

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ВИСОКИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Завідувач кафедри теоретичних основ високих технологій

проф. Лозовський Валерій Зіновійович

Протокол №_____засідання кафедри

від “_____” _____2022 р.

**КЕРОВАНА СТРУМОМ КВАНТОВА ДИНАМІКА ХІРАЛЬНОСТІ У
ЗАКРІПЛЕНІЙ ДОМЕННІЙ СТІНЦІ В ФЕРОМАГНІТНОМУ
НАНОДРОТІ**

Випускна кваліфікаційна робота бакалавра

студента спеціальності

104 «Фізика та астрономія»

ОП «Фізика нанорозмірних та низьковимірних систем»

Теслі Романа Руслановича

Науковий керівник

професор кафедри теоретичних

основ високих технологій

д.ф.-м.н., с.н.с. **Колежук Олексій Костянтинович**

Оцінка захисту роботи

Київ – 2022 р..

АНОТАЦІЯ

Тесля Р.Р. *«Керована струмом квантова динаміка хіральності у закріпленій доменній стінці в феромагнітному нанодроті»*. Кваліфікаційна робота бакалавра за спеціальністю 104 «Фізика і астрономія», освітня програма «Фізика (високі технології)». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут високих технологій. – Київ – 2022

Науковий керівник: д.ф.-м. н., с.н.с. Колежук О.К., професор кафедри теоретичних основ високих технологій, Інститут високих технологій Київського національного університету імені Тараса Шевченка

У роботі досліджені квантовомеханічні особливості власних функцій та енергетичного спектра мезоскопічної доменної стінки з двома центрами пінінгу у квазіодновимірному феромагнетику. Показано, що за допомогою пропускання через стінку спін-поляризованого струму з різною залежністю від часу можна ефективно керувати переходами між чотирма найнижчими квантовими станами системи, тим самим переводячи її у стан суперпозиції.

Ключові слова: мезоскопічна доменна стінка, спін-поляризований струм, квантові переходи.

ЗМІСТ

1. Вступ	4
2. Постановка задачі	5
3. Практична частина.....	10
3.1 Аналіз стаціонарної задачі.....	10
3.2 Аналіз нестаціонарної задачі.....	14
3.3 Чисельний аналіз стаціонарної задачі	18
3.4 Чисельний аналіз нестаціонарної задачі	23
4. Висновки.....	27
5. Література	28

1. Вступ

Спінтроніка займається дослідженням можливостей застосування спінового струму електронів для створення різноманітних пристроїв, таких як енергоносії, пристрої пам'яті, транзистори. Особливо цікавими є системи низької розмірності (2D, 1D), в яких значну роль грають квантові ефекти.

Магнітний нанодріт, який є прикладом квазіодновимірної системи, може стати центром локалізації так званої доменної стінки, яка суттєво змінює властивості матеріалу у порівнянні зі звичайним об'ємним зразком [1-3].

Зокрема, у роботі [4] було показано, що спін-поляризований струм при проходженні через таку стінку робить її так звані хіральні стани нееквівалентними, що відкриває можливість керування цією хіральністю.

У роботі [5] було побудовано спрощену мікроскопічну модель взаємодії електрона зі стінкою, досліджено механізм впливу струму на хіральність.

У даній роботі ми дослідимо квантовомеханічні особливості доменної стінки за різних режимів пінінгу (однорямний та дворямний) та способи керування переходами між стаціонарними станами такої системи (створення суперпозиції станів) за допомогою спін-поляризованого струму, залежного від часу.

2. Постановка задачі

В даній роботі досліджується динаміка квантових станів мезоскопічної спінової стінки, локалізованої в області пінінгу (неоднорідності, домішок) квазіодновимірного нанорозмірного магнітного зразка (дроту). Поздовжній розмір зразка по осі Ox $L_x \gg L_y, L_z$.

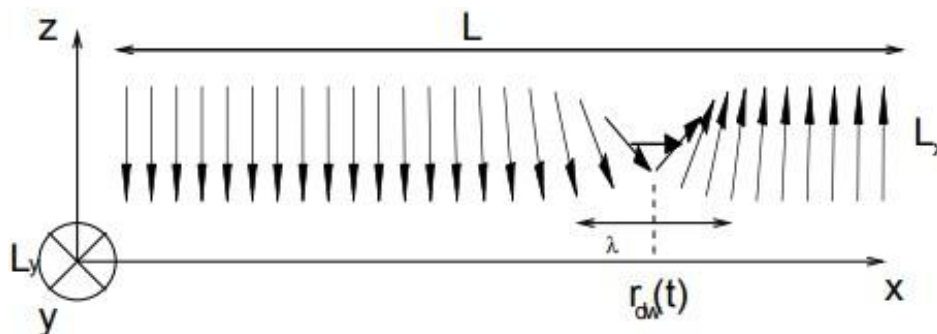


Рис. 1. Доменна спінова стінка в одновимірному ферромагнетикі.

Намагніченість всередині зразка описується одиничним вектором намагніченості $\vec{m} = \vec{M} / |\vec{M}|$, у сферичних координатах $\vec{m} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$. Густина енергії обмінної взаємодії має вигляд

$$w_s = A \left[(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2 \right]$$

де A - стала неоднорідного обміну. Для кубічного квазіодновимірного кристалу:

$$w_s = A \left[(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta (\nabla\varphi)^2 \right] = A \left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)^2 + \sin^2\theta \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} \right)^2 \right].$$

Магнітні моменти атомів у стінці напрямлені не вздовж вісі найлегшого намагнічування, тому виникає енергія магнітної анізотропії [6]:

$$E_{\text{aniso}}^{\Omega} = N_{\perp} S \int_a^x \left[\frac{K_{\perp} \Omega^2(x)}{2} - \frac{K_z \Omega^2(x)}{2} \right],$$

де S – має зміст середнього значення спіну магнітного атома ґратки, N_{\perp} – кількість атомів у перерізі дроту.

Тоді сумарна енергія спінової стінки матиме наступний вигляд:

$$E[m] = N_{\perp} S^2 \int_a^x \left\{ \frac{J_s}{2} a^2 \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{K_{\perp}}{2} \sin^2 \theta \sin^2 \phi - \frac{K_z}{2} \sin^2 \theta \right\}$$

тут J_s – константа обмінної взаємодії, K_{\perp} та K_z – поперечна і поздовжня константи анізотропії відповідно. Всі сталі є додатніми.

Для опису руху доменної стінки необхідно розв'язати рівняння Ландау-Ліфшиця [7], які у випадку ромбічної анізотропії мають вигляд:

$$\begin{aligned} \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} - A \frac{\partial}{\partial x} \left[\sin^2 \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + D \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi &= 0, \\ \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial t} + A \frac{\partial \theta}{\partial x^2} - A \sin \theta \cos \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - D \sin \theta \cos \theta (1 + \square \sin^2 \phi) &= 0, \end{aligned}$$

де $A = JSa^2 / \hbar$, $D = K_z S / \hbar$, $\square = K_{\perp} / K_z$.

Рівняння можуть бути отримані як рівняння Ейлера-Лагранжа для системи з функцією Лагранжа:

$$L = N_{\perp} S \int_a^x (1 - \cos \theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} - E[m].$$

Розв'язок цих рівнянь у вигляді хвилі, що рухається з певною швидкістю відомий – це так званий розв'язок Уокера

$$\theta(x, t) = \theta(\xi = x - Vt), \quad \phi = \phi_0,$$

$$\cos\theta_{\text{Walker}} = Q \tanh \left[\frac{\xi (1 + \sin^2 \phi_0)^{1/2}}{\lambda} \right], \quad \lambda = a \sqrt{\frac{J_s}{K_z}}$$

$$V = Q \frac{a S}{z} (K J)^{1/2} \frac{\sin \phi_0 \cos \phi_0}{(1 + \sin^2 \phi_0)^{1/2}}, \quad \sin \phi_0 = K_{\perp} / K_z,$$

тут $Q = \pm 1$ – топологічний заряд, який описує зміну напрямку намагніченості, λ – товщина доменної стінки, x – координата, яка описує положення стінки у просторі, V – швидкість руху стінки.

Потенціальна енергія доменної стінки залежатиме від пінінгу. Ми розглядатимемо пінінг з двома симетричними центрами:

$$V_{\text{pin}}(x_{\text{DW}}) = V_0 \left(\frac{x^2}{x_0^2} - 1 \right)^2,$$

тут V_0 описує силу пінінгу, а x_0 характеризує положення потенціальних ям.

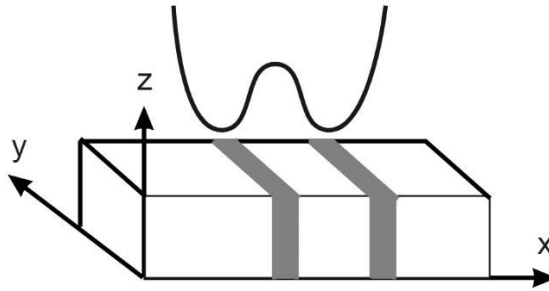


Рис. 2. Схематичне зображення феромагнетика з двома центрами пінінгу та графік залежності потенціалу пінінгу від координати x .

Введемо також доданок, що відповідає впливу спін-поляризованого струму на систему. Спіни електронів струму взаємодіють з намагніченістю всередині дроту, енергія взаємодії у найпростішому розгляді має вигляд $-a \vec{S} \cdot \vec{m}(x)$. Наявність струму призводить до наступної зміни у функції

Лагранжа [6]:

$$L = L - \frac{1}{2} I \int dx (1 - \cos\theta) \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad I = \frac{\hbar P}{s |e| c}$$

де I_c - сила струму, що протікає через дріт, P - ступінь спінової поляризації цього струму, I_s має розмірність енергії (лінійна густина спінового струму).

Запишемо повну функцію Лагранжа системи:

$$L = N S \int_a^x (1 - \cos\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} - E(\vec{m}) - V(x) - \frac{1}{2} I_s \int_a^x dx (1 - \cos\theta) \frac{\partial \phi}{\partial x}.$$

Виконавши підстановку розв'язку Уокера $\theta(x, t) = \theta_{\text{Walker}}(\xi)$, $\phi = \phi_0$, $\xi = x - x_{DW}(t)$, $\phi_0 = \phi_{DW}(t)$, маємо опис динаміки доменної стінки у наближенні «колективних координат» x_{DW}, ϕ_{DW} :

$$L = \frac{2N \cdot S}{a} Q \phi_{DW} \dot{x}_{DW} - N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \varepsilon \sin^2 \phi_{DW}} - V_0 \left(\frac{x_{DW}}{x_0} - 1 \right)^2 + Q I_s \phi_{DW},$$

$$E_a = 2N_{\perp} S^2 \sqrt{2JK_z}.$$

Координати x_{DW}, ϕ_{DW} входять у функцію Лагранжа як канонічно спряжені координата та імпульс $p_{DW} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{DW}} = p_0 Q \phi_{DW}$, $p_0 = \frac{2N_{\perp} \cdot S}{a}$, тому, перейшовши до формалізму Гамільтона, можна зробити канонічне перетворення:

$$\square = N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \varepsilon \sin^2 \left(\frac{p_{DW}}{Q p_0} \right)} + V_0 \left(\frac{x_{DW}}{x_0} - 1 \right)^2 - Q I_s(t) \cdot \phi.$$

Від пари змінних (p_{DW}, x_{DW}) переходимо до іншої пари (p, q) , $x_{DW} = -p$, $p_{DW} = q$. Одразу проводимо процедуру квантування, тобто від фізичних величин переходимо до їх операторів: $p \rightarrow \hat{p} = -i \frac{\partial}{\partial q} = -\frac{i}{Q p_0} \frac{\partial}{\partial \phi}$, $q \rightarrow Q p_0 \phi$. Отримуємо гамільтоніан:

$$\dot{\varphi} = V_0 \left| \left(\frac{\dot{Qp x}}{0 \ o} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right| + N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \sin^2 \varphi} - QI_s(t) \cdot \varphi .$$

Увівши заміну $\left(\frac{\dot{Qp x}}{0 \ o} \right)^2 = \alpha$ та розкривши дужки, остаточно

отримуємо гамільтоніан доменної стінки:

$$\square = V_0 \left(\alpha \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right) + N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \sin^2 \varphi} - QI_s(t) \cdot \varphi .$$

Перепишемо задачу під симетричні межі зміни кута φ : $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right) \rightarrow (-\pi, \pi)$, для чого досить зробити заміну $\varphi \rightarrow \check{\varphi} + \frac{\pi}{2}$ і внести

відповідні зміни до гамільтоніана:

$$\square = V_0 \left(\alpha \frac{\partial^4}{\partial \check{\varphi}^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \check{\varphi}^2} + 1 \right) + N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \cos^2 \varphi} - QI_s(t) \cdot \varphi$$

3. Практична частина

3.1 Аналіз стаціонарної задачі

Проаналізуємо власні функції та власні значення системи з гамільтоніаном:

$$\hat{H} = V_0 \left(\alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 \right) + N_{\perp} E_a \sqrt{1 + \alpha \cos^2 \varphi} - Q I_s(t) \cdot \varphi.$$

Для початку розглянемо випадок, коли струм не залежить від часу, тобто $I_s(t) = const$ та запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\hat{H} \psi(\varphi) = E \psi(\varphi),$$

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi).$$

Перейдемо до безрозмірних одиниць, поділивши рівняння на V_0 .

Позначивши $N_{\perp} E_a / V_0 = U_0$, $Q I_s / V_0 = j$, $E / V_0 = \tilde{E}$, перепишемо:

$$\left(\alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 + U_0 \sqrt{1 + \alpha \cos^2 \varphi} - j \varphi \right) \psi(\varphi) = \tilde{E} \psi(\varphi)$$

Розв'язувати рівняння будемо методом розкладання за власною системою функцій. Для цього в якості нульової задачі врахуємо лише енергію пінінгу:

$$\hat{H}_0 = \alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1$$

Власні функції такого гамільтоніана шукатимемо у вигляді експонент $\psi(\varphi) = A e^{\beta \cdot \varphi}$, причому, оскільки функція ψ має задовольняти умову періодичності, отримуємо обмеження на параметр β :

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow A e^{\beta \cdot \varphi} = A e^{\beta \cdot (\varphi + 2\pi)} \Rightarrow e^{2\pi\beta} = 1 \Rightarrow \beta = i \cdot n,$$

де n – ціле число, i – уявна одиниця.

Отже, розв'язки мають наступний вигляд:

$$\psi_n(\varphi) = A_n e^{i n \varphi},$$

Симетрія оператора \hat{H}_0 відносно заміни $\varphi \rightarrow -\varphi$ вказує на те, що функції $\psi_n(\varphi)$ та $\psi_{-n}(\varphi)$ відповідають одному й тому ж власному значенню, яке можна отримати прямою підстановкою $\psi_n(\varphi)$ до рівняння:

$$\hat{H}_0 \psi_n(\varphi) = \tilde{E}_n \psi_n(\varphi),$$

$$\tilde{E}_n = \alpha^2 n^4 - 2\alpha n^2 + 1 = (\alpha n^2 - 1)^2 \geq 0.$$

Крім того, розв'язки повинні мати певну парність, тому, шукаючи їх у вигляді суперпозиції $\psi_n(\varphi)$ та $\psi_{-n}(\varphi)$, накладаючи умови парності або непарності функції, маємо:

$$\psi_n(\varphi) = A_n e^{i n \varphi} + B_{-n} e^{-i n \varphi}, \quad \psi_n(-\varphi) = \psi_n(\varphi) \Rightarrow A_n = B_{-n}, \quad \psi_n(\varphi) = C_n \cos(n\varphi).$$

Непарний розв'язок шукаємо аналогічно: $\psi_n(\varphi) = C_n \sin(n\varphi)$. Отже, кожному рівню енергії відповідають принаймні дві лінійно незалежні функції різної парності.

Проте, аналізуючи вираз для \tilde{E}_n , бачимо, що при певних значеннях α власні значення немонотонно залежать від n (Рис. 3)

Такий характер дисперсійної залежності дозволяє отримати чотирикратно вироджені рівні, регулюючи параметр α .

Зазначимо, що при $\alpha > 2$ ($\alpha < 0$ – нефізичний випадок) виконується нерівність $\tilde{E}_1 = (\alpha - 1)^2 > 1$, тобто область немонотонної залежності енергії від квантового числа зникає.

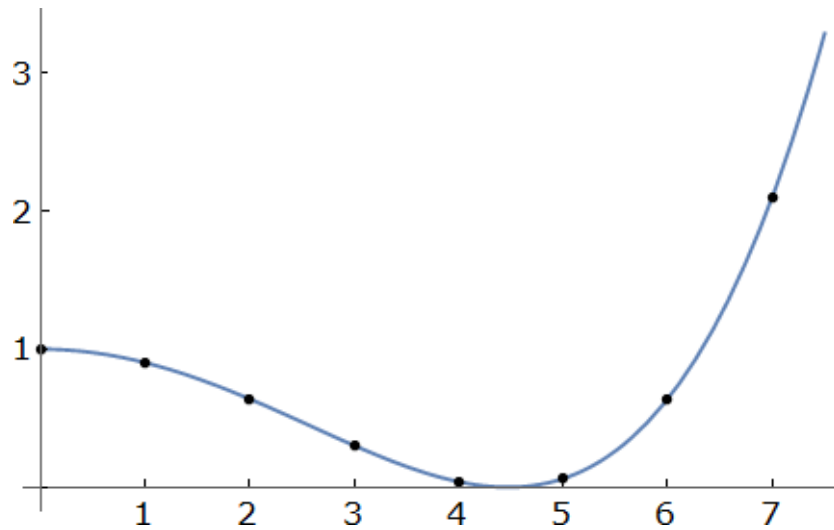


Рис. 3. Графік власних значень \tilde{E}_n при $\alpha = 0.05$.

Другий доданок у гамільтоніані $(U_0\sqrt{1 + \alpha \cos^2 \varphi})$, який має вигляд двоямного потенціалу, не вплине на симетрію гамільтоніана та призведе до розщеплення відповідних енергетичних рівнів. Введення струму $(-j \cdot \varphi)$ порушить відповідну симетрію та вплине на локалізацію хвильових функцій.

Обрахунок власних функцій та власних значень гамільтоніана зі збуреннями виконуватимемо методом розкладання за повною системою функцій. Для чисельних обчислень зручніше використовувати набір експонент $\{e^{in\varphi}\}$. Окреслимо загальну схему такого розкладу.

Маємо гамільтоніан \hat{H}_0 та систему його власних функцій $\{\psi_n(\varphi)\}$. Врахування збурення додає до гамільтоніана функцію, залежну від φ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + f(\varphi), \quad \hat{H}\psi(\varphi) = E\psi(\varphi)$$

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера $\psi(\varphi)$ шукаємо у вигляді $\psi(\varphi) = \sum_n A_n \psi_n(\varphi)$, функцію $f(\varphi)$ також розкладаємо в ряд Фур'є

$$f(\varphi) = \sum_k f_k \psi_k(\varphi), \quad f_k = \int \psi_k^*(\varphi) f(\varphi) d\varphi. \text{ Робимо підстановку до рівняння:}$$

$$\begin{aligned} & \left(\hat{H}_0 + f(\varphi) \right) \psi(\varphi) = E \psi(\varphi) \Rightarrow \\ & \left(\hat{H}_0 + \sum_k f_k \psi_k(\varphi) \right) \sum_n A_n \psi_n(\varphi) = E \sum_n A_n \psi_n(\varphi) \Rightarrow \\ & \sum_n A_n \hat{H}_n \psi_n(\varphi) + \sum_k \sum_n A_n f_k \psi_k(\varphi) \psi_n(\varphi) = \sum_n A_n E \psi_n(\varphi) \Rightarrow \\ & \sum_k \sum_n A_n f_k \psi_k(\varphi) \psi_n(\varphi) = \sum_n A_n (E - \hat{H}_n) \psi_n(\varphi) \end{aligned}$$

Множимо рівняння на $\psi_m^*(\varphi)$ та інтегруємо по φ за областю визначення. Враховуючи умову ортонормованості $\int \psi_m^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{m,n}$, тут $\delta_{m,n}$ – символ Кронекера, маємо:

$$\begin{aligned} \sum_n A_n (E - \hat{H}_n) \delta_{m,n} &= \sum_k \sum_n A_n f_k \int \psi_m^*(\varphi) \psi_k(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi \\ A_m (E - \hat{H}_m) &= \sum_n A_n \sum_k f_k D_{k,n}^m, \\ \sum_n A_n \left(E_m \delta_{m,n} + \sum_k f_k D_{k,n}^m \right) &= \sum_n A_n E, \end{aligned}$$

де позначено $D_{k,n}^m = \int \psi_m^*(\varphi) \psi_k(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi$, індекси пробігають цілі числа. Отримали лінійну однорідну систему рівнянь на коефіцієнти A_n та енергії E . Її можна переписати у вигляді:

$$\vec{D} \vec{A} = E \vec{A},$$

де $\vec{A} = (A_1, A_2, \dots, A_n, \dots)$, тобто маємо задачу на знаходження власних чисел та власних векторів матриці D , елементи якої дорівнюють

$$D_{ij} = \hat{H}_i \delta_{i,j} + \sum_k f_k D_{k,j}^i.$$

Подальше розв'язання задачі виконується чисельно. Для цього робиться підстановка власних функцій нульової задачі та «обрізання» повної системи. Попередньо обчислюються аналітичні вирази для коефіцієнтів Фур'є f_k відповідних функцій (якщо це можливо).

3.2 Аналіз нестационарної задачі

Нехай ми проаналізували гамільтоніан за відсутності струму:

$$\hat{H}_0 = V_0 \left(\alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 + U_0 \sqrt{1 + \cos^2 \varphi} \right).$$

Тоді хвильові функції, як розв'язки рівняння Шредінгера, матимуть тривіальну залежність від часу:

$$\Psi_n(\varphi, t) = e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi),$$

тут E_n – власні значення \hat{H}_0 , а $\psi_n(\varphi)$ – нормовані розв'язки стаціонарного рівняння, $\hat{H}_0 \psi_n(\varphi) = E_n \psi_n(\varphi)$.

Вмикання струму означає додавання до гамільтоніана часозалежного доданку:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \equiv \hat{H}(t)$$

Нехай функція $\Psi(\varphi, t)$ є розв'язком нестационарного рівняння Шредінгера $i \frac{\partial \Psi(\varphi, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\varphi, t)$. Розкладемо Ψ в ряд за повною системою функцій гамільтоніана \hat{H}_0 , вважаючи коефіцієнти розкладу залежними від часу:

$$\Psi(\varphi, t) = \sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi).$$

Виконаємо підстановку цього розкладу до рівняння Шредінгера.

$$i \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi) \right) = \left[\square_0 + W(t) \right] \left(\sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi) \right),$$

$$\sum_n \left(i \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) + \cancel{C_n(t) E_n} \right) e^{-i E_n t} \psi_n(\varphi) = \left(\sum_n \cancel{C_n(t) E_n} \cdot e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi) \right) +$$

$$+ W(t) \left(\sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi) \right)$$

Після відповідних спрощень множимо рівняння на $\psi_m^*(\varphi)$ та інтегруємо по φ . Враховуючи умову нормування $\int \psi_m^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{m,n}$, маємо:

$$\sum_n i \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot \delta_{m,n} = \sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \int \psi_m^*(\varphi) W(t) \psi_n(\varphi) d\varphi,$$

позначимо $W_{mn}(t) = \int \psi_m^*(\varphi) W(t) \psi_n(\varphi) d\varphi$ – матричний елемент оператора збурення:

$$i \frac{\partial}{\partial t} C_m(t) e^{-i E_m t} = \sum_n C_n(t) \cdot e^{-i E_n t} \cdot W_{mn} \Rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} C_m(t) = \sum_n C_n(t) \cdot e^{i E_m - E_n t} \cdot W_{mn},$$

позначаючи $\tilde{W}_{mn}(t) = e^{i E_m - E_n t} \cdot W_{mn}(t)$, остаточно отримуємо:

$$i \frac{\partial}{\partial t} C_m(t) = \sum_n C_n(t) \cdot \tilde{W}_{mn}(t).$$

В загальному випадку розв'язати нескінченну систему диференціальних рівнянь на коефіцієнти $C_n(t)$ неможливо. Подальший аналіз задачі можна здійснити в рамках теорії збурень або чисельно, обмежуючись скінченною кількістю доданків розкладу $\psi_n(\varphi, t) = e^{-i E_n t} \cdot \psi_n(\varphi)$.

Цікавим є випадок, коли система ефективно поводить себе як дворівнева. Це можливо за умови існування двох близьких енергетичних рівнів достатньо віддалених від інших та слабого збурення.

Розглянемо модель, що має лише два стаціонарні стани $\psi_1(\varphi)$, $\psi_2(\varphi)$.

Для простоти вважатимемо, що в початковий момент часу $t=0$ вмикається

збурення (струм), яке має тривіальну залежність від часу:

$$\dot{W}(\varphi, t) = \begin{cases} W(\varphi), 0 < t < \tau \\ 0, t \notin (0, \tau) \end{cases}$$
, причому $W(\varphi) = \alpha \cdot \psi_1(\varphi)$, де α – дійсне число, ψ_1 –

редукована стала Планка. В початковий момент часу система знаходиться у стані 1. Введемо позначення $(E_m - E_n) / \hbar = \omega_{mn}$. Тоді система рівнянь на часозалежні коефіцієнти набуває вигляду:

$$\begin{cases} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} C_1(t) = C_{11} W_1 + C_{12} W_2 e^{-i\omega_{21}t}, \\ i \hbar \frac{\partial}{\partial t} C_2(t) = C_{21} W_1 e^{i\omega_{21}t} + C_{22} W_2. \end{cases}$$

Початкові умови: $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$.

Проаналізуємо явний вигляд коефіцієнтів W_{mn} . Якщо $m = n$, то

$$W_{nn} = \alpha \int_{-\pi}^{\pi} \psi_n^*(\varphi) \cdot \varphi \cdot \psi_n(\varphi) d\varphi = \alpha \int_{-\pi}^{\pi} |\psi_n(\varphi)|^2 \varphi d\varphi = 0,$$
 оскільки інтеграл

береться від непарної функції в симетричних межах. Також очевидно

$$W_{21} = \alpha \int_{-\pi}^{\pi} \psi_2^*(\varphi) \cdot \varphi \cdot \psi_1(\varphi) d\varphi = \alpha \int_{-\pi}^{\pi} \psi_1^*(\varphi) \cdot \varphi \cdot \psi_2(\varphi) d\varphi = W_{12}^*.$$

Якщо функції $\psi_n(\varphi)$ мають певну парність, то елемент W_{mn} відмінний від нуля лише для функцій $\psi_n(\varphi), \psi_m(\varphi)$ різної парності. Тобто маємо «заблоковані» переходи, що можна використати при керуванні розподілом ймовірності за допомогою струму.

Ввівши позначення $\beta = \alpha \int_{-\pi}^{\pi} \psi_1^*(\varphi) \cdot \varphi \cdot \psi_2(\varphi) d\varphi$ та врахувавши спрощення, маємо:

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} C_1(t) = C_2 \beta e^{-i\omega_{21}t}, \\ i \frac{\partial}{\partial t} C_2(t) = C_1 \beta^* e^{i\omega_{21}t}. \end{cases}$$

Виражаємо C_1 з другого рівняння системи та підставляємо у перше, після черги спрощень отримуємо диференціальне рівняння другого порядку на $C_2(t)$:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} C_2(t) - i\omega_{21} \frac{\partial}{\partial t} C_2(t) + |\beta|^2 C_2(t) = 0.$$

Підстановка $C_2(t) = C_0 e^{\lambda t}$ дає $\lambda_{1,2} = \frac{i}{2} \omega_{21} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4|\beta|^2 / \omega_{21}^2} \right)$. 3

початкових умов слідує $C_2(0) = 0$, $\frac{\partial}{\partial t} C_2(t)|_{t=0} = -i\beta$. В результаті маємо:

$$C_2(t) = \frac{2\beta}{\sqrt{\omega_{21}^2 + 4|\beta|^2}} \sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{\omega_{21}^2 + 4|\beta|^2}t\right) \cdot (-ie^{i\omega_{21}t} / 2),$$

$$|C_2(t)|^2 = \frac{4|\beta|^2}{\omega_{21}^2 + 4|\beta|^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\sqrt{\omega_{21}^2 + 4|\beta|^2}t\right).$$

Квадрат модуля коефіцієнта $C_1(t)$ можна знайти з умови нормування $|C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1$.

Проаналізуємо поведінку $|C_2(t)|^2$ при слабкому та сильному збуренні. Нагадаємо, що величина $\beta = \alpha \int \psi_1^*(\varphi) \cdot \varphi \cdot \psi_2(\varphi) d\varphi$ пропорційна збуренню, а $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ характеризує різницю між енергетичними рівнями.

У випадку слабкого збурення $|\beta|^2 \ll \omega_{21}^2, |C_2(t)|^2 \approx \frac{4|\beta|^2}{\omega_{21}^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{21}t\right)$.

Амплітуда стану 2 невелика, густина ймовірності осцилює на частоті $\omega = \frac{1}{2}\omega_{21}$. Це відповідає результату теорії збурень.

Коли збурення сильне, $|\beta|^2 \sim \omega_{21}^2, |C_2(t)|^2 \approx \sin^2(|\beta|t)$. Моді переходять «одна в одну» з частотою, що залежить лише від амплітуди збурення. Так можна, наприклад, швидко перерозподілити ймовірність між парою найнижчих рівнів системи, обравши амплітуду збурення у діапазоні $\omega_{21}^2 \sim |\beta|^2 \sim (E_3 - E_1)/\hbar$.

Отже, маємо можливість контролювати розподіл ймовірності між станами. Для цього необхідно попередньо проаналізувати матричні елементи оператора збурення та енергетичні відстані між відповідними рівнями.

3.3 Чисельний аналіз стаціонарної задачі

Проаналізуємо чисельно власні функції та власні значення гамільтоніана:

$$\hat{H} = V_0 \left(\alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \varphi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 1 + U_0 \sqrt{1 + \alpha \cos^2 \varphi} - j \cdot \varphi \right)$$

Для наступних обрахунків використовувався базис з $N_1 = 41$ функції $e^{i \cdot n \cdot \varphi}$, $-20 \leq n \leq 20$. Код програми у пакеті Wolfram Mathematica доступний за посиланням [8].

Проаналізуємо спочатку спінову стінку, що локалізована в одному центрі пінінгу. Для цього слід залишити доданок з другою похідною та змінити знак перед ним:

$$\square_1 = V_0 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + U_0 \sqrt{1 + \square \cos^2 \varphi} - j \cdot \varphi \right).$$

Тепер дисперсійна крива для незбуреної задачі матиме вигляд параболи (Рис. 4). Квантовому числу $n = 0$ відповідає функція $\psi = const$.

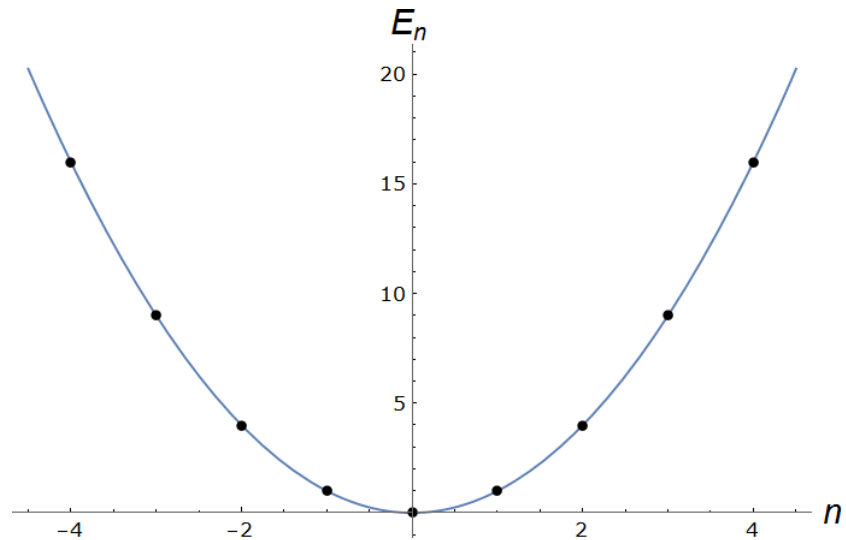


Рис. 4. Графік дисперсійної залежності при «одномному» пінінгу

Додавання потенціалу анізотропії дозволяє виділити дві найнижчі моди, їх хвильові функції локалізуються в мінімумах ($\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$), а струм призводить до нееквівалентності правої та лівої потенціальної ями, що дозволяє керувати розподілом ймовірності по координаті φ . Наприклад, на Рис. 5 зображено дві хвильові функції найнижчих станів та їх енергетичні рівні на фоні потенціалу у випадку сильної локалізації:

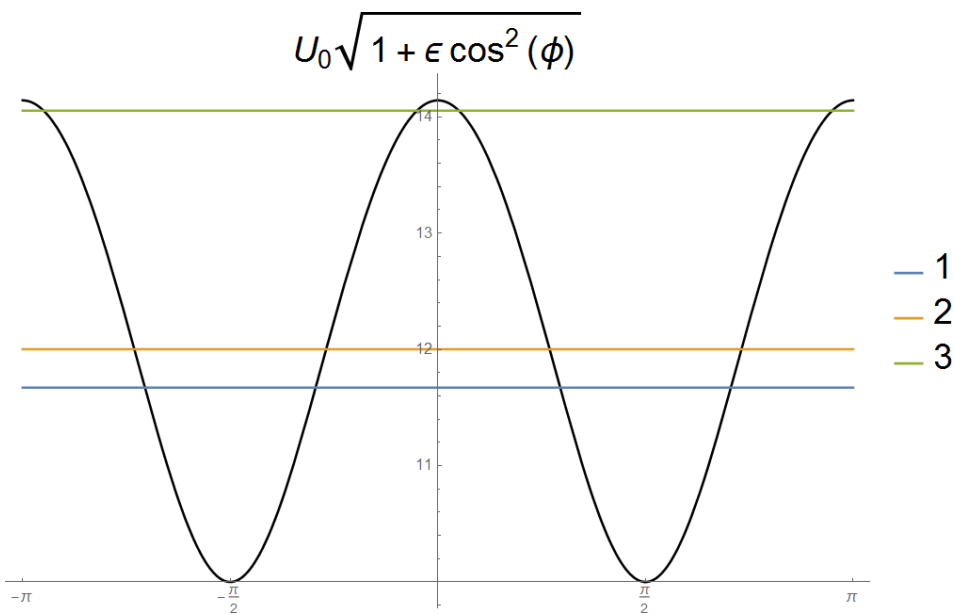
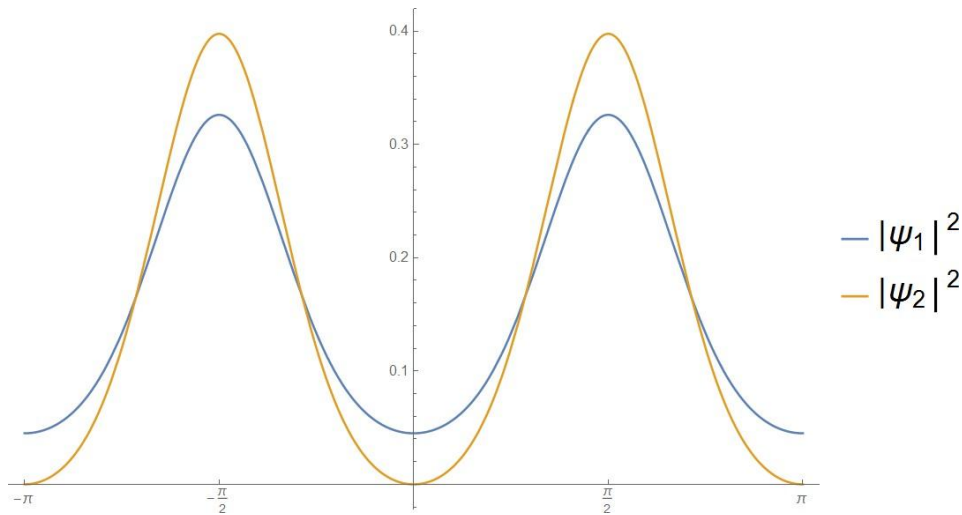


Рис. 5. Квадрати модулів хвильових функцій двох найнижчих станів системи при сильній локалізації. Енергетичні рівні (горизонтальні полоси) на фоні двоямного потенціалу анізотропії. Параметри системи: $U_0 = 10$, $\epsilon = 1$.

Бачимо, що перші два стани знаходяться на помітній енергетичній відстані від третього, що дозволяє оперувати ними як дворівневою системою.

Тепер увімкнемо струм та поглянемо на хвильові функції (Рис. 6). Наявність струму навіть невеликої амплітуди порушує симетрію та робить нееквівалентними стани з різною хіральністю, як було показано у [4].

Також варто звернути увагу на координатне представлення хвильових функцій такої системи. Для цього необхідно зробити Фур'є перетворення

відповідних функцій $\psi(\varphi) \rightarrow \psi(x)$. На Рис. 7 бачимо, що основна мода сконцентрована у центрі пінінгової ями, а вищі моди мають симетричні максимуми на відстані від центру.

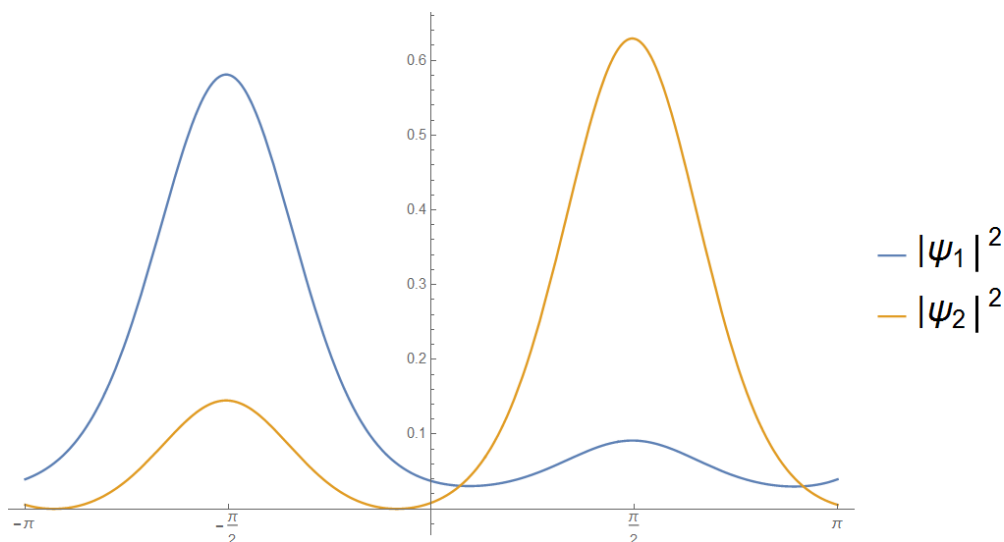


Рис. 6. Хвильові функції при сильній локалізації та невеликому струмі.
 Параметри системи: $U_0 = 10$, $\square = 1$, $j = 0.1$.

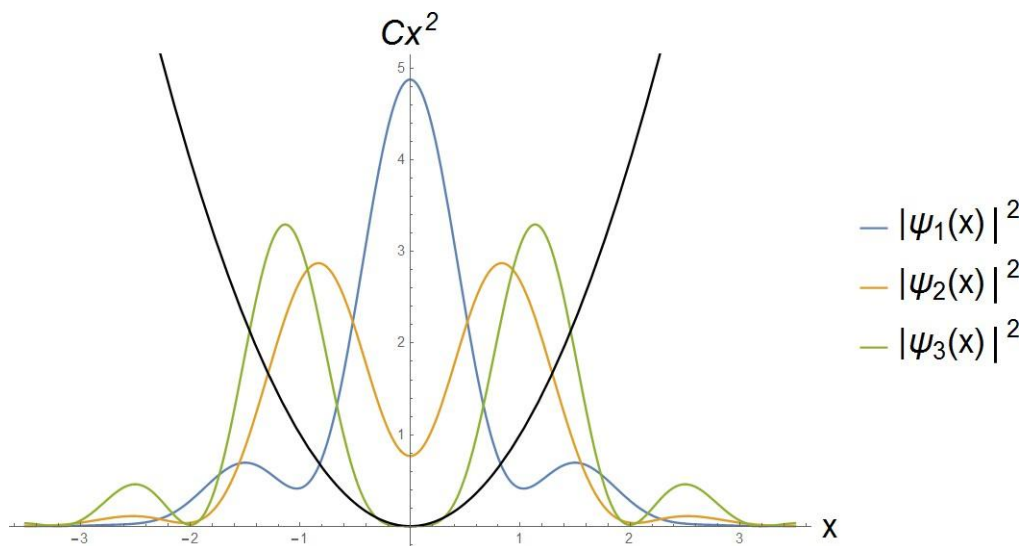


Рис. 7. Три найнижчі хвильові функції у координатному представленні на фоні квадратичного потенціалу пінінгу. Параметри системи: $U_0 = 10$, $\square = 1$, $j = 0.1$.

Тепер проаналізуємо особливості системи з двоємним потенціалом пінінгу:

$$\square = V_0 \left(\alpha^2 \frac{\partial^4}{\partial \phi^4} + 2\alpha \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + 1 + U_0 \sqrt{1 + \square \cos^2 \phi} - j \cdot \phi \right).$$

Власні моди вже залежатимуть від просторової конфігурації двох центрів пінінгу. В першу чергу помітно те, що найнижчі моди локалізуються в цих центрах в координатному представленні. На Рис. 8 зображено залежність хвильових функцій від кута та від координати.

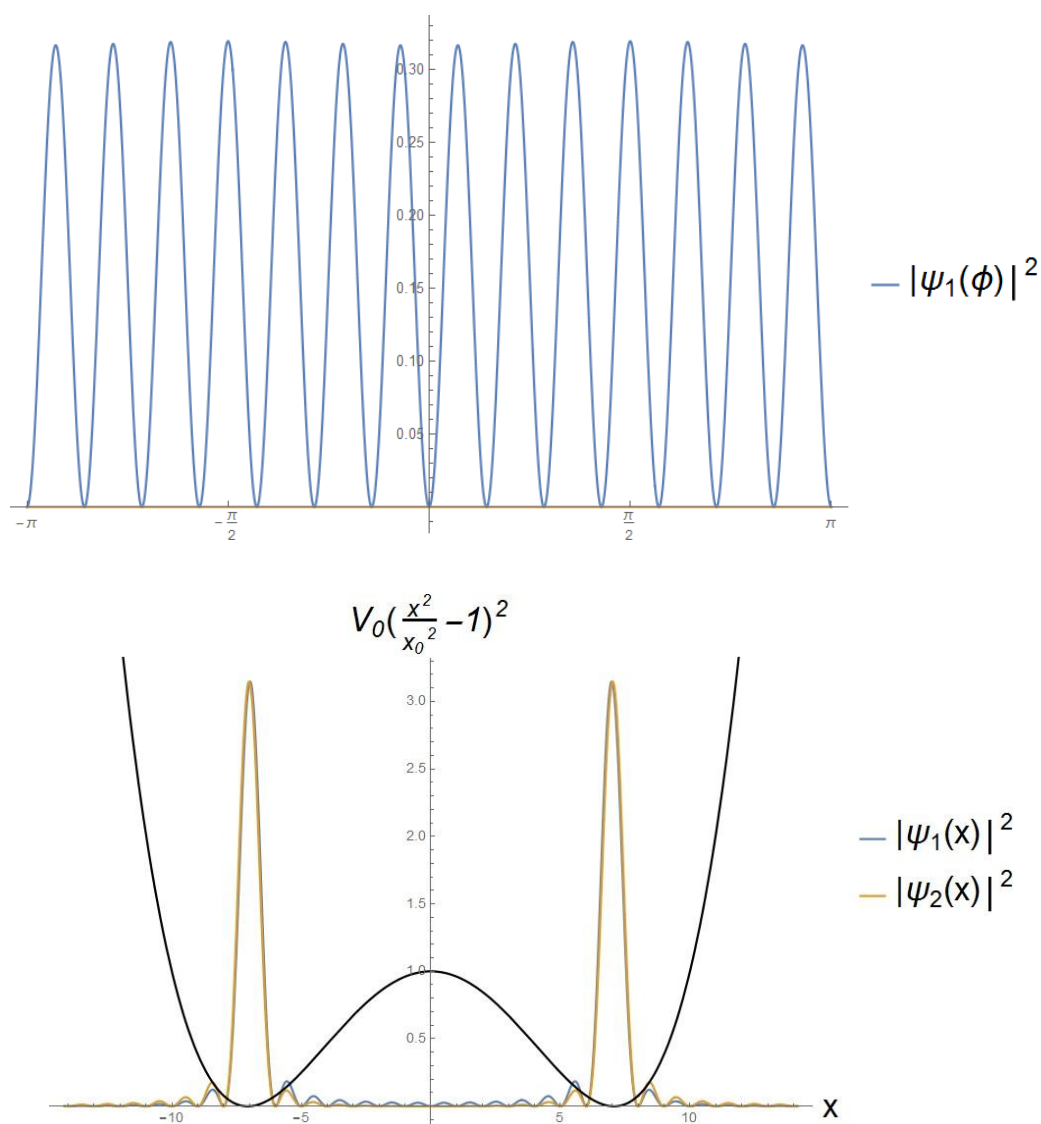


Рис. 8. Графік найнижчої моди у кутовому представленні та графіки двох найнижчих мод у координатному представленні на фоні двоємного потенціалу пінінгу. Параметри системи: $\alpha = 0.02$, $U_0 = 0.01$, $\square = 0.3$, $j = 0$.

Бачимо, що стан з мінімальною енергією тепер сильно осцилює по кутовій координаті, тобто його положення по φ не є чітко визначеним, тоді як координата – чітко відома, причому стінка локалізується одразу в обох ямах (обидві функції симетричні відносно $x = 0$). Також, очевидно, порушується осциляційна теорема для $\psi(\varphi)$, що пов'язано з немонотонною дисперсійною залежністю.

3.4 Чисельний аналіз нестационарної задачі

Покажемо, що за допомогою спін-поляризованого струму можна керувати переходами між станами та перевести систему, наприклад, із найнижчого стану у суперпозицію перших чотирьох мод.

Спочатку необхідно виділити четвірку найнижчих рівнів шляхом пінінгу, тобто змінюючи параметри α , V_0 – Рис. 9. Дані рівні «розщепляться» завдяки анізотропії, тобто відбудеться зняття виродження – Рис. 10. Після цього необхідно проаналізувати енергетичні відстані між енергіями першої четвірки – Рис. 11, а також відстань до п'ятого найнижчого рівня та підібрати амплітуду струму для керування переходами.

Така система може бути аналогом «подвійного кубіту», оскільки вона має чотири квантові стани, близькі за енергіями, якими можна ефективно керувати.

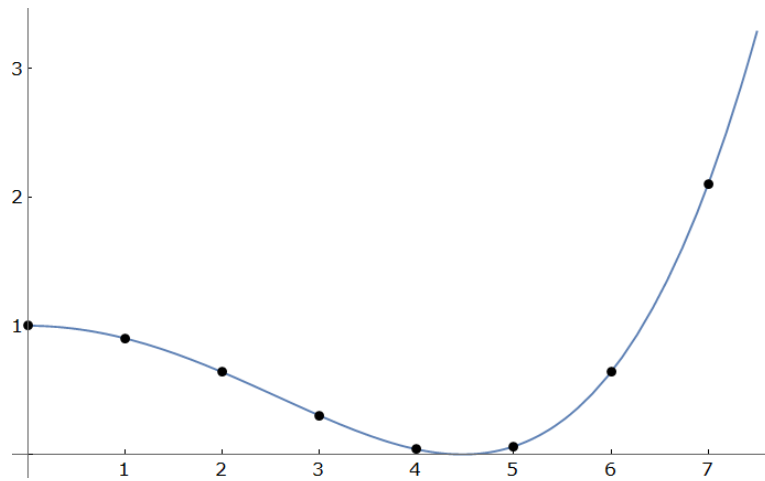


Рис. 9. Положення енергетичних рівнів у пінінгованій ямі при $\alpha = 0.05$ та $U_0 = 0, j = 0$.

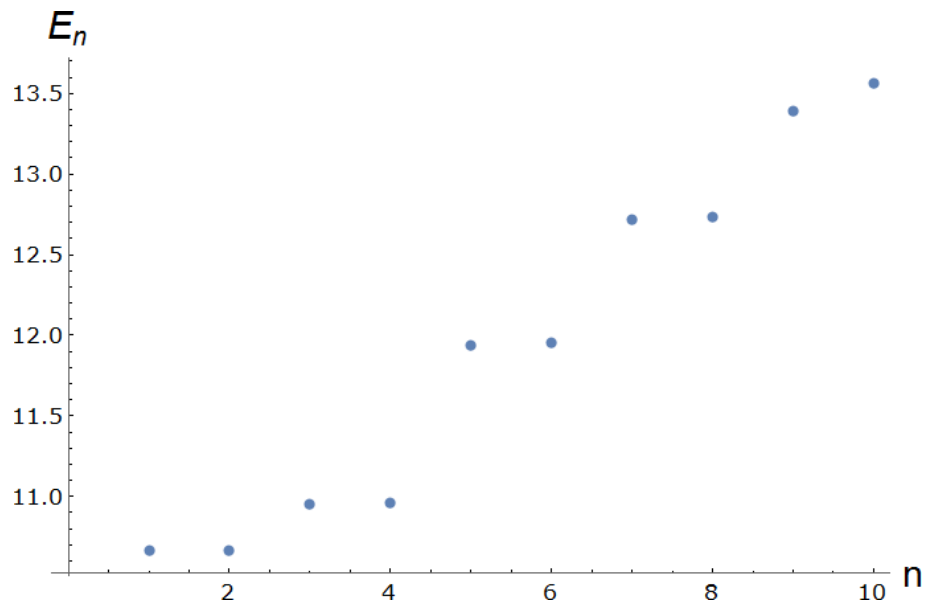


Рис. 10. Положення енергетичних рівнів у пінінгованій ямі після розщеплення. Параметри системи $\alpha = 0.05, U_0 = 10, \square = 1, j = 0$.

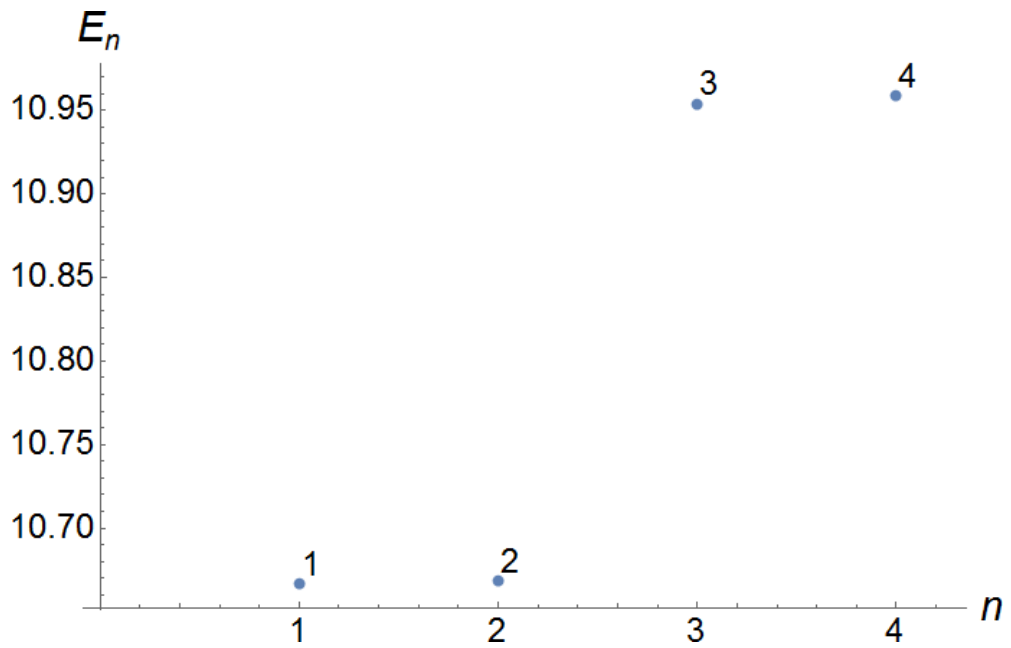


Рис. 11. Збільшене зображення чотирьох найнижчих енергетичних рівнів після розщеплення. Параметри системи $\alpha = 0.05$, $U_0 = 10$, $j = 0$.

Часова залежність струму підбирається такою, щоб збуджувати рівні резонансно, тобто це може бути струм частоти, що відповідає переходам між відповідними рівнями $j \cdot \sin(\omega_{m \rightarrow n} t)$, або періодичний струм довільного вигляду з періодом, що відповідає певній частоті. При чисельних обрахунках використовувався базис із $N_2 = 10$ розв'язків стаціонарної задачі.

Нехай спочатку система знаходиться у найнижчому рівні – 1. У наступному випадку (Рис. 12) використовувався сталий та синусоїдальний струм, спочатку для стимулювання переходу $1 \rightarrow 2$ використовується струм $j_1 = const$ з невеликою амплітудою, щоб не збуджувати рівні 3,4 (тут $j_1 = 0.001$, $\Delta E_{1-3} \approx 0.3$, тобто виконується умова $j_1 \ll \Delta E_{1-3}$). Струм діє, поки амплітуди обох мод не зрівняються, після чого вмикаються струми з частотами $1 \rightarrow 3$, $2 \rightarrow 4$ та невеликими амплітудами (тут $j_2 = 0.005$, $\Delta E_{1-3} \approx 0.3$, тобто виконується умова $j_2 \ll \Delta E_{1-3}$), а j_1 вимикається. Через певний час маємо майже рівномірне збудження усіх чотирьох рівнів після вимикання струму .

Отже, нам вдалося розподілити ймовірність між чотирма найнижчими модами системи за допомогою вмикання спін-поляризованого струму з відповідною залежністю від часу.

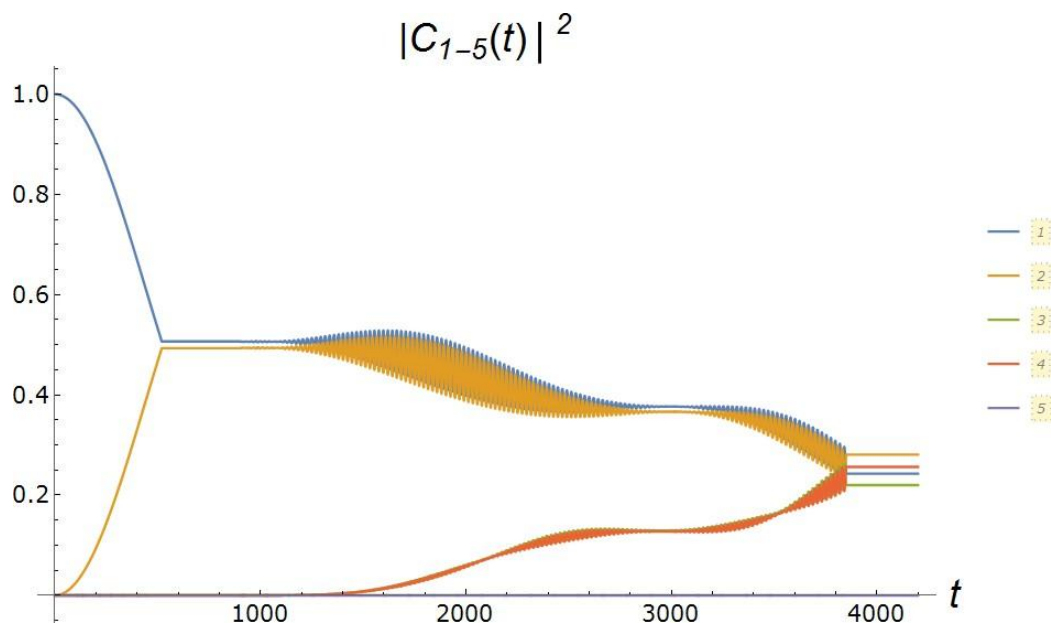


Рис. 12. Часова еволюція амплітуд п'яти найнижчих мод під дією резонансних струмів. Параметри системи $\alpha = 0.05$, $U_0 = 10$, $\square = 1$,
 $j_1(t) = const$, $j_2(t) \sim \sin(\omega_{m \rightarrow n} t)$.

4. Висновки

1. У роботі досліджено особливості квантових станів та енергетичних рівнів мезоскопічної доменної стінки в квазіодновимірному ферромагнетику за наявності двох центрів пінінгу. Показано, що потенціал пінінгу суттєво впливає на структуру спектру квантових станів стінки: регулюючи положення ям та параметри анізотропії, можна досягти режимів, коли найнижчі за енергією стани стінки утворюють ізольовану або пару, або четвірку енергетичних рівнів.
2. Показано, що за допомогою залежного від часу спін-поляризованого струму різної амплітуди можна ефективно керувати амплітудами імовірності відповідних двох/чотирьох квантових станів стінки, при цьому стани з більшими енергіями практично не збуджуються. Таким чином, показано, що мезоскопічна доменна стінка з двома центрами пінінгу може відігравати роль узагальненого «кубіта» з двома або чотирма станами в залежності від параметрів.

5. Література

- [1] Shin Takagi, Gen Tatara, Phys. Rev. B. 54, 9920 (1996).
- [2] H.B. Braun and D. Loss, Phys. Rev. B 53, 3237 (1996).
- [3] E. G. Galkina, B. A. Ivanov, Sergey Savel'ev and Franco Nori, Phys. Rev. B. 77, 134425 (2008).
- [4] І. Р. Буряк, «Керування квантовим станом хіральності мезоскопічної доменної стінки за допомогою електричного струму». Кваліфікаційна робота бакалавра, Київський Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут високих технологій (Київ, 2020).
- [5] А. В. Поліщук, «Кондуктанс мезоскопічної доменної стінки з квантовою хіральністю». Кваліфікаційна робота бакалавра, Київський Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут високих технологій (Київ, 2021).
- [6] Duine R. A. Spintronics // R. A. Duine., 2010. – 81 с. – (Lecture notes, Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, https://webspacescience.uu.nl/~duine102/RembertDuine_Spintronics.pdf).
- [7] А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский. Спиновые волны. М., «Наука», 1967, 368 с.
- [8] Код програми в Wolfram Mathematica доступний за такою URL:
bit.ly/3O40YYN