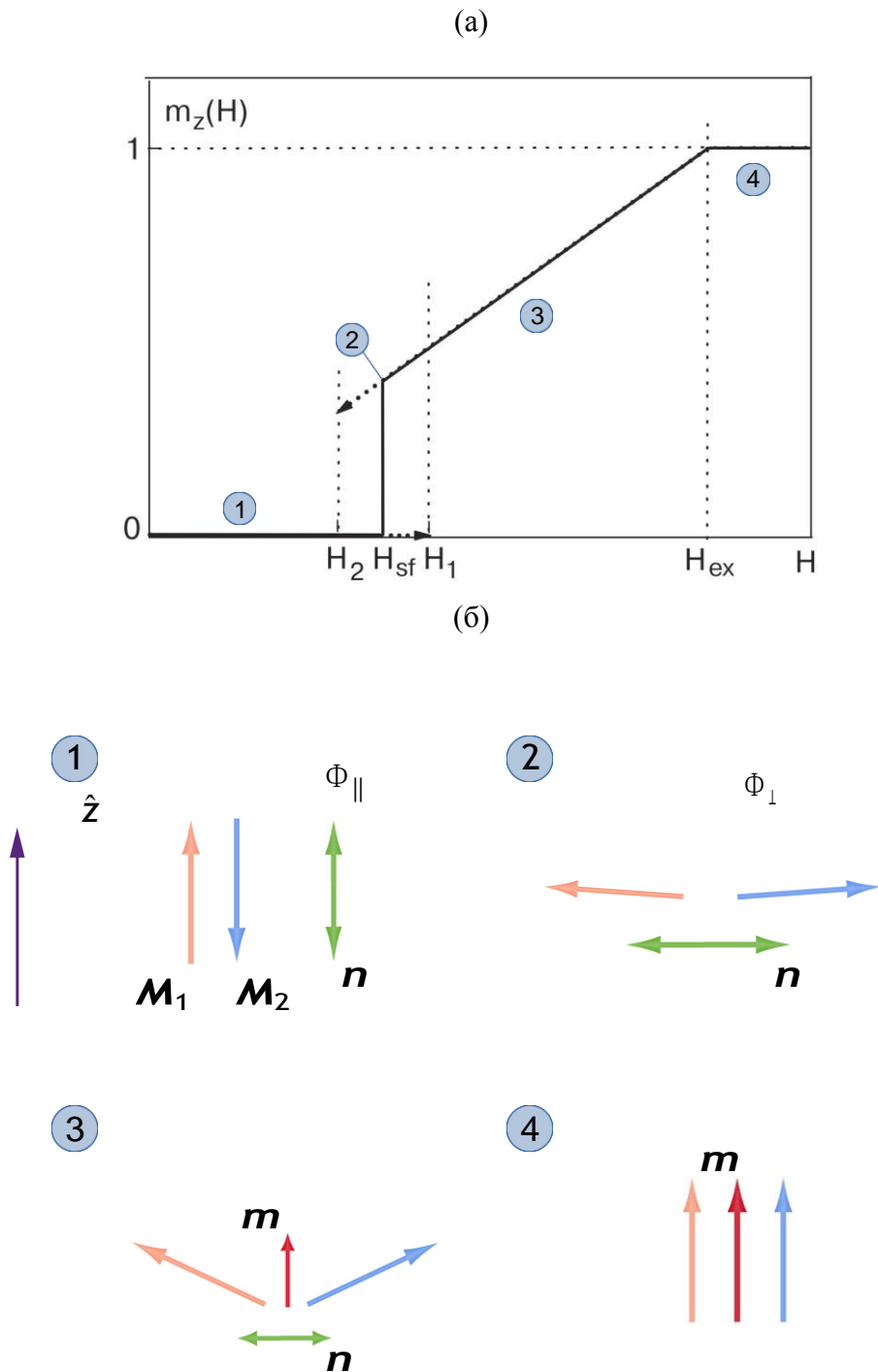


Рис. 1: 1(a): Крива намагнічування (модуль сумарної намагніченості вздовж напрямку зовнішнього поля) для одновісного АФМ. Значення полів  $H_1$  і  $H_2$  відповідають границям областей метастабільності фаз  $\Phi_{\parallel}$ ,  $\Phi_{\perp}$  і визначаються константами обміну та анізотропії [19]. 1(б): Схематичне зображення напрямків намагніченостей підґраток, векторів Нееля та ферромагнетизму в різних орієнтаційних станах в зовнішньому полі  $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$ .

чної структури речовини (ОФП). Надалі будемо розглядати лише ОФП, що вини-

кають під дією зовнішнього магнітного поля.

Розглянемо нескінченний колінеарний АФМ з урахуванням обмінної взаємодії та одноіонної анізотропії з легкою віссю намагнічування вздовж  $\hat{z}$  в зовнішньому постійному однорідному магнітному полі, напрямленому паралельно  $\hat{z}$ . За відсутності зовнішнього поля в основному стані розподіл вектора Нееля є однорідним,  $\mathbf{n} \parallel \hat{z}$ ,  $|\mathbf{n}| = 1$  (фаза  $\Phi_{\parallel}$ , див. рис. 1(б)). При певному значенні зовнішнього поля конкуренція між обмінними і анізотропними силами та Зеєманівською взаємодією призводить до стрибкоподібної зміни напрямку вектора Нееля: енергетично вигіднішим стає стан, в якому  $\mathbf{n}$  лежить в площині, перпендикулярній прикладеному полю, впорядкування при цьому залишається антиферомагнітним (фаза  $\Phi_{\perp}$ ). Такий фазовий перехід є переходом першого роду, характеризується стрибкоподібною зміною енергії системи і має назву спін-флоп перехід (далі СФП) [17, 19]. За значень зовнішнього поля, більших за критичне поле переходу  $H_{sf}$ , колінеарність підґраток порушується і з'являється вектор феромагнетизму  $\mathbf{m}$ .

Вектор  $\mathbf{m}$  за напрямком співпадає з зовнішнім магнітним полем  $\mathbf{H}$ . При подальшому збільшенні величини магнітного поля  $|\mathbf{m}|$  збільшується пропорційно  $H$ , поки не досягне стану насичення, в якому  $|\mathbf{m}| = 1$ ,  $\mathbf{n} = 0$  і впорядкування системи стане феромагнітним: відбувається ОФП другого роду, який називають спін-фліп переходом. Залежність величини сумарної намагніченості від прикладеного поля зображено на рис. 1(а). У нескінченному магнетіку фазові переходи відбуваються однорідно по всьому об'єму зразка.

Для знаходження критичних параметрів ОФП введемо  $\chi_{\parallel}$  і  $\chi_{\perp}$  — константи магнітної сприйнятливості в поздовжньому і поперечному напрямках, що визначають залежність вектора феромагнетизму від величини магнітного поля у станах  $\Phi_{\parallel}$  і  $\Phi_{\perp}$ :  $\mathbf{m}_{\parallel} = \chi_{\parallel} \mathbf{H}$ ,  $\mathbf{m}_{\perp} = \chi_{\perp} \mathbf{H}$ .

Густину енергії АФМ до та після спін-флоп переходу можна записати як [17]

$$\begin{aligned} E_{\Phi_{\parallel}} &= 2 M_0^2 \chi_{\parallel}^{-1} \mathbf{m}^2 - K_1 n_z^2 - m_{\parallel} H \\ E_{\Phi_{\perp}} &= 2 M_0^2 \chi_{\perp}^{-1} \mathbf{m}^2 - 2 m_{\perp} H = -2 M_0^2 \chi_{\perp} H^2, \end{aligned} \quad (16)$$

де  $K_1 > 0$  — коефіцієнт анізотропії. В колінеарному основному стані з урахуванням (4)  $\chi_{\parallel} = 0$ . Так як  $\chi_{\perp} > \chi_{\parallel}$ , при  $H > H_{sf}$  має місце  $E_{\Phi_{\perp}} < E_{\Phi_{\parallel}}$ . Критичне поле переходу визначається рівністю енергій  $E_{\Phi_{\parallel}} = E_{\Phi_{\perp}}$  і в термінах ефективних полів обміну  $H_{ex} = \chi_{\perp} - \chi_{\parallel}^{-1}$  та анізотропії  $H_{anis} = |K_1|$  має вигляд [17]:

$$H_{sf} = \frac{Q}{|K_1 \chi_{\perp} - \chi_{\parallel}|^{-1}} = \sqrt{H_{ex} H_{anis}}. \quad (17)$$

Перехід системи у феромагнітний стан відбувається за значень зовнішнього поля, близьких до обмінного поля в магнетика:  $\mathbf{m} = \frac{\mathbf{H}}{H_{ex}}$ , сумарна намагніченість досягає насичення при  $H = H_{ex}$  [17].

Енергетично вигідну орієнтацію вектора Нееля перпендикулярно до легкої осі АФМ в стані  $\Phi_{\perp}$  можна асоціювати з появою нових вибраних напрямків (тобто додаткових осей анізотропії). Експериментальні спостереження СФП у кристалах  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  методами нелінійної оптичної спектроскопії [23] підтверджують існування додаткових вибраних напрямків в кристалі в зовнішньому магнітному полі. В зразку, який є однодоменним у колінеарній фазі, після спін-флоп переходу стійким є багатодоменний стан, в якому орієнтації параметрів порядку всередині доменів можуть мати 3 напрямки, перпендикулярні до власної легкої осі цього кристалу. Характерні поля СФП для монокристалів становлять близько 5-10 Т, наприклад 9.27 Т для кристалів  $\text{MnF}_2$  і 5.8 Т для  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  [22, 23].

Якщо зовнішнє поле спрямовано перпендикулярно до легкої осі магнетика, спін-флоп перехід відсутній. Намагніченість орієнтується за напрямком поля та лінійно зростає за величиною до стану насичення. У випадку, коли  $\mathbf{H}$  напрямлено під кутом до осі анізотропії, наприклад  $\mathbf{H}$  лежить в площині  $\hat{x} \hat{z}$ , після спін-флоп переходу вектор феромагнетизму буде орієнтуватись вздовж прикладеного поля та відповідно мати компоненти  $m_x$ ,  $m_z$ . Такий перехід є більш плавним за  $m_z$  і зникає за певного критичного значення кута між  $\mathbf{H}$  та  $\hat{z}$ , в той час як спін-фліп перехід зберігається за будь-якого напрямку прикладеного поля. Незалежно від напрямку зовнішнього поля спін-флоп та спін-фліп переходи відбуваються за значень  $H_{sf}$  і  $H_{ex}$  відповідно [24, 19].

Розглянутий вище підхід до опису ОФП також є застосовним для одновимірних нескінченних ланцюжків [19].

Для зразків скінченних розмірів суттєву роль відіграють межові ефекти. У скомпенсованому стані АФМ поля розмагнічування відсутні, проте в зовнішньому полі намагніченість стає ненульовою і це призводить до прояву магнітостатичних взаємодій та формування багатодоменних станів [24].

### 1.3. Криволінійні квазіодновимірні антиферомагнетики

Взаємовплив нетривіальної форми магнетика та топології магнітної підсистеми призводить до появи так званого геометричного потенціалу, що визначає залежність енергії системи від локальних змін її геометрії. В тонких викривлених плівках вплив кривини можна асоціювати з появою ефективного магнітного поля, що визначає можливі рівноважні розподіли намагніченості [25]. Зміну властивостей викривлених магнетиків можна пояснити появою додаткових взаємодій: важкоосьової анізотропії, пов'язаної з диполь-дипольною взаємодією та індукованих кривиною легкоосьової анізотропії і взаємодії Дзялошинського–Морії. Вплив ефективних взаємодій, індукованих локальними викривленнями магнетика, призводить до утворення стійких текстур, відмінних від прямих систем, та кіральних ефектів, тобто енергетичної нееквівалентності поворотів магнітної текстури або геометрії [26].

Завдяки цим ефектам параметри основних станів та динаміки магнітних систем можна контролювати зміною геометричних параметрів зразків [27, 9, 7]. Наприклад, в антиферомагнітних спіралях в залежності від величини кривини та кручення реалізуються два основні стани з різними розподілами вектора Нееля. За допомогою зміни кривини та кручення в таких системах можливе контролювання характеристик розповсюдження та локалізації спінових хвиль [9]. У феромагнітних кільцях конкуренція власне обмінних та ефективних анізотропних взаємодій призводить до появи двох топологічно різних за магнітною текстурою стійких станів, області стійкості яких визначаються величиною кривини кільця. [27].

В малих масштабах на відгук магнітної системи суттєвий вплив мають її скінченність та замкненість. Так, у роботі [28] було показано, що для замкнених антиферомагнітних ланцюжків скінченної довжини (з періодичними межовими умовами) за ненульових температур та певних значень констант обміну та анізотропії колінеарний АФМ стан вже не є основним. В залежності від значень констант взаємодій можливі топологічно різні основні стани, в яких вектор Нееля лежить в площині, утвореній спіраллю або стрічкою Мебіуса. Також показано, що в замкнених АФМ системах вирішальну роль відіграє парність магнітних моментів: для ланцюжків з непарною кількістю спінів всі обмінні взаємодії не можна одночасно задовільнити, що також призводить до порушення колінеарності.

Розглянемо підхід до теоретичного опису криволінійних магнетиків, запропонований у роботах [25, 27, 9]. Так як при розгляді викривлених одновимірних

АФМ ланцюжків напрямом осі анізотропії визначається кривиною та крученням ланцюжка в кожній точці, доцільно перейти в локальну криволінійну систему координат: в кожній точці базисні вектори перераховуються як тангенційний –  $\mathbf{e}_T$ , нормальний –  $\mathbf{e}_N$  та бінормальний (перпендикулярний до перших двох) –  $\mathbf{e}_B$  напрямки до кривої в цій точці (TNB-базис, або базис Френе–Серре [29]).

Нехай в просторі  $\mathbb{R}^3$  задана крива  $\boldsymbol{\gamma}(s)$ ,  $s$  — координата вздовж кривої, або натуральний параметр, що нормується так, щоб виконувалась умова:  $|\partial_s \boldsymbol{\gamma}| = 1$ . Це дозволяє побудувати ортонормований базис в довільній точці кривої, вектори якого визначені як [29]

$$\mathbf{e}_T = \partial_s \boldsymbol{\gamma}(s), \quad \mathbf{e}_N = \frac{\partial_s \mathbf{e}_T}{|\partial_s \mathbf{e}_T|}, \quad \mathbf{e}_B = \mathbf{e}_T \times \mathbf{e}_N. \quad (18)$$

Похідні від базисних векторів визначаються співвідношеннями [29]:

$$\partial_s \mathbf{e}_\alpha = F_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\beta, \quad F_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

де  $\alpha, \beta = T, N, B$ ,  $\kappa$  – кривина,  $\tau$  – кручення  $\boldsymbol{\gamma}(s)$ . Нехай вектори Нееля та феромагнетизму, нормовані на намагніченість насичення підґраток  $M_s$ , визначені як

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_T n_T + \mathbf{e}_N n_N + \mathbf{e}_B n_B, \quad \mathbf{m} = \mathbf{e}_T m_T + \mathbf{e}_N m_N + \mathbf{e}_B m_B$$

в TNB базисі і відповідають умові (4),  $a_0$  — стала ґратки. Тоді функція Лагранжа в рамках  $\sigma$ -моделі для ланцюжка спінів має вигляд[9]:

$$L = - \int \frac{M_s^2}{\gamma_0^2 \Lambda} \dot{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} \, ds, \quad (20)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_x + \mathbf{E}_{DM} + \mathbf{E}_A + \mathbf{K} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_T)^2,$$

$$\mathbf{E}_x = A \mathbf{n}'_\alpha \mathbf{n}'_{\alpha'}, \quad \mathbf{E}_{DM} = A \mathbf{F}_{\alpha,\beta} n_\alpha n'_\beta - n_\beta n'_\alpha,$$

$$\mathbf{E}_A = A \mathbf{K}_{\alpha,\beta} n_\alpha n_\beta, \quad \alpha, \beta \in T, N, B.$$

Тут  $\dot{\mathbf{n}}$  — похідна за часом,  $\gamma_0$  — гіромагнітне співвідношення,  $\mathbf{K}$  — константа важковісної анізотропії (індукованої диполь-дипольною взаємодією), вісь якої напрямлена тангенційно до кривої,  $\mathbf{E}_x$  — густина обмінної енергії з константою неоднорідного обміну  $A = |\mathbf{J}| S^2 a_0 / 2$ ,  $\mathbf{E}_{DM}$  — густина енергії взаємодії

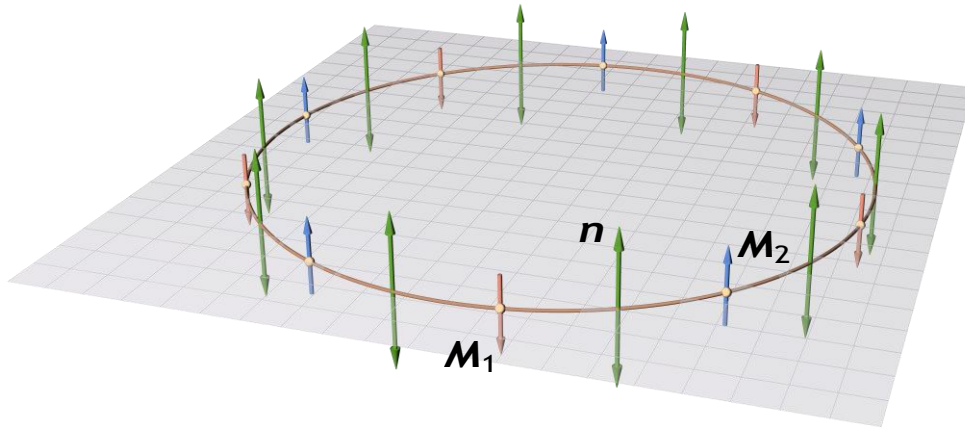


Рис. 2: Схематичне зображення плоского АФМ ланцюжка спінів в бінормальному стані на прикладі кільця:  $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$  — намагніченості різних підґраток,  $\mathbf{n}$  — вектор Нееля.

Дзялошинського–Морії,  $E_A$  — густина енергії індукованої кривиною анізотропії з тензором коефіцієнтів  $K_{\alpha,\beta} = F_{\alpha,\gamma} F_{\beta,\gamma}$ . Ця модель є застосовною за умови  $K \ll \Lambda$ , де  $\Lambda = 2|\mathcal{J}|S^2/a_0$  — константа однорідного обміну.

Для плоских ( $\tau = 0$ ,  $\kappa \neq 0$ ) викривлених ланцюжків конкуренція цих взаємодій призводить до бінормального основного стану за відсутності зовнішнього магнітного поля (див. рис. 2): розподіл вектора Нееля є однорідним перпендикулярно до площини кривої і  $\mathbf{m} = 0$ ,  $|\mathbf{n}| = 1$  [9].

#### 1.4. Методи одержання та властивості одновимірних АФМ ланцюжків

Обмеження магнітних взаємодій одним виміром можливе в ряді кристалічних матеріалів, де атоми з ненульовим магнітним моментом утворюють магнітно впорядковані ланцюжки, відокремлені один від одного немагнітними структурами.

В цих матеріалах обмінні взаємодії в напрямках вздовж ланцюжків магнітних атомів є значно сильнішими, ніж в інших. Тому внеском міжланцюжкових взаємодій атомів можна знехтувати, і кристал вважається сукупністю паралельних спінових ланцюжків [31]. Прикладом кристалу з вбудованими спіновими ланцюжками є  $\text{SrMn}(\text{VO}_4)$  (ОН), рис. 3(а): атоми Mn антиферромагнітно зв'язані між собою, утворені ланцюжки відокремлені атомами Sr, V, O та їх зв'язками. Цей матеріал має малий незкомпенсований магнітний момент вздовж однієї з осей кристалу через взаємодію Дзялошинського–Морії. [32]. Отримання колінеарних АФМ

ланцюжків також можливе за допомогою синтезу кристалів органічних сполук на основі металічних атомів. Наприклад, у гібридних сполуках Ni антиферомагнітно впорядковані ланцюжки NiCl відокремлені один від одного бензеновими структурами, які з'єднані з атомами Cl аміногрупами [33].

Реалізація одновимірних магнітовпорядкованих структур також можлива на основі ланцюжків макромолекул та координаційних полімерів. Ці молекули складаються з атомів металу, зв'язаних з органічними лігандами, утворюючи прямий або спіральний ланцюжок, наприклад  $MnL(N_3)_2$  (L — ліганд), див. рис. 3(б). Різноманіття органічних радикалів, що використовуються в якості з'єднувальних елементів між металічними атомами, дозволяє в певному діапазоні змінювати константи обмінної та анізотропних взаємодій в ланцюжку, і, як наслідок, його статичні та динамічні властивості. Зазвичай впорядкування таких систем є антиферомагнітним, проте можливий синтез й феро- та ферімагнітних молекул. У випадку, коли обмінна взаємодія є значно сильнішою за прояви анізотропних властивостей, поведінку таких систем можна описати гамільтоніаном Гайзенберга в класичному наближенні [34]. Для певних радикалів та групи рідкоземельних металів заміна металічного елемента не веде до структурних змін системи, завдяки чому в таких ланцюжках можливе різне впорядкування та варьювання константи анізотропії в залежності від орбітального моменту обраного металічного атома [35].

Окремо слід відзначити технології модифікації молекул ДНК з метою отримання спінових ланцюжків. Утворення одновимірних ланцюжків на основі ДНК виникає внаслідок вбудовування металічних атомів між нуклеотидами молекули. Такі ланцюжки можуть бути як прямими, так і спіралью закрученими в залежності від вологості середовища, та в більшості випадків мають антиферомагнітне впорядкування [36, 12]. В роботі [37] було теоретично показано, що деякі замісники азотистих основ мають спіновий момент, і зміна хімічного складу замісника дозволяє регулювання констант обмінної взаємодії між ними.

Методи спін-поляризованої скануючої тунельної мікроскопії дозволяють конструювання різних структур з окремих атомів на поверхні іншого матеріалу. В залежності від взаємного впливу субстрату та поверхневих атомів можливе створення систем з різними співвідношеннями сил обмінних та анізотропних взаємодій, регулювання відгуку системи атомів та штучне задання вибраних напрямків за допомогою зміни хімічного складу субстрату. Висока точність цих методів до-

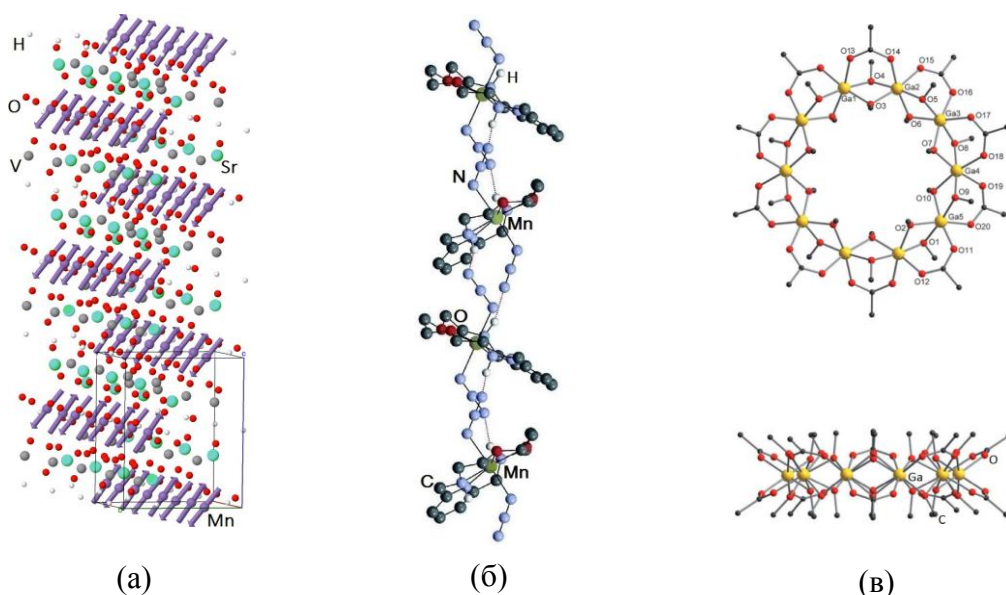


Рис. 3: (а) Структура  $\text{SrMn}(\text{VO}_4)(\text{OH})$ , стрілками вказано напрямки намагніченостей атомів Mn (побудовано в [38]). (б) Молекула  $\text{MnL}(\text{N}_3)_2$ : сполуки MnL з'єднані між собою за допомогою аніонів  $\text{N}_3^-$ , електронегативність атомів яких впливає на силу утворених зв'язків, кути нахилу MnL, та магнітне впорядкування структури [39]. (в) Структура молекулярного кільця  $\text{Ga}_{10}$  та її бічний вигляд [40].

зволяє маніпулювання кожним атомом та його оточенням, і як наслідок створення штучних магнітних структур із заданими властивостями [41, 42]. Так, в роботі [2] було показано, що ключову роль в можливості опису магнітної структури в класичній моделі (тобто існування колінарного АФМ стану) відіграє анізотропія: в створеному за допомогою скануючої тунельної мікроскопії ланцюжку атомів Fe на поверхні  $\text{Cu}_2\text{N}$  в основному стані впорядкування було колінарно антиферомагнітним, в той час в аналогічному ланцюжку з атомів Mn, анізотропія якого з данним субстратом є набагато меншою, стійкі колінарні стани не спостерігались.

Іншим класом речовин з властивостями квазіодновимірних магнетиків є так звані спінові кільця, магнітні атоми яких знаходяться в оточенні лігандів та утворюють замкнену структуру. У кристалі, створеному з цих молекул, магнітні атоми різних кілець також відокремлені лігандами, що дозволяє вважати магнітні властивості окремих молекул незалежними [43]. Сучасні технології хімічного синтезу дозволяють створення таких кілець на основі різних металів — Cr, Fe, V та інші. У більшості випадків впорядкування магнітних атомів цих кілець є антиферомагнітним [44, 45, 46, 13]. Дослідження магнітної структури таких молекул можливе методами нейтронографії [47]. Хімічна структура деяких кілець дозволяє викори-

стання різних металічних атомів, що впливає на анізотропні властивості та планарність магнітної структури [40], див. рис. 3(в). Заміщення одного із металічних атомів кільця на атом із нульовим спіновим моментом утворює відкрите спінове кільце, яке має принципово відмінні властивості від замкнених систем [14, 13].

## 1.5. Висновки до розділу

Антиферромагнетики є перспективними матеріалами для нових технологічних рішень у спінтроніці через їх принципові відмінності від ферромагнітних матеріалів. В колінеарних АФМ зовнішнє магнітне поле спричиняє фазові переходи, що характеризуються різкою зміною напрямку та величин параметрів порядку системи і характерною появою намагніченості після переходу, що може бути використано при побудові логічних пристроїв.

Властивості криволінійних магнетиків суттєво відрізняються від властивостей невикривлених 3D зразків: нетривіальна геометрія індукує додаткові взаємодії, вплив яких є суттєвим в малих масштабах. Можливості синтезу різних типів криволінійних нанорозмірних магнетиків та експериментальне дослідження їх властивостей підвищують інтерес до пошуку теоретичного обґрунтування їх поведінки.

Статика та динаміка криволінійних ферромагнітних систем за відсутності зовнішнього магнітного поля добре описані, передбачено виникнення різних фізичних ефектів, контрольованих геометричними параметрами, розроблено методи їх теоретичного опису. Властивості викривлених АФМ ланцюжків активно досліджуються, однак не зважаючи на деякі результати розгляду їх статички та лінійної динаміки, предмет криволінійного магнетизму в АФМ знаходиться на стадії розвитку. Зокрема, вплив кривини одновимірної АФМ системи на її рівноважні стани в зовнішньому магнітному полі та параметри фазових переходів наразі не є дослідженим.

## Розділ 2. Результати роботи

### 2.1. Постановка задачі

Метою даної роботи є теоретичні дослідження криволінійного ланцюжка антиферромагнітно зв'язаних магнітних моментів та встановлення відмінностей в поведінці такої системи в зовнішньому магнітному полі порівняно з невикривленими антиферромагнетиками. В цьому розділі буде розглянуто двохпідгратковий колінеарний антиферромагнетик з врахуванням обмінної взаємодії сусідніх спінів та одноіонною анізотропією типу важка вісь, що напрямлена тангенційно до кривої в будь-якій точці кільця. Зокрема теоретичний опис фазових переходів (спін-флоп та спін-фліп), що виникають під дією зовнішнього постійного однорідного магнітного поля, та опис можливих рівноважних станів системи. Для досліджень обрано АФМ ланцюжок у формі кільця як приклад найпростішої кривої зі сталою кривиною та нульовим крученням. Опис розроблено для випадку, коли напрямок зовнішнього магнітного поля співпадає з віссю симетрії кільця.

Аналітично отримані результати перевіряються за допомогою моделювань в спін-гратковому симуляторі SLaSi [48].

### 2.2. Модель системи

Розглянемо кільце з радіусом  $R$ , що лежить в площині  $\hat{x}\hat{y}$ , див. рис. 4(a). В цьому випадку крива задається параметрично як  $\mathbf{y}(s) = \{R \cos(s/R) ; R \sin(s/R) ; 0\}$ , де  $s$  — натуральний параметр. Вектори локального криволінійного базису (18) для кільця задаються як [29]:

$$\mathbf{e}_T = -\sin \frac{s}{R} ; \cos \frac{s}{R} ; 0, \quad \mathbf{e}_N = -\cos \frac{s}{R} ; -\sin \frac{s}{R} ; 0, \quad \mathbf{e}_B = 0. \quad (21)$$

Тоді функція Лагранжа для викривленого спінового ланцюжка в класичному наближенні має вигляд

$$\begin{aligned} L = & - \int \frac{\hbar S}{a_0} \mathbf{m} \cdot [\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}] - W \, ds, \\ W = & \Lambda m^2 + A_0 \, \partial_s \mathbf{n}^2 - \partial_s \mathbf{m}^2 + \lambda \partial_s \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} - \\ & - \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{m} + (\mathbf{H}_D - 2M_s \mathbf{H}) \cdot \mathbf{m}, \end{aligned} \quad (22)$$

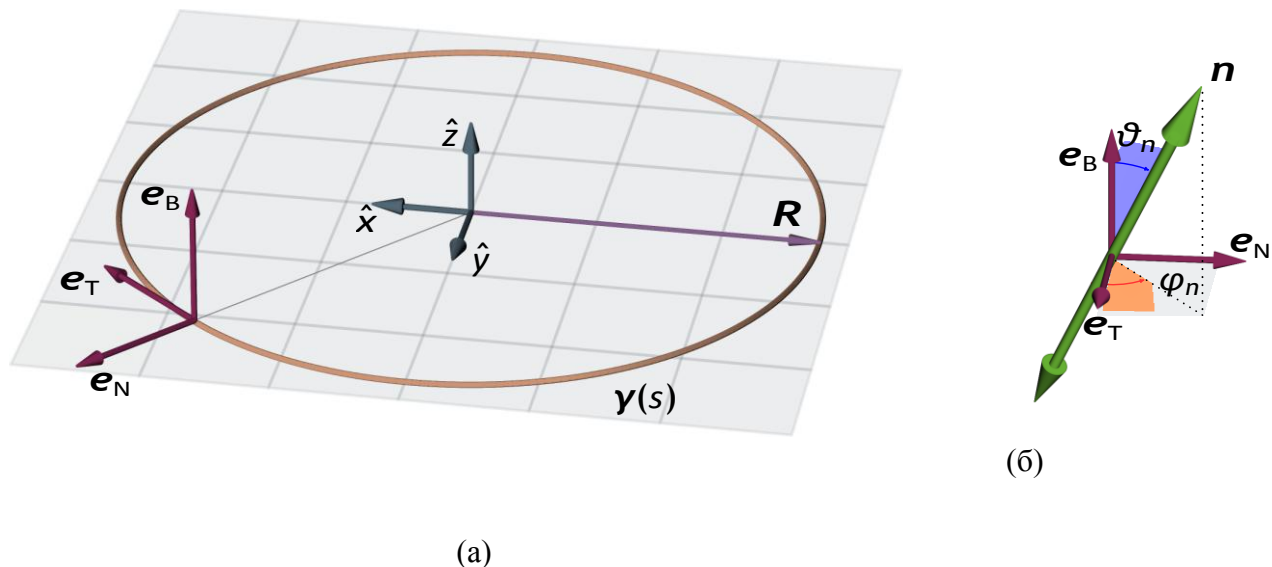


Рис. 4: (а) Схематичне зображення побудови TNB-базису на кривій  $\gamma(s)$  у вигляді кільця; (б) Параметризація вектора Нееля кутами полярної системи координат

де  $A_0 = \mathbf{J}S^2a_0$  — константа неоднорідного обміну,  $\lambda = 2\mathbf{J}S^2$ ,  $\mathbf{H}_D = \frac{\kappa}{2}K_sS^2(n_N\mathbf{e}_T + n_T\mathbf{e}_N)$  — ефективне поле взаємодії Дзялошинського–Морії, яка має геометричне походження,  $\hat{K}$  — ефективний тензор анізотропії:

$$\hat{K} = \begin{matrix} & \dots & 1 & \frac{1}{2}a_0\kappa & 0 & \dots \\ K_sS^2 & \dots & \frac{1}{2}a_0\kappa & 0 & 0 & \dots \\ 2a_0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots \\ & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots \end{matrix} \quad (23)$$

За наявності просторової неоднорідності параметрів порядку в ланцюжку виникає слабкий ферромагнетизм, що дає внесок в повну енергію в доданках  $\lambda\partial_s\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}$  та  $\mathbf{H}_D \cdot \mathbf{m}$ . Зокрема доданок  $\lambda\partial_s\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}$  призводить до порушення інваріантності енергії одновимірних АФМ відносно трансляції підґраток [30].

Нормована на  $K_sS^2/2a_0$  густина енергії має вигляд:

$$W = \frac{1}{\zeta^2}\mathbf{m}^2 + 2(\mathbf{n}'^2 - \mathbf{m}'^2) + \frac{2}{\zeta}\mathbf{n}' \cdot \mathbf{m} - \mathbf{n} \cdot \hat{K} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{m} \cdot \hat{K} \cdot \mathbf{m} + \mathbf{h}_D \cdot \mathbf{m} - \frac{2}{\zeta}\mathbf{h} \cdot \mathbf{m}, \quad (24)$$

де  $\zeta = \frac{s}{K_s}$  — пара метр дискретності, зовнішнє магнітне поле нормоване як

$\mathbf{h} = \mathbf{H}/\mu_{sf}^0$  де  $H_{sf}^0 = \frac{2S}{g\mu_B} \sqrt{|\mathbf{J}K_s|}$  — поле спін-флоп переходу для нескінчен-

**S**

ного прямого ланцюжка,  $\ell = a_0 \frac{|\mathbf{J}|}{K_s}$  — магнітна довжина, що є характерним розміром неоднорідностей в магнетикі,  $\ell \gg a_0$ . Так як  $|\mathbf{J}| \gg |K_s| \frac{a_0}{\ell} \ll 1$ . Нормовані тензор анізотропії та поле взаємодії Дзялошинського–Морі мають наступний вигляд

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} 1 & \zeta \kappa & 0 \\ \zeta \kappa & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_D = 2\zeta \kappa \begin{pmatrix} n_N \\ n_T \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

де  $\kappa = \kappa \ell$  — нормована кривина кільця. У рівнянні (24) штрих означає похідну за нормованою координатою:  $\mathbf{n}' = \partial_\xi \mathbf{n}$ ,  $\xi = \frac{r}{\ell}$  ( $\mathbf{r}$  — радіус-вектор). Квадрат похідної вектора Нееля з урахуванням похідних базисних векторів (19) має вигляд

$$\mathbf{n}'^2 = |n|^2 \vartheta_n'^2 + \sin^2 \vartheta_n (\kappa + \phi_n')^2 + |n|^2.$$

Далі використовуємо кутову параметризацію векторів  $\mathbf{n}$  і  $\mathbf{m}$  в локальному базисі:

$$\mathbf{n} = |n| \begin{pmatrix} \sin \vartheta_n \cos \phi_n \\ \sin \vartheta_n \sin \phi_n \\ \cos \vartheta_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = |m| \begin{pmatrix} \sin \vartheta_m \cos \phi_m \\ \sin \vartheta_m \sin \phi_m \\ \cos \vartheta_m \end{pmatrix}, \quad (26)$$

де  $\{\vartheta_n, \phi_n\}, \{\vartheta_m, \phi_m\}$  — полярні та азимутальні кути, див. рис. 4(б).

Основний стан системи характеризується глобальним мінімумом її повної енергії  $E = \int W d\xi$  для статичного випадку,  $\dot{\mathbf{n}} = 0$ . Після врахування умов (4) на вектори  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{m}$  за допомогою методу невизначених множників Лагранжа та мінімізації ефективної енергії системи, отримуємо варіаційні рівняння, що однозначно визначають конфігурації векторів Нееля та феромагнетизму в основних станах:

$$\frac{\delta E}{\delta \mathbf{m}} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{m}} + \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{m}}, \quad (27)$$

$$\frac{\delta E}{\delta \mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{n}} + \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{n}}.$$

### 2.3. Спін-флоп перехід

Для визначення рівноважних конфігурацій векторних полів Нееля та феромагнетизму після спін-флоп переходу та характерних значень прикладеного магнітного поля, при яких відбувається орієнтаційний перехід, можемо скористатись тим, що в околі СФП  $|m| \ll 1$  та зробити розклад  $\mathbf{m}$  за малим параметром  $\zeta \ll 1$  (надалі для порівняння із чисельними розрахунками спін-граткових моделювань обрано значення  $\zeta = 0.1$ )

$$\mathbf{m} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{m}^{(k)} \zeta^k. \quad (28)$$

Після підстановки розкладу (28) в перше варіаційне рівняння (27) отримано наближений вираз для зв'язку векторів  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$ :

$$\mathbf{m} = \zeta \mathbf{n} \times [(\mathbf{h} - \mathbf{n}') \times \mathbf{n}] + o(\zeta). \quad (29)$$

Після підстановки цього виразу в (24) та вважаючи, що в даному наближенні  $|\mathbf{n}| \simeq 1$ , отримуємо вираз для густини енергії в околі СФП:

$$W = \mathbf{n}'^2 - \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{n} - h^2 + o(\zeta). \quad (30)$$

Так як фаза після СФП загалом характеризується розподілом вектора Нееля перпендикулярно до напрямку прикладеного поля (тобто в площині кільця),  $\vartheta_n = \pi/2$ , і в кутових змінних (30) має вигляд

$$W = (\kappa + \phi_n')^2 + \cos^2 \phi_n + 2\zeta \kappa \sin \phi_n \cos \phi_n - h^2 + o(\zeta). \quad (31)$$

В подальшому для спрощення записів буде опущено індекс  $n$ , наприклад  $\phi \equiv \phi_n$ . Повну енергію системи можна записати як

$$E \approx \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} W d\chi - h^2, \quad \text{де } W = \kappa^2 (1 + \partial_\chi \Phi)^2 + \cos^2 \Phi, \quad (32)$$

і введено наступні позначення:  $\chi = \kappa s = \kappa \xi$  — безрозмірна координата (азимутальний кут),  $\chi = 0, \overline{2\pi}$ ;  $\Phi = \phi - \psi$ , і  $\psi = 2 \arctg(2\kappa\zeta)$ . Враховуючи всі вищезгадані припущення щодо векторів  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$  в околі спін-флоп переходу,

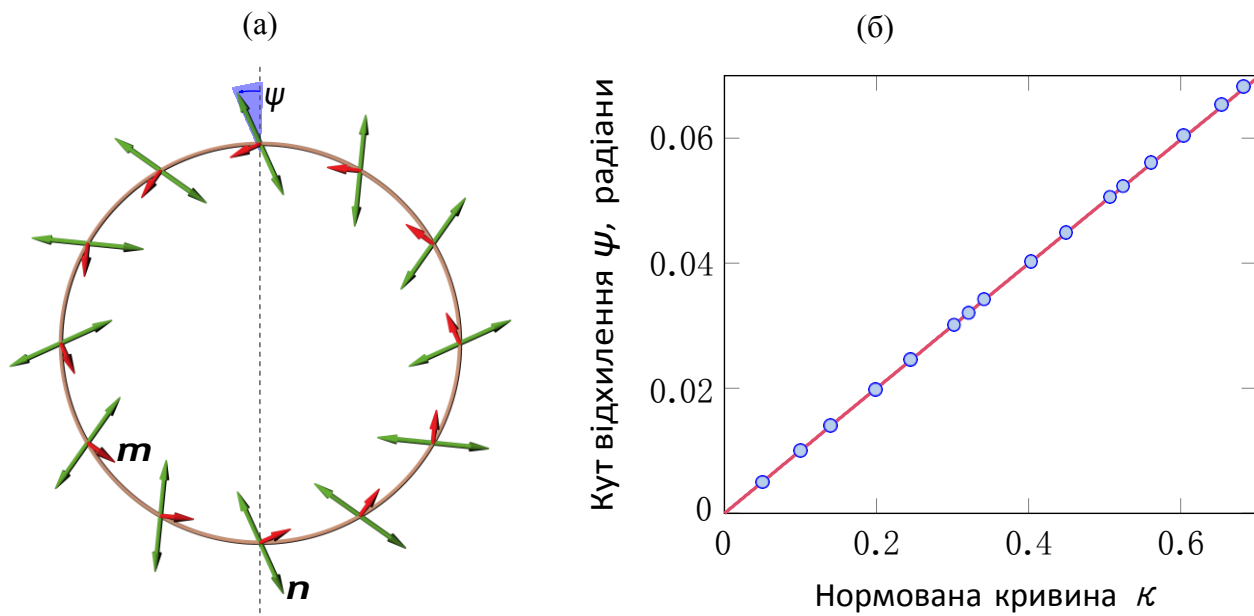


Рис. 5: Розподіл параметра Нееля для кільця в вихровому стані: 5(a) схематичне зображення векторних полів  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$  у площині кільця для випадку  $\Phi = \frac{\pi}{2}$ ; 5(b) залежність кута відхилення вектора Нееля від нормалі до кривої від кривини кільця: символи відповідають даним отриманим з спін-граткових моделювань (див. додаток А), суцільна лінія — аналітично знайдений залежності.

система варіаційних рівнянь зводиться до

$$\frac{\delta E}{\delta \Phi} = \frac{\partial W}{\partial \Phi} - \partial_\chi \frac{\partial W}{\partial \Phi'_\chi} = 0, \quad (33)$$

де розв'язки  $\Phi$  характеризують розподіли векторів  $\mathbf{m}$  і  $\mathbf{n}$  в основних станах.

Проекція сумарної намагніченості на площину кільця  $\mathbf{m}_0 = m_T \mathbf{e}_T + m_N \mathbf{e}_N$  визначається з рівняння (29) як  $\mathbf{m}_0 = \zeta \mathbf{n}'$ .

Після СФП в АФМ кільці можливі наступні рівноважні стани: *вихровий*, що є однорідним в TNB-базисі, та *onion*, в якому  $\Phi = \Phi(\chi)$  є координатно залежним.

### 2.3.1. Вихровий стан

Мінімізація повної енергії (32) для координатно однорідного розподілу  $\Phi$  дає:

$$\sin \Phi \cos \Phi = 0, \quad \Phi = \pm \frac{\pi}{2}.$$

Вектор Нееля є незмінним в криволінійній системі координат, і відхиляється від строго нормального до кривої напрямку на кут  $\psi = 2 \arctg(\zeta \kappa)$ , що є сталим для кільця заданої кривини. Нахили текстури на кут  $\psi$  утворюють вихрові стани за

напрямок годинникової стрілки, при  $\Phi = -\frac{\pi}{2}$ , та проти, при  $\Phi = \frac{\pi}{2}$  (див. рис. 5(a)), які є енергетично виродженими. Це є наслідком наявності доданку виду  $\mathbf{n}' \cdot \mathbf{m}$  у виразі для енергії криволінійних АФМ. Розподіли векторних полів для випадку  $\Phi = \frac{\pi}{2}$  мають вигляд

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \kappa \cos \psi \\ 0 \\ -\sin \psi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \zeta \begin{pmatrix} \kappa \sin \psi \\ h \\ \kappa \cos \psi \end{pmatrix}, \quad (34)$$

де  $h$  — значення зовнішнього магнітного поля. Повна енергія цього стану визначається кривиною кільця та величиною прикладеного поля:

$$E^{\text{vortex}} = \kappa^2 - h^2 + o(\zeta). \quad (35)$$

Критичне поле фазового переходу з бінормального стану у вихровий можна визначити з рівності енергій  $E^{\text{vortex}} = E^{\text{binorm}}$ , що дає наступну залежність значення поля СФП від кривини кільця  $\kappa$ :

$$h_{\text{spin-flop}}^{\text{vortex}} = \kappa + o(\zeta) \Rightarrow H_{\text{sf}} \approx \kappa H_{\text{sf}}^0. \quad (36)$$

Рівноважний напрямок параметрів порядку у вихровому стані обумовлений виникненням ефективних напрямків легкоосьової анізотропії, що індукована кривиною кільця з обмінних взаємодій. Це встановлює також залежність значення критичного поля СФП від величини кривини кільця.

Для малих значень кривини кільця можна вважати, що за значень зовнішнього поля, що відповідають спін-флоп переходу,  $m_T, m_N \gg m_B$ , і вектор феромагнетизму лежить в площині кільця. Його розподіл є схожим на розподіл намагніченості у феромагнітному (ФМ) кільці з легкотангенційною анізотропією у вихровому стані [27], але характерною відмінністю цих станів є відхилення  $\mathbf{m}$  від строго тангенційного до кривої напрямку на кут, величина якого залежить від кривини АФМ кільця, див. 7(a).

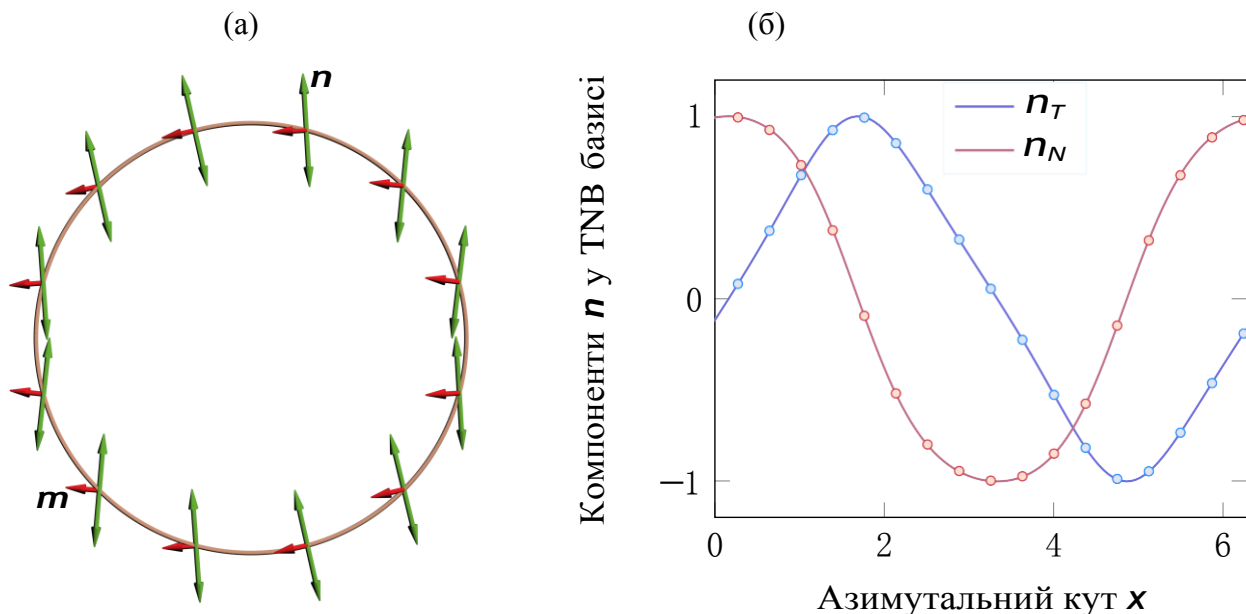


Рис. 6: **АФМ кільце в onion стані:** 6(a) схематичне зображення розподілів векторів Нееля та ферромагнетизму в площині кільця; 6(б) координатні залежності тангенційної та нормальної (в локальному базисі) компонент вектора Нееля: точки на графіку відповідають результатам спин-граткових моделювань, суцільні лінії — аналітичним залежностям (41) для кільця з  $\kappa = 1$ .

### 2.3.2. Onion стан

З урахуванням залежності  $\Phi(\chi)$  мінімізація енергії (32) дає:

$$\frac{\delta E}{\delta \Phi} = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial \Phi} - \partial_\chi \frac{\partial W}{\partial \Phi'_\chi} = 0, \quad (37)$$

$$\kappa^2 \partial_{\chi\chi} \Phi + \sin \Phi \cos \Phi = 0. \quad (38)$$

Розв'язком цього рівняння є

$$\Phi(\chi) = \pm \operatorname{am}(\chi, k), \quad \chi = \frac{2 K(k)}{\pi} \chi, \quad (39)$$

де  $\operatorname{am}(\chi, k)$  — амплітуда Якобі [49],  $K(k)$  — повний еліптичний інтеграл першого роду [49]. Його модуль,  $k$ , визначається межевою умовою:

$$2\kappa k K(k) = \pi. \quad (40)$$

Глобальному мінімуму енергії відповідає розв'язок  $\Phi(\chi) = -\operatorname{am}(\chi, k)$ , тому саме такий розподіл вектора Нееля відповідає стаціонарному стану:

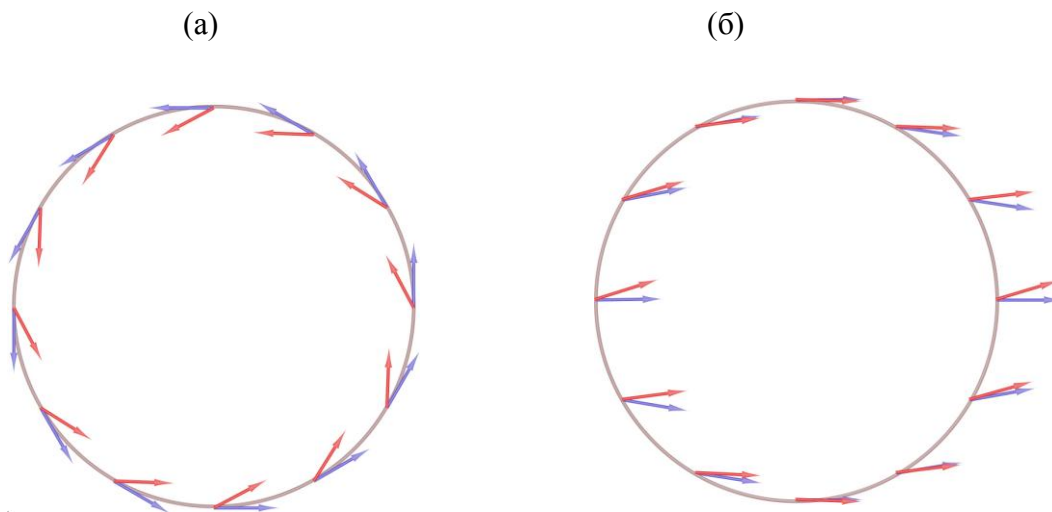


Рис. 7: Порівняння розподілів намагніченості у ФМ та АФМ кільцях: 7(a) у вихровому стані; 7(b) в опіон стані; сині стрілки відповідають розподілам у ферромагнітному кільці [27], червоні — в АФМ, відповідно до виразів (34), (42).

$$\begin{aligned}
 n_T &= \cos(\psi/2 - \text{am}(x, k)) = \text{cn}(x, k) + o(\zeta), \\
 n_N &= \sin(\psi/2 - \text{am}(x, k)) = -\text{sn}(x, k) + o(\zeta), \\
 n_B &= 0,
 \end{aligned} \tag{41}$$

і вектор сумарної намагніченості можна наближено записати як

$$\mathbf{m} = -\zeta \frac{\partial_x n_N}{h} + \kappa n_T \approx \zeta \frac{\kappa - \frac{1}{\kappa k} \text{dn}(x, k) \text{sn}(x, k)}{h} \approx \zeta \frac{\kappa - \frac{1}{\kappa k} \text{dn}(x, k) \text{cn}(x, k)}{h}, \tag{42}$$

де  $\text{cn}(x, k) = \cos(\text{am}(x, k))$ ,  $\text{sn}(x, k) = \sin(\text{am}(x, k))$ ,  $\text{dn}(x, k)$  — еліптичні функції Якобі [49]. Координатні залежності компонент  $\mathbf{n}$  подано на рис. 6(b),  $\mathbf{m}$  — на рис. 12(b), див. додаток А.

Розподіл проекції вектора ферромагнетизму на площину кільця є схожим на розподіл намагніченості у ФМ кільці з легкотангенційною анізотропією в опіон стані [27]. Цей стан реалізується для порівняно великих значень кривини, тому вплив обмінних взаємодій є сильнішим за вплив анізотропних, і в лабораторній системі координат розподіл намагніченості наближається до однорідного. Однак в АФМ кільці вісь симетрії текстури дещо зміщена порівняно з ФМ кільцем через появу додаткових осей анізотропії після спін-флоп переходу, див. рис. 7(b).

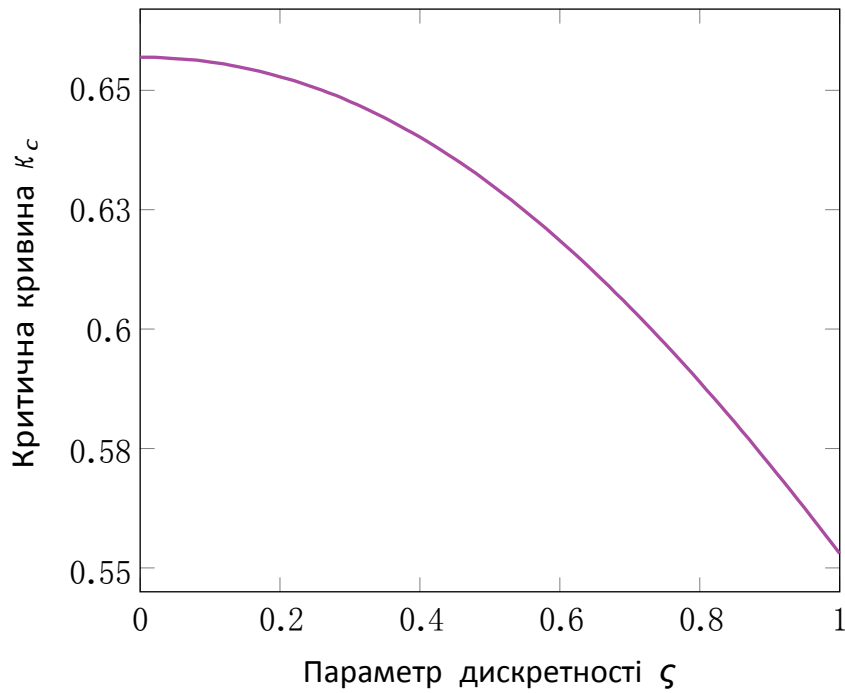


Рис. 8: Критична кривина розділення областей стійкості нормального та onion станів в залежності від  $\zeta$ .

Густина енергії з урахуванням (39) визначається як

$$W = \kappa^2 \left( 1 - \frac{1}{\kappa k} \operatorname{dn}(x, k) \right)^2 + \operatorname{cn}^2(x, k) + o(\kappa). \quad (43)$$

Повна енергія даного стану визначається інтегруванням (43) за  $\chi$  і має наступний вигляд:

$$E^{\text{on}} = 1 - h^2 - \frac{1}{k^2} - \kappa^2 + \frac{4\kappa E(k)}{\pi k}, \quad (44)$$

де  $E(k)$  — повний еліптичний інтеграл другого роду. Умова рівності енергій  $E^{\text{on}} = E^{\text{binorm}}$  визначає критичне поле спін-флоп переходу в onion стан в залежності від кривини кільця:

$$h_{\text{spin-flop}}^{\text{onion}} = \sqrt{1 - \frac{1}{k^2} - \kappa^2 + \frac{4\kappa E(k)}{\pi k}}, \quad H_{\text{sf}} = H_{\text{sf}}^0 h_{\text{spin-flop}}^{\text{onion}}. \quad (45)$$

Області стійкості нормального та onion станів можна визначити чисельно порівнянням енергій цих станів. Рівність  $E^{\text{on}} = E^{\text{vortex}}$  задає певне критичне значення кривини  $\kappa_c$  для заданого співвідношення констант обміну та анізотропії, тобто параметра дискретності  $\zeta$ : для кілець з кривиною, більшою за це значення, основний стан після СФП є onion стан, для кілець з  $\kappa < \kappa_c$  — відповідно вихровий

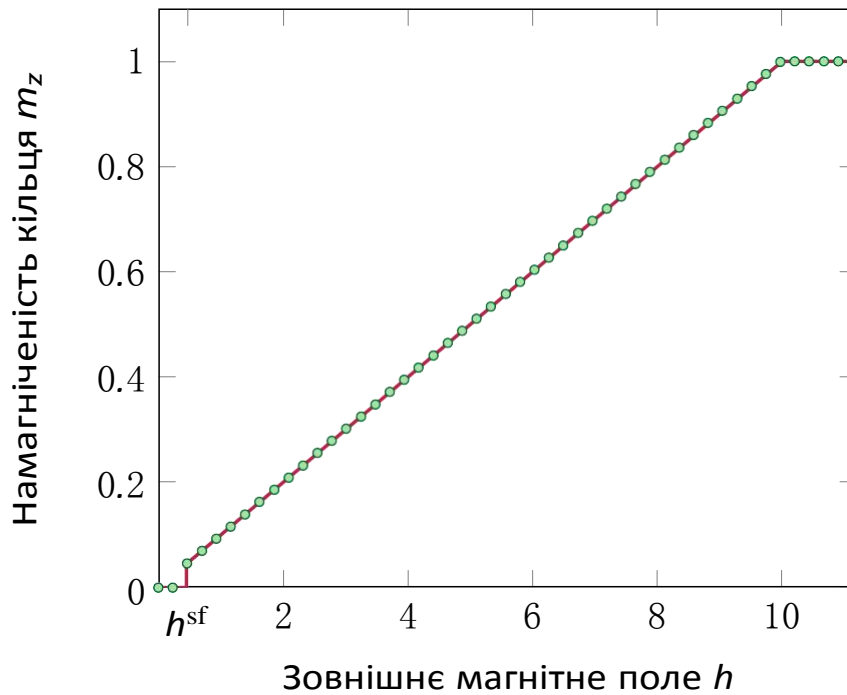


Рис. 9: Крива намагнічування вздовж напрямку прикладеного поля ( $\hat{z}$  в лабораторній системі координат) для кільця з кривиною  $\kappa = 0.5$  у вихровому стані після СФП: точки на графіку відповідають результатам спін-граткових моделювань, суцільні лінії — аналітичній залежності.  $h^{\text{sf}}$  — критичне значення поля, що відповідає спін-флоп переходу.

стан. Для випадку  $\ell = 5a_0$  це значення становить  $\kappa_c = 0.66$  і є близьким до критичної кривини розділення вихрової та *onion* фаз у феромагнітному кільці [27]. Чисельно отримана залежність  $\kappa_c(\zeta)$  представлена на рис. 8.

За значень зовнішнього поля, більших ніж поле спін-флоп переходу, вектор феромагнетизму має ненульову компоненту вздовж прикладеного поля, величина якої є пропорційною до значення цього поля,  $m_B = \zeta h$ , див. Рис. 9. Проте проєкція  $\mathbf{m}$  на площину кільця  $\mathbf{m}_0$  залишається незмінною, за умови, що зберігається антиферомагнітне впорядкування.

## 2.4. Спін-фліп перехід

Так як спін-фліп перехід відбувається за доволі великих значень зовнішнього поля, порядку  $1/\zeta$  (для прямого ланцюжка це значення співпадає з ефективним обмінним полем), можна використати наступний розклад:

$$\mathbf{h} = \sum_{k=-1}^{\infty} \mathbf{h}^{(k)} \zeta^k. \quad (46)$$

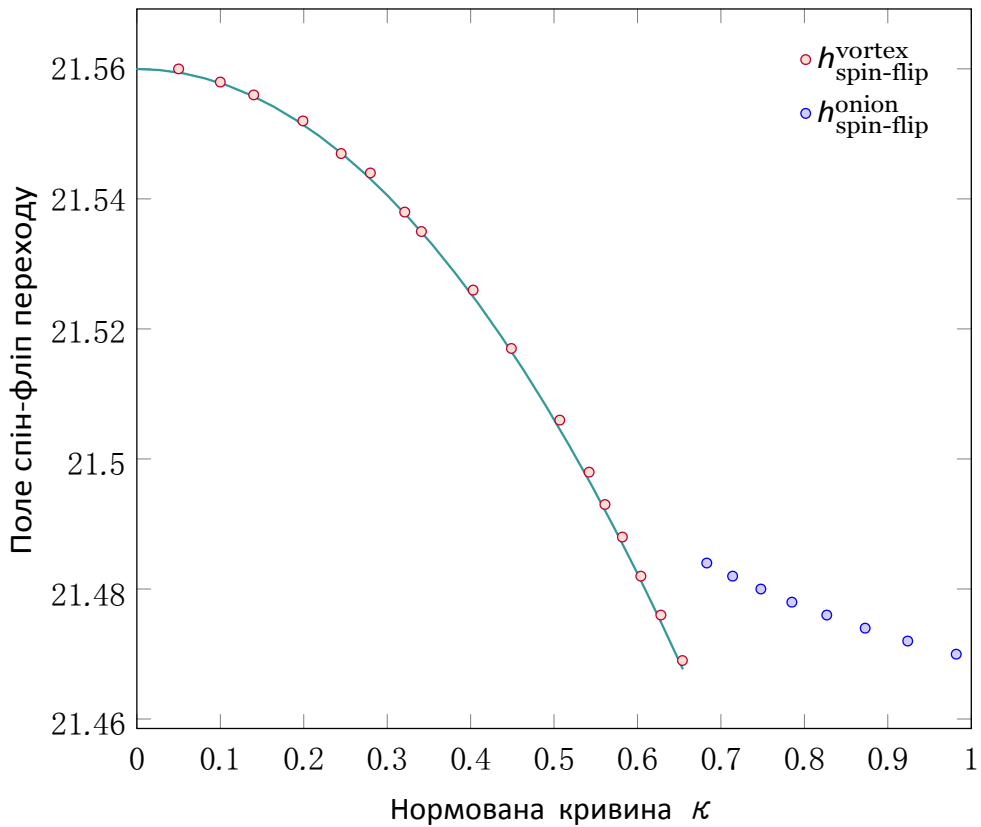


Рис. 10: Залежності критичних значень зовнішнього магнітного поля, за яких відбувається спін-фліп перехід, від кривини кільця для переходів з вихрового та опіон станів: суцільна крива відповідає виразу (54), точки — результатам спін-ґраткових моделювань.

В околі переходу до феромагнітного стану  $1 - |\mathbf{m}| \ll 1$ , і намагніченість можна подати у вигляді

$$\mathbf{m} = \mathbf{e}_B - \mathbf{m}_1, \quad \text{де } \mathbf{m}_1 = \begin{pmatrix} m_{1T} \\ m_{1N} \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{m}_1| \ll 1. \quad (47)$$

Після підстановки розкладу (46) у варіаційне рівняння (27) та знехтувавши членами порядку  $\zeta^2$ ,  $|\mathbf{m}_1|$ , маємо:

$$\mathbf{e}_B - \mathbf{m}_1 = \zeta (\mathbf{h} - \mathbf{n}') + o(\zeta), \quad (48)$$

тобто  $m_{1T} \mathbf{e}_T + m_{1N} \mathbf{e}_N = \zeta \mathbf{n}'$ . В припущенні, що в околі спін-фліп переходу

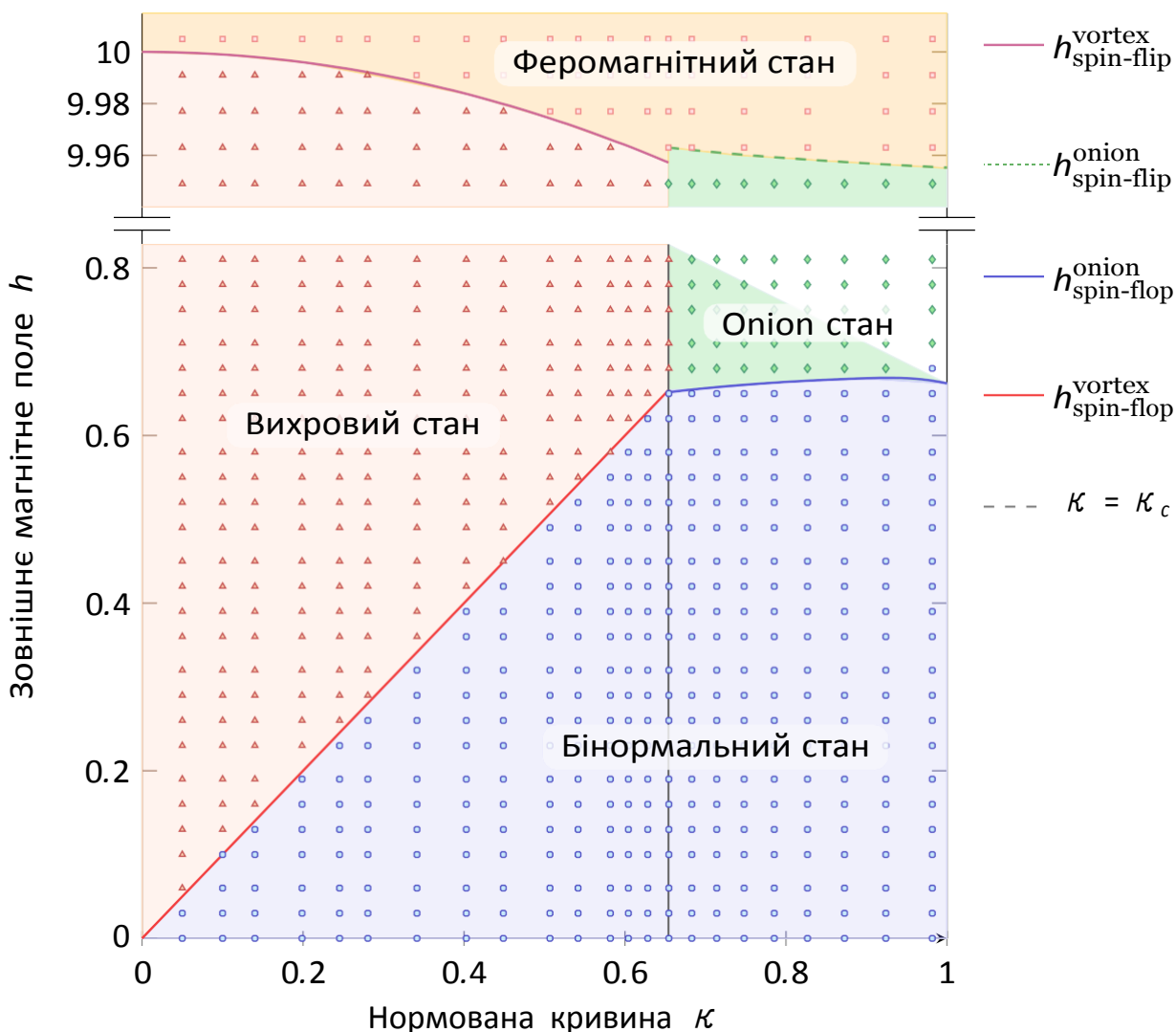


Рис. 11: Фазова діаграма рівноважних станів в АФМ кільці в зовнішньому магнітному полі: символи відповідають даним, що отримані з спин-граткових моделювань, криві розділення фаз  $h_{sf}^{\text{norm}}(\kappa)$ ,  $h_{sf}^{\text{onion}}(\kappa)$  відповідають виразам (36), (45), отриманим аналітично.

$(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}') = 0$ , залежність  $m(h)$  визначається виразом

$$m^2 = \zeta^2 \frac{h^2 + n^2}{1 + \zeta^2 n_0^2}, \quad \text{де } n'^2 = |n|^2 n_0^2, \quad n^2 = 1 - m^2. \quad (49)$$

Густина енергії в цьому наближенні:

$$W = \frac{1}{\zeta^2} m^2 - \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{n} - \frac{2}{\zeta} \mathbf{h} \cdot \mathbf{m} + o(\zeta), \quad (50)$$

та з урахуванням (49):

$$W = \frac{1}{\zeta^2} m^2 + \cos^2 \vartheta_n \cos^2 \Phi - \frac{2}{\zeta} h \sqrt{m^2(1 + \zeta^2 n_0^2) - \zeta^2 n_0^2} + o(\zeta), \quad (51)$$

де  $\sin^2 \vartheta_n \approx \text{tg}^2 \vartheta_n = (1 - m^2)n_0'^2/h^2$ .

Мінімізація повної енергії за модулем вектора феромагнетизму,  $\delta E/\delta|\mathbf{m}| = \partial W/\partial|\mathbf{m}| = 0$ , призводить до наступного рівняння, що визначає критичні поля переходів системи в феромагнітний стан при  $|\mathbf{m}| = 1$ :

$$\frac{1}{\zeta^2} - 2 \frac{n_0'^2}{h^2} (1 - m^2) \cos^2 \Phi - \frac{h(1 + \zeta^2 n_0'^2)}{\sqrt{\zeta^2 m^2 (1 + \zeta^2 n_0'^2) - \zeta^2 n_0'^2}} = 0, \quad (52)$$

$$h_{\text{spin-flip}} \approx \frac{1}{\zeta} - \zeta n_0'^2. \quad (53)$$

Поле спін-фліп переходу з вихрового стану в залежності від величини кривини кільця має вигляд

$$h_{\text{spin-flip}}^{\text{vortex}} \approx \frac{1}{\zeta} - \zeta \kappa^2. \quad (54)$$

Залежності критичних полів переходу з вихрового та onion у феромагнітний стан зображено на рис. 10.

## 2.5. Фазова діаграма рівноважних станів

З порівняння енергій бінормального, нормального та onion станів встановлено області їх стабільності в залежності від кривини кільця та інтенсивності зовнішнього магнітного поля, див. рис. 11. Для кілець з кривиною, меншою за критичне значення  $\kappa_c$ , в зовнішніх магнітних полях  $h_{\text{spin-flop}}^{\text{vortex}} < h < h_{\text{spin-flip}}^{\text{vortex}}$  основним станом є вихровий. Для кривин кільця  $\kappa > \kappa_c$  і полів з інтенсивністю в діапазоні  $h_{\text{spin-flop}}^{\text{onion}} < h < h_{\text{spin-flip}}^{\text{onion}}$  рівноважним є onion стан.

## Висновки

У випускній кваліфікаційній роботі досліджено рівноважні стани, що реалізуються в антиферромагнітному кільці під дією зовнішнього магнітного поля. Розглянуто двопідґратковий антиферромагнетик, серед взаємодій між магнітними моментами враховано антиферромагнітний обмін найближчих атомів та важкоосьову одноіонну анізотропію. В ході роботи було отримано наступні результати:

1. Встановлено, що на відміну від прямих АФМ систем, в спіновому ланцюжку можливі два топологічно різні рівноважні розподіли намагніченості та вектора Нееля після орієнтаційного фазового переходу першого роду, індукованого магнітним полем: *вихровий* та *onion* стани, області стабільності яких визначаються кривиною кільця.
2. Описано розподіли параметрів порядку в цих станах: у вихровому стані розподіл вектора Нееля є однорідним в локальній системі координат, і за напрямком відхиляється від строго нормального розподілу на величину, що пропорційна нормованій кривині кільця; координатно залежні розподіли вектора Нееля в *onion* стані визначаються еліптичними функціями Якобі в локальному криволінійному базисі.
3. Для матеріалу із заданим співвідношенням констант обміну та анізотропії чисельно обраховано значення критичної кривини  $\kappa_c$ , що розділяє області стійкості рівноважних станів. Вихровий стан є стабільним для кілець з кривиною, меншою за критичну кривину  $\kappa_c$ , *onion* стан є стійким у кільці з відносно великим значенням кривини. Це можна пояснити тим, що для кілець з малою кривиною вплив анізотропних сил є домінуючим, тому у рівноважному розподілі параметри порядку орієнтуються за напрямком легких осей в цій системі. Для кілець з  $\kappa > \kappa_c$  обмінні взаємодії намагаються зорієнтувати всі магнітні моменти антипаралельно, що призводить до квазіоднорідного стану в лабораторній системі координат.
4. Визначено області стабільності стаціонарних станів АФМ кільця в зовнішньому магнітному полі в залежності від його інтенсивності та кривини кільця. Встановлено, що критичні значення зовнішнього магнітного поля, за яких відбуваються орієнтаційні переходи, залежать від кривини кільця.

Побудовано фазову діаграму рівноважних станів. Аналітично отримані результати підтверджено за допомогою спін-граткових моделювань.

Результати цієї роботи свідчать про прояв ефектів кривини у зовнішніх магнітних полях в АФМ кільці, що за відсутності зовнішнього поля має єдиний рівноважний стан, параметри якого не залежать від кривини. Для кривих з ненульовим крученням, параметри рівноважних станів яких залежать від геометрії зразка, питання про вплив кривини та кручення на фазові переходи та основні стани в зовнішніх магнітних полях залишається відкритим. Сильна неоднорідність локальної текстури таких систем по відношенню до можливих напрямків прикладення зовнішнього поля в лабораторній системі координат може призвести до принципово нових ефектів.

## Апробація роботи

За результатами досліджень випускної кваліфікаційної роботи бакалавра було надруковано статтю [A1] та зроблено доповідь на міжнародній конференції [A2].

- [A1] Curvature-driven homogeneous Dzyaloshinskii-Moriya interaction and emergent weak ferromagnetism in anisotropic antiferromagnetic spin chains / *Oleksandr V. Pylypovskyi, Yelyzaveta A. Borysenko, Jurgen Fassbender, Denis D. Sheka, Denys Makarov* // *Applied Physics Letters*. — 2021. — Vol. 118. — P. 182405 (2021). — DOI: [10.1063/5.0048823](https://doi.org/10.1063/5.0048823)
- [A2] Magnetic field-induced phase transitions in antiferromagnetic rings / *Yelyzaveta A. Borysenko, Oleksandr V. Pylypovskyi, Denis D. Sheka, Denys Makarov* // *Proceeding of XI Conference of Young Scientists “Problems in Theoretical Physics”*. — December 2020. — P. 60–61.

## Література

- [1] Realizing All-Spin-Based Logic Operations Atom by Atom / *A. A. Khajetoorians, J. Wiebe, B. Chilian and R. Wiesendanger* // *Science*. — 2011. — Vol. 332, no. 6033. — P. 1062–1062.
- [2] Bistability in atomic-scale antiferromagnets / *Loth, S., Baumann, S., Lutz, C.P., Eigler, D.M., Heinrich, A.J.* // *Science*. — 2012. — Vol. 335, no. 6065. — P. 196–199.
- [3] Antiferromagnetic spintronics / *Baltz, V., Manchon, A., Tsoi, M., Moriyama, T., Ono, T., Tserkovnyak, Y.* // *Reviews of Modern Physics*. — 2018. — Vol. 90, no. 1. — P. 015005.
- [4] Concepts of antiferromagnetic spintronics / *Gomonay, O., Jungwirth, T., Sinova, J.* // *physica status solidi (RRL)*. — *Rapid Research Letters*. — 2017. — Vol. 11, no. 4. — P. 1700022.
- [5] Spintronics of antiferromagnetic systems (review article) / *Gomonay, E.V., Loktev, V.M.* // *Low Temperature Physics*. — 2014. — Vol. 40, no. 1. — P. 17–35.
- [6] Magnetism in curved geometries (Topical Review) / *Streubel, Robert, Fischer, Peter, Kronast, Florian, Kravchuk, Volodymyr P., Sheka, Denis D., Gaididei, Yuri, Schmidt, Oliver G., Makarov, Denys* // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2016. — Vol. 49, no. 36. — P. 363001.
- [7] The 2020 magnetism roadmap / *Vedmedenko, E.Y., Kawakami, R.K., Sheka, D., Gambardella, P., Kirilyuk, A., Hirohata, A., Binek, C., Chubykalo-Fesenko, O.A., Sanvito, S., Kirby, B., Grollier, J., Everschor-Sitte, K., Kampfrath, T., You, C.Y., Berger, A.* // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2020. — Vol. 53, no. 45. — P. 453001.
- [8] Launching a new dimension with 3D magnetic nanostructures / *Peter Fischer and Dédalo Sanz-Hernández and Robert Streubel and Amalio Fernández-Pacheco* // *APL Materials*. — 2020. — Vol. 8, no. 1. — P. 010701.
- [9] Curvilinear one-dimensional antiferromagnets / *Pylypovskyi, O.V., Kononenko, D.Y., Yershov, K.V., Rößler, U.K., Tomilo, A.V., Fassbender, J., van den Brink,*

- J., Makarov, D., Sheka, D.D.* // *Nano Letters*. — 2020. — Vol. 20, no. 11. — P. 8157–8162.
- [10] Artificial double-helix for geometrical control of magnetic chirality / *Sanz-Hernández, D., Hierro-Rodriguez, A., Donnelly, C., Pablo-Navarro, J., Sorrentino, A., Pereiro, E., Magén, C., McVitie, S., de Teresa, J.M., Ferrer, S., Fischer, P., Fernández-Pacheco, A.* // *ACS Nano*. — 2020. — Vol. 14, no. 7. — P. 8084.
- [11] Molecular magnets / *Blundell, S.J.* // *Contemporary Physics*. — 2007. — Vol. 48, no.5. — P. 275–290.
- [12] AF-like ground state of Mn-DNA and charge transfer from Fe to base- $\pi$ -band in Fe-DNA / *Mizoguchi, K., Tanaka, S., Ojima, M., Sano, S., Nagatori, M., Sakamoto, H., Yonezawa, Y., Aoki, Y., Sato, H., Furukawa, K., Nakamura, T.* // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 2007. — Vol. 76, no. 4. — P. 043801.
- [13] A ring cycle: studies of heterometallic wheels / *Affronte, M., Carretta, S., Timco, G.A., Winpenny, R.E.P.* // *Chemical Communications*. — 2007. — no. 18. — P. 1789.
- [14] Topological effects on the magnetic properties of closed and open ring-shaped *cr*-based antiferromagnetic nanomagnets / *Furukawa, Y., Kiuchi, K., Kumagai, K.i., Ajiro, Y., Narumi, Y., Iwaki, M., Kindo, K., Bianchi, A., Carretta, S., Timco, G.A., Winpenny, R.E.P.* // *Physical Review B*. — 2008. — Vol. 78. — P. 092402.
- [15] Спиновые волны / *А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский*. — М.: Наука, 1967. — 368 с.
- [16] Magnetism: Fundamentals / *du Tremolet Lacheisserie, E., Gignoux, D., Schlenker, M., eds.* // Springer Science + Business Media, Inc., USA. — ISBN 0387229671. — 2005. — 532 p.
- [17] Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков / *Е. А. Туров, А. В. Колчанов, В. В. Меньшенин, И. Ф. Мирсаев, В. В. Николаев*. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 560 с.
- [18] Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов / *Е. А. Туров*. — М.: АН СССР, 1963. — 222 с.

- [19] Мезоскопические антиферромагнетики: статика, динамика, квантовое тунелирование (обзор) / *Б. А. Иванов* // Физика низких температур. — 2005. — Т. 31, № 8/9. — с. 841–884.
- [20] Термодинамическая теория “слабого” ферромагнетизма антиферромагнетиков / *Дзялошинский, И. Е* // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1957. — Т. 32, № 6. — с. 1547–1562.
- [21] Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism / *Moriya, T.* // *Physical Review*. — 1960. — Vol. 120, no. 1. — P. 91–98.
- [22] Antiferromagnetic domains and the spin-flop transition of  $\text{MnF}_2$  / *G. P. Felcher, R. Kleb* // *Europhysics Letters*. — 1996. — Vol. 36, no. 6. — P. 455.
- [23] Nonlinear optical spectroscopy of magnetoelectric and piezomagnetic crystals / *Pisarev, R.V., Fiebig, M., Fröhlich, D.* // *Ferroelectrics*. — 1997. — Vol. 204, no. 1. — P. 1–21.
- [24] Spin-flop transition in uniaxial antiferromagnets: Magnetic phases, reorientation effects, and multidomain states / *Bogdanov, A.N., Zhuravlev, A.V., Röβler, U.K.* // *Physical Review B*. — 2007. — Vol. 75, no. 9. — P. 094425.
- [25] Curvature effects in thin magnetic shells / *Gaididei, Y., Kravchuk, V.P., Sheka, D.D.* // *Physical Review Letters*. — 2014. — Vol. 112. — P. 257203.
- [26] Nonlocal chiral symmetry breaking in curvilinear magnetic shells / *Denis D. Sheka and Oleksandr V. Pylypovskyi and Pedro Landeros and Yuri Gaididei and Attila Kákay and Denys Makarov* // *Communications Physics*. — 2020. — Vol. 3. — P. 128.
- [27] Curvature effects in statics and dynamics of low dimensional magnets / *Sheka, D.D., Kravchuk, V.P., Gaididei, Y.* // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2015. — Vol. 48, no. 12. — P. 125202.
- [28] Magnetic Möbius stripe without frustration: Noncollinear metastable states / *Castillo-Sepúlveda, S., Escobar, R.A., Altbir, D., Krizanac, M., Vedmedenko, E.Y.* // *Physical Review B*. — 2017. — Vol. 96, no. 2. — P. 024426.

- [29] Современная геометрия: методы и приложения. т.1. Геометрия поверхностей, групп преобразований и полей / *Дубровин, Б. А., Новиков, С. П., Фоменко, А. Т.* — М.: Эдиториал УРСС, 1998. — 336 с.
- [30] Intrinsic magnetization of antiferromagnetic textures / *Tveten, E.G., Müller, T., Linder, J., Brataas, A.* // *Physical Review B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 104408.
- [31] One-dimensional magnetism. In: Quantum Magnetism. / *Mikeska, H.J., Kolezhuk, A.K.* // Springer Berlin Heidelberg. — ISBN 3-540-21422-4. — 2004. — P. 1–83.
- [32] Structural and magnetic characterization of the one-dimensional  $s=5/2$  antiferromagnetic chain system  $\text{SrMn}(\text{VO}_4)(\text{OH})$  / *Sanjeewa, L.D., Garlea, V.O., McGuire, M.A., McMillen, C.D., Cao, H., Kolis, J.W.* // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 224407.
- [33] Magnetic properties of the spin-1 chain compound  $\text{NiCl}_2\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3$  / *Lipps, F., Arkenbout, A.H., Polyakov, A., Günther, M., Salikhov, T., Vavilova, E., Klauss, H.H., Büchner, B., Palstra, T.M., Kataev, V.* // *Low Temperature Physics.* — 2017. — Vol. 43, no. 11. — P. 1298–1304.
- [34] Single-chain magnets: beyond the Glauber model / *Zhang, W.X., Ishikawa, R., Breedlove, B., Yamashita, M.* // *RSC Adv.* — 2013. — Vol. 3. — P. 3772–3798.
- [35] A family of rare-earth-based single chain magnets: playing with anisotropy / *Bernot, K., Bogani, L., Caneschi, A., Gatteschi, D., Sessoli, R.* // *Journal of the American Chemical Society.* — 2006. — Vol. 128, no. 24. — P. 7947–7956.
- [36] Magnetic study of the electronic states of B-DNA and M-DNA doped with metal ions / *Kenji Mizoguchi, Shunsuke Tanaka, Tasuku Ogawa, Naofumi Shiobara, Hirokazu Sakamoto* // *Physical Review B.* — 2005. — Vol. 72, no. 3. — P. 033106.
- [37] Possibilities of magnetic modifications of DNA wires, sheets and related materials / *K. Yamaguchi, T. Taniguchi, T. Kawakami, T. Hamamoto, M. Okumura* // *Polyhedron.* — 2005. — Vol. 24, no. 16-17. — P. 2758–2766.
- [38] Magndata: A collection of magnetic structures with portable cif-type files / <http://webbdcrystal.ehu.es/magndata/>

- [39] Structural and magnetic properties of heptacoordinated Mn(II) complexes containing a 15-membered pyridine-based macrocycle and halido/pseudohalido axial ligands / *Drahoš, B., Herchel, R., Trávníček, Z.* // RSC Adv. — 2016. — Vol. 6. — P. 34674–34684.
- [40] Reversible size modification of Iron and Gallium molecular wheels: A Ga<sub>10</sub> “Gallic wheel” and large Ga<sub>18</sub> and Fe<sub>18</sub> wheels / *King, P., Stamatatos, T.C., Abboud, K.A., Christou, G.* // *Angewandte Chemie International Edition*. — 2006. — Vol. 45, no. 44. — P. 7379–7383.
- [41] Colloquium: Atomic spin chains on surfaces / *Choi, D.J., Lorente, N., Wiebe, J., von Bergmann, K., Otte, A.F., Heinrich, A.J.* // *Reviews of Modern Physics*. — 2019. — Vol. 91, no. 4. — P. 041001.
- [42] Creating designer quantum states of matter atom-by-atom / *Khajetoorians, A.A., Wegner, D., Otte, A.F., Swart, I.* // *Nature Reviews Physics*. — 2019. — Vol. 1, no. 12. — P. 703–715.
- [43] Quantum Magnetism / *Schollwöck, U., Richter, J., Farnell, D.J.J., Bishop, R.F., eds.* // Springer Berlin Heidelberg. — 2004. — ISBN 3-540-21422-4. — 481 p.
- [44] Magnetic anisotropy of Fe<sub>6</sub> and Fe<sub>10</sub> molecular rings by cantilever torque magnetometry in high magnetic fields / *A. Cornia, A. G. M. Jansen, M. Affronte* // *Physical Review B*. — 1999. — Vol. 60, no. 17.
- [45] Single-molecule magnets based on iron(III) oxo clusters / *Dante Gatteschi, Roberta Sessoli, Andrea Cornia* // The Royal Society of Chemistry, Chem. Commun. — 2000. — Vol. 9. — P. 725–732.
- [46] Direct observation of finite size effects in chains of antiferromagnetically coupled spins / *Guidi, T., Gillon, B., Mason, S.A., Garlatti, E., Carretta, S., Santini, P., Stunault, A., Caciuffo, R., van Slageren, J., Klemke, B., Cousson, A., Timco, G.A., Winpenny, R.E.P.* // *Nature Communications*. — 2015. — Vol. 6, no. 1. — P. 7061.
- [47] Inelastic neutron scattering studies on the odd-membered antiferromagnetic wheel Cr<sub>8</sub>Ni / *Baker, M.L., Waldmann, O., Piligkos, S., Bircher, R., Cador, O., Carretta, S., Collison, D., Fernandez-Alonso, F., McInnes, E.J.L., Mutka, H., Podlesnyak,*

*A., Tuna, F., Ochsenbein, S., Sessoli, R., Sieber, A., Timco, G.A., Weihe, H., Güdel, H.U., Winpenny, R.E.P.* // *Physical Review B*. — 2012. — Vol. 86. — P. 064405.

[48] **SLaSi** spin–lattice simulations package /

<http://slasi.knu.ua>

[49] **NIST Handbook of Mathematical Functions** / *Olver, F.W.J., Lozier, D.W., Boisvert, R.F., Clark, C.W., eds.* // Cambridge University Press, New York, NY. — 2010. — ISBN 0521140633.

## Додаток А. Спін-граткові моделювання

Для перевірки аналітично отриманих результатів було проведено серію спін-граткових моделювань для АФМ кілець з різними кривинами за допомогою спін-граткового симулятора SLaSi [48].

Кільце представлене одновимірним криволінійним ланцюжком одиничних магнітних моментів  $\mathbf{M}_i$ ,  $i = 1, \overline{N}$ , початкові значення яких задаються відповідно до АФМ порядку. Замкненість кільця контролюється накладанням періодичних граничних умов на рівняння, що описують систему. Рівноважні розподіли намагніченостей визначаються розв'язками системи рівнянь Ландау-Ліфшица-Гільберта для Гамільтоніану:

$$H = -\frac{JS^2}{2} \sum_i \mathbf{M}_i \cdot \mathbf{M}_{i+1} - \frac{K^\tau S^2}{2} \sum_i (\mathbf{M}_i \cdot \mathbf{e}_{\tau_i})^2 - g\mu_B S \sum_i \mathbf{M}_i \cdot \mathbf{B}, \quad (55)$$

де перший доданок описує обмінну взаємодію з константою обміну  $\mathbf{J} < 0$ , другий – важковісну анізотропію з коефіцієнтом  $K^\tau < 0$  та напрямком вісі  $\mathbf{e}_{\tau_i}$ , останній – взаємодію з зовнішнім полем інтенсивністю  $\mathbf{B}$ . Розглядається система з коефіцієнтом релаксації Гільберта  $\alpha_g = 0.5$  для швидкого встановлення рівноважних станів, умова повної релаксації системи (тобто знаходження системи в стаціонарному стані):  $|\mathbf{dM}/dt| \lesssim 10^{-15}$ .

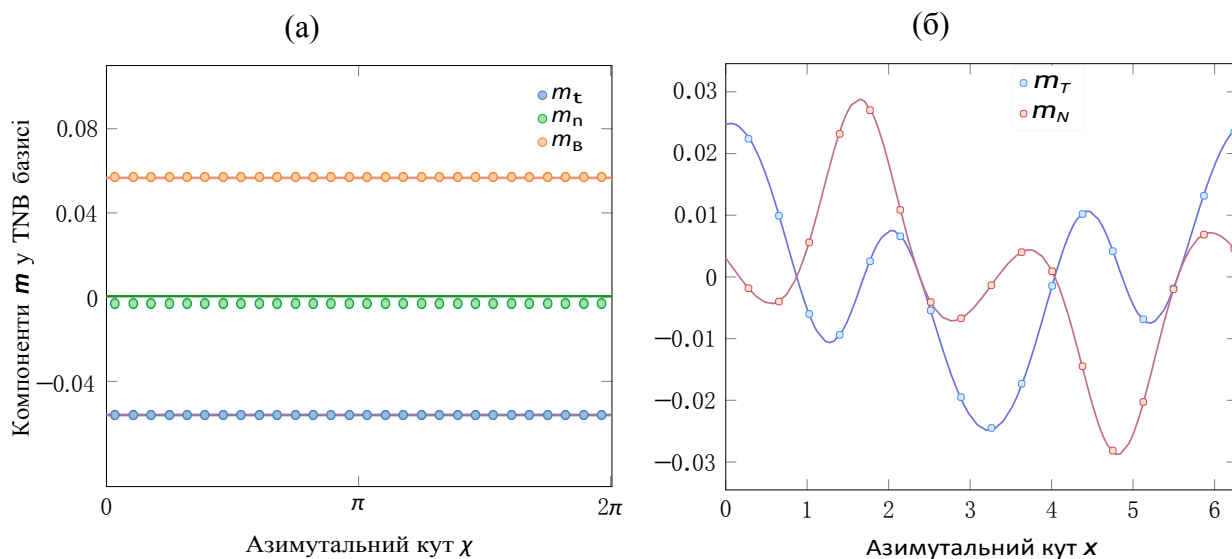


Рис. 12: Розподіли сумарної намагніченості після СФП: 5(a) у вихровому стані; 5(b) в оніон стані; символи відповідають даним отриманим з спін-граткових моделювань, суцільні лінії — аналітично знайденим залежностям.

Зміна кривини кільця досягається зміною кількості магнітних моментів в ланцюжку. Кривина кільця визначається як  $\kappa = \frac{2\pi}{Na_0}$ . В цій роботі для моделювань було обрано наступні параметри:  $g = 2$ ,  $S = 1$ ;  $\mathbf{J} = -10^{-10}$  pJ,  $K^r = -4 \cdot 10^{-12}$  pJ, що дає значення магнітної довжини  $\ell = 5a_0$  і  $\zeta = 0.1$ .

Під час моделювань нормального та бінормального станів початкові розподіли намагніченостей було задано відповідно за нормаллю до кільця та вздовж вісі  $\hat{z}$  в лабораторній системі координат в АФМ порядку, після цього досліджувалась релаксація систем в зовнішньому полі. Для дослідження опіон стану початковий розподіл вектора Нееля було задано вздовж вісі  $\hat{x}$ . Розподіли векторів Нееля та феромагнетизму для цих станів після спін-флоп переходу зображено на рис. 12. Області стійкості рівноважних станів та вигляд кривих розділення фаз було знайдено з порівняння енергій змодельованих систем у всіх доступних станах: стан найменшою енергією вважався рівноважним. За результатами моделювань побудовано діаграму рівноважних станів, див. Рис. 11.