

Новая кинетическая модель Монте–Карло для исследования магнитных свойств атомных цепочек

С.В. Колесников,^{1,*} И.Н. Колесникова²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра общей физики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

(Поступила в редакцию 17.12.2025; после доработки 27.12.2025; подписана в печать 29.12.2025)

Магнитные атомные цепочки имеют потенциальные приложения в различных перспективных областях физики, таких как спинтроника, квантовые коммуникации и квантовые вычисления. Одним из возможных способов исследования магнитных свойств атомных цепочек на больших временных масштабах является кинетический метод Монте–Карло (КММК). В настоящей работе мы предлагаем новую КММК-модель, учитывающую зависимость частотных префакторов от параметров цепочки. Наши результаты показывают, что эмпирическое правило Мейера–Нелделя применимо к магнитным системам: более высокие энергетические барьеры соответствуют более высоким частотным префакторам. Используя геодезический метод упругой ленты и гармоническое приближение теории переходного состояния, мы вычислили поправки, обусловленные неколлинеарностью магнитных моментов атомов в переходном состоянии. Обсуждаются ограничения применимости предложенной КММК-модели. Показано что в общем случае зависимостью частотных префакторов от параметров атомной цепочки нельзя пренебречь.

PACS: 05.10.Ln, 75.10.Hk УДК: 537.6, 519.6

Ключевые слова: атомные цепочки, магнитные свойства, кинетический метод Монте–Карло.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.81.2610104](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.81.2610104)

1. ВВЕДЕНИЕ

После обнаружения гигантской магнитной анизотропии у атомов Со на поверхности Pt(997) [1, 2], атомные цепочки стали чрезвычайно привлекательными объектами как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Образование ферромагнитных двурядных цепочек Со было экспериментально обнаружено на поверхности Ir(001) [3]. Магнитные свойства множества других металлических цепочек были исследованы с помощью квантово-механических расчётов [4–8]. Метод создания антиферромагнитных однорядных и двухрядных атомных цепочек с помощью сканирующего тунNELьного микроскопа (СТМ) был продемонстрирован экспериментально на поверхностях CuN/Cu(001) и Cu₂N/Cu(001) [9, 10]. Магнитные свойства цепочек на поверхности Cu₃N/Cu(110) были изучены в работе [11]. Интересным способом модификации магнитных свойств атомных цепочек является окисление поверхности [12, 13]. Широко обсуждается потенциальное применение атомных цепочек в спинтронике [14], квантовых коммуникациях [15–18], квантовых вычислениях [19] и других областях [20, 21].

Теоретические подходы, используемые для исследования магнитных свойств атомных цепочек, можно разделить на четыре основные группы:

1. квантово-механические расчёты, основанные на теории функционала плотности [22, 23];
2. численное решение уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта [24, 25];
3. моделирование кинетическим методом Монте–Карло (КММК) [26];
4. различные аналитические методы [27–30].

Очень простая, но эффективная КММК-модель была предложена в статье [26]. В этой модели рассматриваются только переходы, связанные с переворотом магнитного момента одного атома, в то время как остальные магнитные моменты считаются фиксированными. Модель предполагает возможность двух типов переходов:

1. переходы между начальным и конечным состояниями, которые одновременно являются локальными минимумами магнитной энергии цепочки;
2. переходы, в которых либо начальное, либо конечное состояния соответствуют локальному максимуму энергии.

* E-mail:kolesnikov@physics.msu.ru

Для переходов первого типа были получены аналитические выражения для энергетических барьеров ΔE . При этом частотные префакторы ν_0 предполагались одинаковыми для всех переходов и выбирались равными 10^9 Гц. Частоты переходов вычислялись по классической формуле Аррениуса [31]:

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Простота КММК-модели [26] сделала её весьма привлекательной. Она была использована для численного исследования магнитных свойств различных одномерных и двумерных систем [32–34]. Кроме того, эта модель послужила основой для аналитического подхода, основанного на приближении случайного блуждания доменной стенки [27, 28, 35].

Основная цель настоящей статьи — обобщить КММК-модель [26]. Во-первых, мы включим в модель двухосную магнитокристаллическую анизотропию. Во-вторых, мы выведем простые оценки для частотных префакторов. Затем мы сравним аналитические результаты, полученные с помощью обобщенной КММК-модели, с результатами численного моделирования, чтобы оценить их точность и границы применимости нашей модели.

2. МЕТОДЫ

Магнитное взаимодействие между атомами на поверхности можно описать эффективным гамильтонианом [20, 36]:

$$H = H_{\text{ex}} + H_{\text{MAE}} + H_{\text{int}}, \quad (2)$$

где первое слагаемое H_{ex} описывает обменное взаимодействие между атомами в цепочке и имеет вид

$$H_{\text{ex}} = -J \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}), \quad (3)$$

где \mathbf{s}_i — единичные векторы магнитных моментов. Наша модель предполагает, что:

1. рассматривается обменное взаимодействие только между ближайшими соседями,
2. обменный интеграл J одинаков для всех пар ближайших соседей,
3. цепочка атомов может быть либо ферромагнитной ($J > 0$), либо антиферромагнитной ($J < 0$).

Второе слагаемое в гамильтониане (2) представляет собой энергию магнитокристаллической анизотропии (ЭМА) и может быть записано как [20]:

$$H_{\text{MAE}} = \sum_i [-K(s_i^y)^2 + E((s_i^z)^2 - (s_i^x)^2)]. \quad (4)$$

Мы считаем, что параметры K и E положительны и $K > E$. В таком случае ось y является осью легкого намагничивания, а ось z — осью трудного намагничивания.

Последнее слагаемое в гамильтониане (2) представляет собой зеemanовское взаимодействие с внешним магнитным полем \mathbf{B} :

$$H_{\text{int}} = -\mu \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}), \quad (5)$$

где μ — величина магнитного момента атома цепочки. Мы предполагаем, что магнитный момент μ одинаков для всех атомов в цепочке и его величина не зависит от направления единичного вектора \mathbf{s}_i .

В рамках теории переходного состояния (ТПС) [31, 37] частоты перемагничивания ν атомной цепочки можно оценить с помощью формулы Аррениуса (1). При этом предполагается, что энергетические барьеры ΔE не зависят от температуры [31]. Для численного определения энергетических барьеров ΔE мы используем геодезический метод упругой ленты (ГМУЛ) [37, 38].

В гармоническом приближении ТПС частотный префактор ν_0 вычисляется как [37, 39–41]:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \left[\left(\sum_{k=1}^{2N-1} \frac{(a_{\text{sp}}^k)^2}{\xi_{\text{sp}}^k} \right) \frac{\prod_{k=1}^{2N} \xi_{\text{min}}^k}{\prod_{k=1}^{2N-1} \xi_{\text{sp}}^k} \right]^{1/2}, \quad (6)$$

где ξ_{min}^k и ξ_{sp}^k — собственные значения $2N$ -мерной матрицы Гессе \mathcal{H} , вычисленные в локальном минимуме энергии и в седловой точке соответственно. Мы предполагаем, что собственные значения расположены в порядке убывания: $\xi_{\text{min}}^1 \geq \xi_{\text{min}}^2 \geq \dots \geq \xi_{\text{min}}^{2N} > 0$ и $\xi_{\text{sp}}^1 \geq \xi_{\text{sp}}^2 \geq \dots \geq \xi_{\text{sp}}^{2N-1} > 0$, при этом $\xi_{\text{sp}}^{2N} < 0$. Коэффициенты a_{sp}^k в формуле (6) вычисляются как [37]:

$$a_{\text{sp}}^k = \frac{\gamma}{\mu} (e_{\text{sp}}^{2N} [s_{\text{sp}} \times e_{\text{sp}}^k]), \quad (7)$$

где e_{sp}^k — собственные векторы матрицы Гессе в седловой точке, $s_{\text{sp}} = (\mathbf{s}_{\text{sp},1}, \dots, \mathbf{s}_{\text{sp},N})$, а $\gamma = g\mu_B/\hbar$ — гиromагнитное отношение. Подчеркнем, что мы рассматриваем атомные цепочки конечной длины в присутствии двухосной магнитокристаллической анизотропии (4). В этом случае гамильтониан (2) не инвариантен ни относительно трансляций, ни относительно вращений, и все собственные значения ξ_{min}^k и ξ_{sp}^k матрицы Гессе \mathcal{H} отличны от нуля.

Кратко обсудим пределы применимости описанного выше подхода.

Во-первых, при низких температурах становятся существенными эффекты квантового туннелирования [31, 42]. Однако при температурах выше примерно 1 К этими эффектами, как правило, можно пренебречь [33, 43], что позволяет использовать классические векторы \mathbf{s}_i вместо квантовых операторов.

Во-вторых, мы предполагаем, что атомные цепочки находятся в упорядоченной фазе — либо ферромагнитной, либо антиферромагнитной. Следовательно, температура должна быть ниже критической температуры T_c цепочки. Критическая температура для атомных цепочек обычно лежит в диапазоне нескольких десятков градусов Кельвина [1, 10].

Подчеркнем, что расчет критической температуры атомных цепочек выходит за рамки нашей статьи.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В этом разделе мы сначала обобщим метод КММК, предложенный ранее в статье [26]. Затем мы сравним аналитические результаты с результатами численных расчётов, выполненных в рамках методов ГМУЛ и ТПС.

3.1. Теоретические оценки

В статье [26] рассматривались переходы, связанные с переворотом одного магнитного момента. При этом, были рассмотрены переходы двух типов [26]: (1) переходы, при которых как начальное, так и конечное состояния являются локальными минимумами энергии, и (2) переходы, при которых либо начальное, либо конечное состояние является локальным максимумом энергии. Важно подчеркнуть, что рассмотрение переходов второго типа несовместимо с ТПС. Чтобы гарантировать, что при переворотах магнитного момента происходят только переходы первого типа, ширина доменной стенки должна быть мала по сравнению с межатомным расстоянием.

Ширину доменной стенки можно оценить как [44]:

$$\delta N = \sqrt{\frac{|J|}{2(K - E)}}.$$

Из условия $\delta N \ll 1$ получаем ограничение на параметры модели:

$$|J| \ll (K - E). \quad (8)$$

Это условие выполняется во многих системах атомных цепочек, таких как Fe/Cu₂N/Cu(001) [10] и MnO₂/Ir(001) [12]. Если условие (8) не выполняется, следует рассматривать перевороты групп магнитных моментов [45], а не отдельных моментов. В настоящей работе мы предполагаем, что условие (8) выполняется.

Следуя работе [26], предположим, что внешнее магнитное поле направлено вдоль оси легкого намагничивания, т.е. $\mathbf{B} = (0, B, 0)$. Кроме того, предположим, что все магнитные моменты, за исключением одного с индексом i_0 , ориентированы вдоль

оси легкого намагничивания: $\mathbf{s}_{i \neq i_0} = (0, s_i^y, 0)$, где $s_i^y = \pm 1$. Магнитный момент с индексом i_0 ориентирован произвольно: $\mathbf{s}_{i_0} = (\tilde{s}_{i_0}^x, \tilde{s}_{i_0}^y, \tilde{s}_{i_0}^z)$. Тогда вклад в магнитную энергию атомной цепочки, связанный с ориентацией магнитного момента i_0 , равен

$$E(\mathbf{s}_{i_0}) = -K(\tilde{s}_{i_0}^y)^2 + E[(\tilde{s}_{i_0}^z)^2 - (\tilde{s}_{i_0}^x)^2] - [\mu B + J(s_{i_0+1}^y + s_{i_0-1}^y)] \tilde{s}_{i_0}^y. \quad (9)$$

Легко найти локальные минимумы и седловую точку энергии (9). Локальные минимумы соответствуют единичным векторам $\mathbf{s}_{i_0}^{\min} = (0, s_{i_0}^y, 0)$, где $s_{i_0}^y = \pm 1$. Энергия в этих минимумах равна $E(\mathbf{s}_{i_0}^{\min}) = -K - h_{i_0}$, где

$$h_{i_0} = [\mu B + J(s_{i_0+1}^y + s_{i_0-1}^y)] s_{i_0}^y. \quad (10)$$

Собственные векторы и собственные значения гессиана \mathcal{H} в этих минимумах равны $\mathbf{e}_{\min}^1 = (0, 0, 1)$, $\xi_{\min}^1 = 2(K + E) + h_{i_0}$ и $\mathbf{e}_{\min}^2 = (1, 0, 0)$, $\xi_{\min}^2 = 2(K - E) + h_{i_0}$. Седловая точка соответствует единичному вектору $\mathbf{s}_{i_0}^{\text{sp}} = (\sqrt{1 - \eta^2}, \eta, 0)$, где $\eta = -\frac{\mu B + J(s_{i_0+1}^y + s_{i_0-1}^y)}{2(K - E)}$. Обратите внимание, что седловая точка существует лишь при условии $2(K - E) > |h_{i_0}|$, которое мы предполагаем выполненным. Энергия в седловой точке равна $E(\mathbf{s}_{i_0}^{\text{sp}}) = -E + \frac{h_{i_0}^2}{4(K - E)}$. Собственные векторы и собственные значения гессиана \mathcal{H} в седловой точке равны $\mathbf{e}_{\text{sp}}^1 = (0, 0, 1)$, $\xi_{\text{sp}}^1 = 4E$ и $\mathbf{e}_{\text{sp}}^2 = (\eta, -\sqrt{1 - \eta^2}, 1)$, $\xi_{\text{sp}}^2 = -2(K - E) + \frac{h_{i_0}^2}{2(K - E)} < 0$. Тогда энергетический барьер для переворота магнитного момента равен

$$\Delta E = E(\mathbf{s}_{i_0}^{\text{sp}}) - E(\mathbf{s}_{i_0}^{\min}) = \frac{[2(K - E) + h_{i_0}]^2}{4(K - E)}. \quad (11)$$

А частотный префактор, согласно формуле (6), равен

$$\nu_0 = \frac{\gamma}{\pi \mu} \sqrt{\left(K + \frac{h_{i_0}}{2}\right)^2 - E^2}. \quad (12)$$

Формулы (11) и (12) обобщают простую КММК-модель, предложенную в статье [26].

3.2. Численные результаты

Для оценки точности выражений (11) и (12) рассмотрим короткую цепочку, состоящую из 10 атомов. Атомная цепочка может быть как ферромагнитной, так и антиферромагнитной. Различные низкоэнергетические магнитные конфигурации атомной цепочки представлены в таблице. Состояние 0 соответствует основному состоянию цепочки. В состояниях 1–5 атомная цепочка имеет одну доменную стенку. Очевидно, что конфигурации с двумя или большим числом доменных стенок обладают более высокой энергией, что делает их маловероятными при низких температурах.

Таблица . Низкоэнергетические магнитные состояния ферромагнитной ($J > 0$) и антиферромагнитной ($J < 0$) цепочек, состоящих из 10 атомов. Направления магнитных моментов по и против оси легкого намагничивания y условно показаны стрелочками вверх и вниз

Состояние	$J > 0$	$J < 0$
0	↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑	↑↓↑↓↑↓↑↓↑↓
1	↓↑↑↑↑↑↑↑↑↑	↓↓↑↑↓↑↓↑↓↑
2	↓↓↑↑↑↑↑↑↑↑	↓↑↑↓↓↑↑↓↑↓
3	↓↓↓↑↑↑↑↑↑↑↑	↓↑↓↑↑↓↑↓↑↓
4	↓↓↓↓↑↑↑↑↑↑↑↑	↓↑↓↑↓↑↓↑↓↑
5	↓↓↓↓↓↑↑↑↑↑↑↑	↓↑↓↑↓↓↑↑↓↑↓

Для численных расчетов были выбраны следующие параметры гамильтониана (2): $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$. Эти значения согласуются с типичными энергетическими масштабами, наблюдаемыми во многих физических системах [10, 12, 46].

3.2.1. Случай $\mathbf{B} = 0$

Сначала рассмотрим случай отсутствия внешнего магнитного поля. В формулах (11) и (12) величина h_{i_0} равна $|J|$ для перехода из состояния 0 в 1, $-|J|$ для перехода из состояния 1 в 0 и $h_{i_0} = 0$ для перехода из состояния 1 в состояние 2 и всех других подобных переходов. Теоретическая зависимость энергетического барьера ΔE^{theory} от величины обменного интеграла $|J|$ показана на рис. 1, а. Видно, что барьер для образования доменной стенки на краю цепочки (переход из 0 в 1) монотонно возрастает с ростом $|J|$. Барьер для исчезновения доменной стенки (переход из 1 в 0) монотонно уменьшается с ростом $|J|$. А барьер для движения доменной стенки внутри цепочки не зависит от $|J|$, он равен $K - E$.

Более точные численные расчеты были выполнены методом ГМУЛ [37, 38]. Учет эффектов неколлинеарности магнитных моментов приводит к уменьшению энергетических барьеров, поэтому разность $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ всегда положительна. Эта разность не зависит от направления перехода, т.е. одинакова для переходов из i в j и из j в i . Её зависимость от модуля обменного интеграла $|J|$ показана на рис. 1, б. Отметим несколько важных особенностей:

1. зависимость одинакова для ферромагнитных ($J > 0$) и антиферромагнитных ($J < 0$) атомных цепочек;
2. разность $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ мала, при условии (8);
3. если условие (8) не выполняется, то энергетические барьеры для переходов из 0 в 1 и из 1 в 2 могут значительно отличаться от значений, полученных по формуле (11);

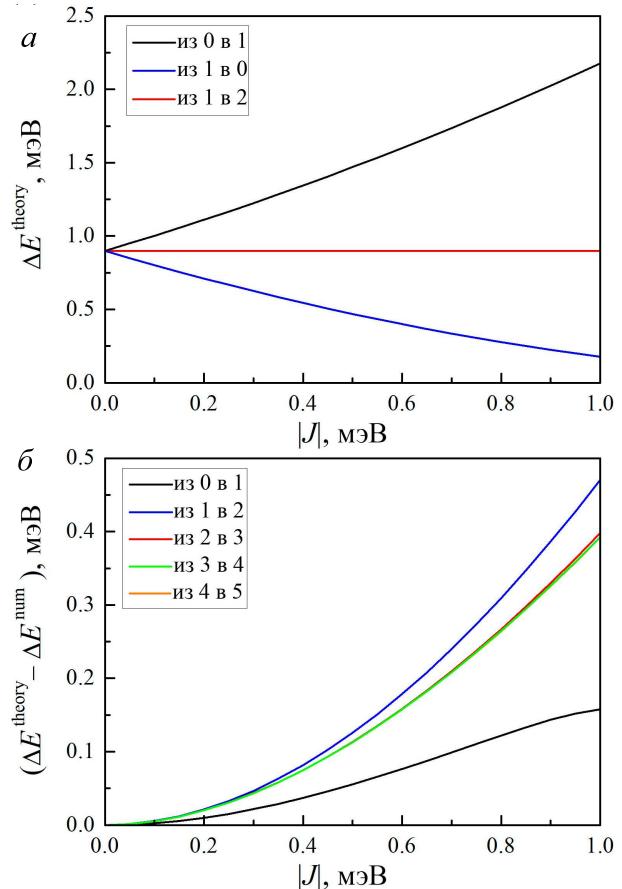


Рис. 1. а — Зависимость энергетических барьеров, рассчитанных по формуле (11) от величины $|J|$. б — Зависимость разности $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ от величины $|J|$. Расчеты выполнены для следующих параметров: $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ

4. энергетические барьеры для переходов из 2 в 3, из 3 в 4 и из 4 в 5 незначительно отличаются друг от друга.

Зависимость частотных префакторов, рассчитанных по формуле (12), от величины $|J|$ показана на рис. 2, а. Как и в случае энергетических барьеров, частотный префактор, связанный с образованием доменной стенки (переход из 0 в 1), монотонно возрастает с ростом $|J|$. Префактор, соответствующий исчезновению доменной стенки (переход из 1 в 0), монотонно убывает с ростом $|J|$. А префактор для движения доменной стенки внутри атомной цепочки остается постоянным, он равен $\frac{\gamma}{\pi\mu}\sqrt{K^2 - E^2}$. Отметим, что полученные аналитические зависимости соответствуют эмпирическому правилу Мейера–Нелделя [46–48], которое гласит, что более высокие энергетические барьеры соответствуют более высоким частотным префакторам.

Более точные расчеты частотных префакторов были выполнены в рамках гармонического приближения ТПС согласно формуле (6). На рис. 2, б, в показано отношение частотного префактора ν_0^{num} , вычисленного численно, к теоретическому значению ν_0^{theory} , полученному по формуле (12). Отметим ос-

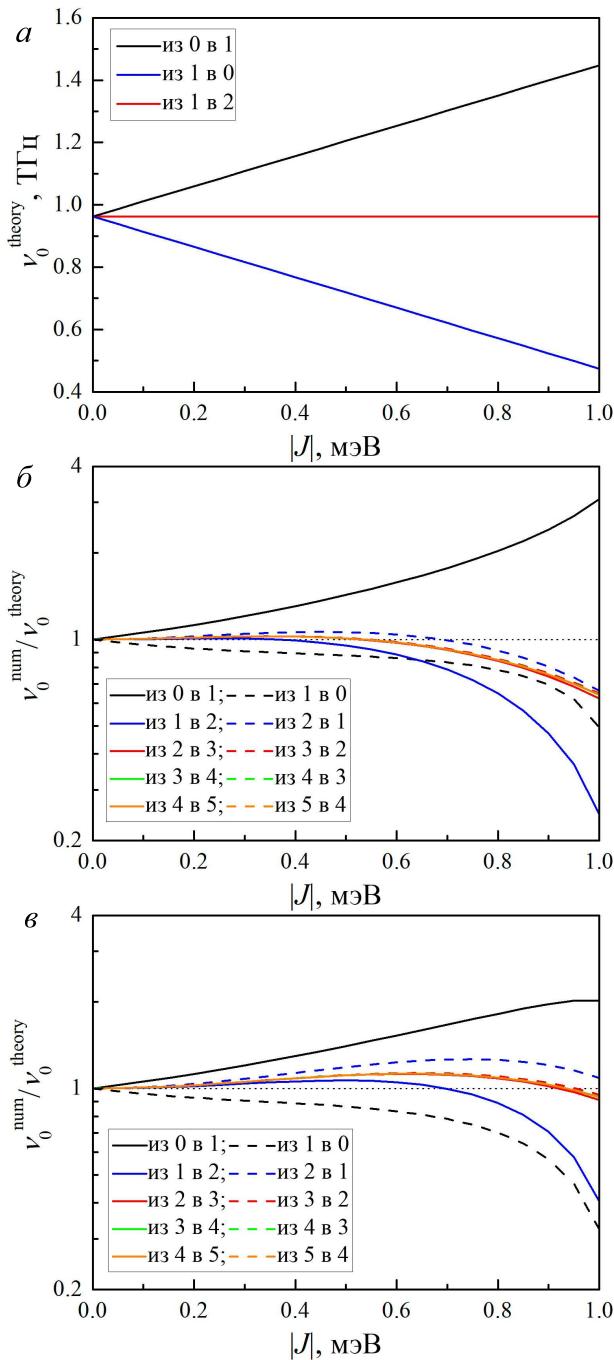


Рис. 2. а — Зависимость частотных префакторов, рассчитанных по формуле (12), от величины обменного интеграла $|J|$. б, в — Зависимость отношения $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ от $|J|$: б — для ферромагнитных атомных цепочек ($J > 0$) и в — для антиферромагнитных атомных цепочек ($J < 0$). Расчеты выполнены для следующих параметров: $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$

новные особенности этих зависимостей.

1. Отношения $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ различаются для прямых и обратных переходов.
2. Зависимости отношений $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ от величины $|J|$ немонотонны. При этом отношение $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ может быть как больше, так

и меньше 1 для одного и того же перехода при разных значениях $|J|$.

3. Полученные зависимости различаются для ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочек.
4. Отношение $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ стремится к 1, когда выполняется условие (8).
5. Если условие (8) не выполняется, то частотные префакторы ν_0^{num} могут отличаться в несколько раз от теоретических значений ν_0^{theory} . Отметим, что величины ν_0^{num} и ν_0^{theory} остаются при этом одного порядка.
6. Наконец, (6) отношения $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ для переходов из 2 в 3, из 3 в 4 и из 4 в 5 (а также для обратных им переходов) незначительно отличаются друг от друга.

3.2.2. Случай $\mathbf{B} \neq 0$

Теперь рассмотрим переходы при наличии внешнего магнитного поля, ориентированного вдоль оси легкого намагничивания $\mathbf{B} = (0, B, 0)$. Будем считать, что величина B может принимать как положительные, так и отрицательные значения в диапазоне $[-10, 10]$ Тл. Остальные параметры гамильтонiana (2) зафиксируем на следующих значениях: $|J| = 0.4$ мэВ, $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ и $\mu = 1 \mu_B$.

Теоретическая зависимость энергетического барьера ΔE^{theory} от величины магнитного поля B для ферромагнитной цепочки представлена на рис. 3, а. Переходы, связанные с движением доменной стенки вправо (например, из 0 в 1, из 1 в 2 и т.д.), соответствуют перевороту одного магнитного момента против направления магнитного поля. Энергетические барьеры для таких переходов монотонно увеличиваются с увеличением B . Барьеры для обратных переходов (например, из 1 в 0, из 2 в 1 и т.д.) уменьшаются с увеличением B . Как и в случае нулевого поля, барьеры ΔE^{theory} для переходов из 2 в 3, из 3 в 4 и из 4 в 5 совпадают с барьером для перехода из 1 в 2. Аналогично барьеры для обратных переходов из 3 в 2, из 4 в 3 и из 5 в 4 такие же, как для перехода из 2 в 1. Ситуация становится более сложной в случае антиферромагнитной атомной цепочки. При движении доменной стенки слева направо магнитные моменты переворачиваются либо против, либо по направлению магнитного поля. В результате энергетические барьеры ΔE^{theory} для антиферромагнитной цепочки соотносятся с барьерами для ферромагнитной цепочки следующим образом:

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1}^{\text{anti}} = \Delta E_{0 \rightarrow 1}^{\text{ferro}}, \quad (13)$$

$$\Delta E_{1 \rightarrow 0}^{\text{anti}} = \Delta E_{1 \rightarrow 0}^{\text{ferro}}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned}\Delta E_{1 \text{ to } 2}^{\text{anti}} &= \Delta E_{3 \text{ to } 2}^{\text{anti}} = \Delta E_{3 \text{ to } 4}^{\text{anti}} = \\ &= \Delta E_{5 \text{ to } 4}^{\text{anti}} = \Delta E_{2 \text{ to } 1}^{\text{ferro}},\end{aligned}\quad (15)$$

$$\begin{aligned}\Delta E_{2 \text{ to } 1}^{\text{anti}} &= \Delta E_{2 \text{ to } 3}^{\text{anti}} = \Delta E_{4 \text{ to } 3}^{\text{anti}} = \\ &= \Delta E_{4 \text{ to } 5}^{\text{anti}} = \Delta E_{1 \text{ to } 2}^{\text{ferro}}.\end{aligned}\quad (16)$$

Соотношения (15) и (16) показывают, что в случае антиферромагнитных цепочек энергетические барьеры для четно-нечетных переходов равны между собой. Аналогично равны между собой барьеры для нечетно-четных переходов.

На рис. 3, б, в показаны поправки к энергетическим барьерам $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$, рассчитанные методом ГМУЛ. Как отмечалось выше, эти поправки положительны, поскольку учёт неколлинеарности приводит к уменьшению энергетических барьеров. Отметим, что эти поправки симметричны относительно направления перехода, т.е. равны для переходов из i в j и из j в i . При этом зависимость $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ от магнитного поля B различается для ферромагнитных и антиферромагнитных цепочек. Для ферромагнитных цепочек эти зависимости показаны на рис. 3, б, а для антиферромагнитных цепочек — на рис. 3, в. Поправка к барьерау зависит как от параметра J , так и от величины магнитного поля B . Если J остаётся постоянным, то включение магнитного поля B может как увеличить, так и уменьшить эту поправку. Поправка к барьери уменьшается, когда магнитное поле способствует более коллинеарному расположению магнитных моментов. Наоборот, поправка увеличивается, когда поле приводит к менее коллинеарной конфигурации. Величина $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ существенно различается для переходов из 0 в 1 и из 1 в 2. В то же время поправки для переходов из 2 в 3, из 3 в 4 и из 4 в 5 мало отличаются друг от друга. Наконец, в случае антиферромагнитной цепочки магнитное поле оказывает слабое влияние на величины поправок к барьерам для переходов из 2 в 3, из 3 в 4 и из 4 в 5.

Зависимость частотных префакторов, рассчитанных по формуле (12), от величины магнитного поля B для ферромагнитной цепочки показана на рис. 4, а. Примечательно, что поведение префакторов качественно напоминает поведение соответствующих энергетических барьеров. Префакторы для переходов, связанных с движением доменной стени вправо (например, из 0 в 1, из 1 в 2 и т.д.), монотонно увеличиваются с ростом B . А префакторы для обратных переходов (из 1 в 0, из 2 в 1 и т.д.) уменьшаются с увеличением B . Как и в случае нулевого поля, аналитические зависимости (11) и (12) согласуются с эмпирическим правилом Мейера–Нелделя [46–48]: более высоким энергетическим барьерам соответствуют более высокие частотные префакторы. В случае антиферромагнитной атомной цепочки, для частотных префакторов выполняются (с точностью до переобозначения ΔE на ν_0) те же соотношения (13), (14), (15) и (16), что и для энергетических барьеров.

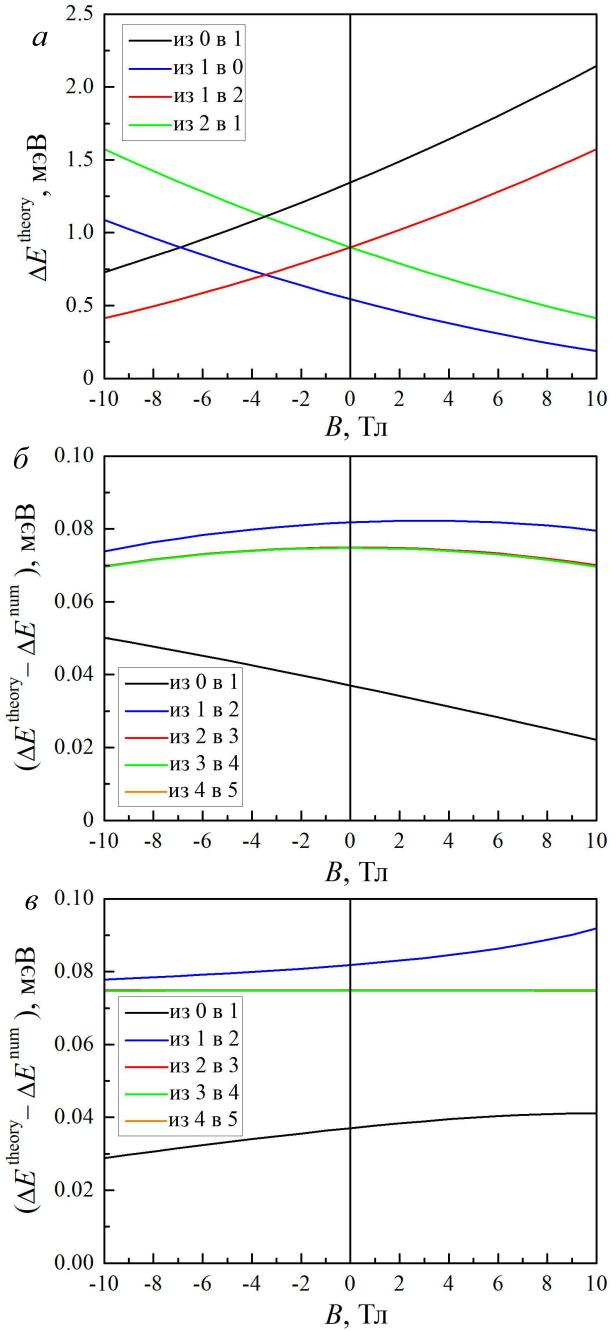


Рис. 3. а — Зависимость энергетических барьеров, рассчитанных по формуле (11), от величины магнитного поля B для ферромагнитной цепочки. б, в — Зависимость разности $\Delta E^{\text{theory}} - \Delta E^{\text{num}}$ от величины магнитного поля B для ферромагнитных (б) и антиферромагнитных (в) атомных цепочек. Расчеты выполнены для следующих параметров: $|J| = 0.4$ мэВ, $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$.

На рис. 4, б, в показаны отношения префакторов ν_0^{num} , рассчитанных численно, к теоретическим оценкам ν_0^{theory} , полученным по формуле (12). Как и в случае нулевого магнитного поля, эти отношения различаются для прямых и обратных переходов и могут быть как больше, так и меньше 1. Отношения префакторов различаются для

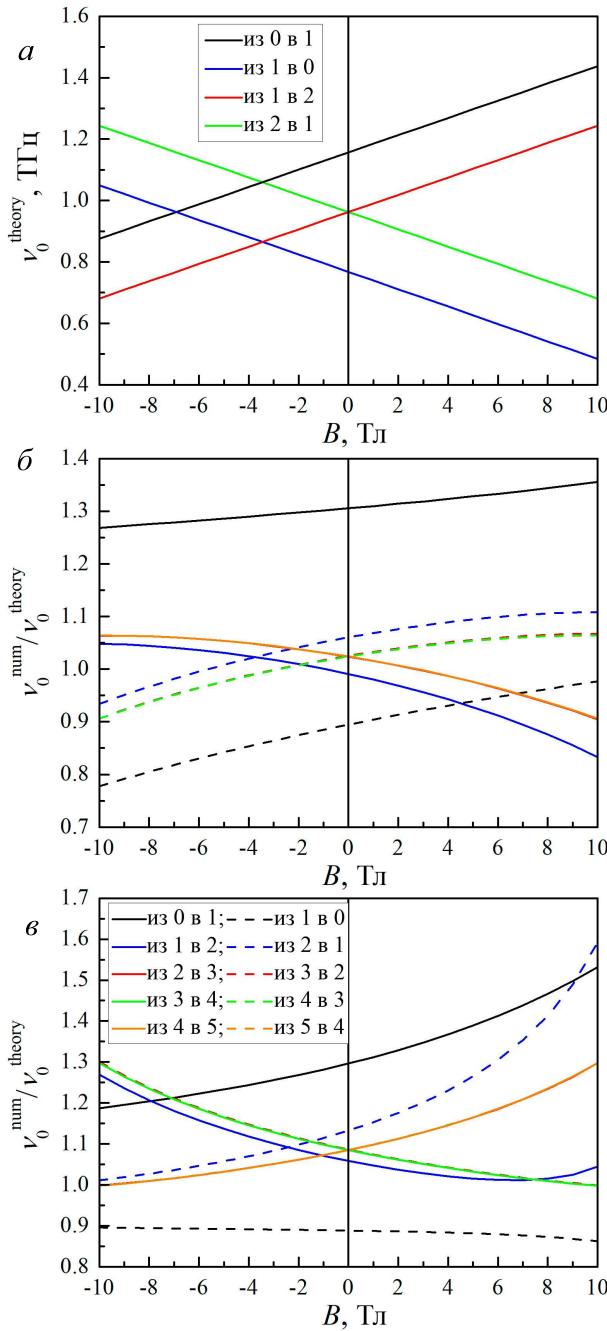


Рис. 4. *a* — Зависимость частотных префакторов, рассчитанных по формуле (12), от величины магнитного поля B . *б, в* — Зависимость отношения $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ от величины магнитного поля B : *б* — для ферромагнитных ($J > 0$) атомных цепочек и *в* — для антиферромагнитных ($J < 0$) атомных цепочек. Расчеты выполнены для следующих параметров: $|J| = 0.4$ мэВ, $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$

ферромагнитных (рис. 4, *б*) и антиферромагнитных (рис. 4, *в*) цепочек. Кроме того, величина $\nu_0^{\text{num}}/\nu_0^{\text{theory}}$ зависит как от величины обменного интеграла J , так и от магнитного поля B . Отношения префакторов существенно различаются для переходов из 0 в 1, из 1 в 0, из 1 в 2 и из 2 в 1. Остальные переходы в ферромагнитных цепочках образуют две группы с близкими отношениями: переходы

из 2 в 3, из 3 в 4, из 4 в 5 и обратные им переходы (из 3 в 2, из 4 в 3, из 5 в 4). В антиферромагнитных цепочках эти переходы группируются по другому: переходы из 2 в 3, из 4 в 3, из 4 в 5 (четно-нечетные переходы) и переходы из 3 в 2, из 3 в 4, из 5 в 4 (нечетно-четные переходы). Важно отметить, что как и в случае отсутствия внешнего магнитного поля, величины ν_0^{num} и ν_0^{theory} остаются одного порядка.

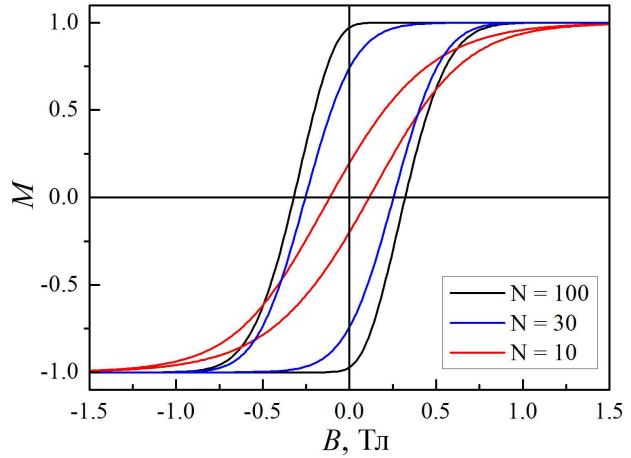


Рис. 5. Кривые намагничивания цепочек из 10, 30 и 100 атомов при температуре 3 К. Расчеты выполнены для следующих параметров: $J = 1$ мэВ, $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$. Скорость изменения магнитного поля равна $dB/dt = 130$ Тл/с

Наконец, покажем как длина атомной цепочки влияет на её магнитные свойства. На рис. 5 показаны кривые намагничивания для ферромагнитных цепочек, состоящих из 10, 30 и 100 атомов при температуре 3 К. Для расчетов выбраны следующие параметры гамильтониана (2): $J = 1$ мэВ, $K = 1$ мэВ, $E = 0.1$ мэВ, $\mu = 1 \mu_B$. Магнитное поле B сначала убывает от 5 Тл до -5 Тл со скоростью $dB/dt = 130$ Тл/с, а затем возвращается к первоначальному значению с той же скоростью. Значение скорости изменения магнитного поля выбрано таким же, как в работе [26]. Намагниченность цепочки M измеряется в относительных единицах и принимает значения от -1 до 1. Кривые намагничивания построены аналитическим методом, предложенным в работе [27], который дает результаты очень близкие к результатам КММК-моделирования. Идея метода состоит в том, что перемагничивание атомной цепочки представляется в виде последовательности следующих событий: появление доменной стенки на одном из концов цепочки, её движение вдоль цепочки и исчезновение на другом конце цепочки. Энергетические барьеры и частотные префакторы для этих событий вычисляются согласно формулам (11) и (12). Видно, что при увеличении длины цепочки изменяется наклон кривой намагничивания и увеличивается коэрцитивная сила.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы обобщили простую теоретическую модель, предложенную ранее [26]. Отметим, что формула (11) была выведена в статье [26] для случая $E = 0$, а зависимость частотных префакторов от параметров модели вообще не рассматривалась. Мы вывели формулу (12) для частотных префакторов, которая согласуется с выражением (11) для энергетических барьеров. Оказалось, что эмпирическое правило Мейера–Нелделя применимо к одномерным магнитным системам: более высоким энергетическим барьерам соответствуют более высокие частотные префакторы. Важно подчеркнуть, что частотные префакторы существенно зависят как от величины обменного интеграла J , так и от величины магнитного поля B . Этой зависимостью далеко не всегда можно пренебречь.

Используя численные методы, такие как метод ГМУЛ и гармоническое приближение ТПС, мы нашли поправки к формулам (11) и (12). Эти поправки пренебрежимо малы при выполнении

неравенств $|J| \ll (K - E)$ и $|\mu B| \ll (K - E)$. При этих условиях аналитические формулы (11) и (12) дают правильную оценку величин энергетических барьеров и частотных префакторов. Если неравенства $|J| \ll (K - E)$ и $|\mu B| \ll (K - E)$ не выполняются, то поправки необходимо учитывать. Однако при низких температурах основной вклад в зависимость скоростей переходов от параметров модели вносят энергетические барьеры. В этом случае для оценки энергетических барьеров следует использовать численные результаты, а для оценки частотных префакторов можно по-прежнему использовать аналитическую формулу (12). Отметим, что численное вычисление частотных префакторов становится необходимым при исследовании различий во времени жизни магнитных состояний в ферромагнитных и антиферромагнитных атомных цепочках.

При выполнении работы были использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ) [49, 50].

-
- [1] Gambardella P., Dallmeyer A., Maiti K. et al. // *Nature* **416**, 301 (2002).
 - [2] Gambardella P., Dallmeyer A., Maiti K. et al. // *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077203 (2004).
 - [3] Dupé B., Bickel J.E., Mokrousov Y. et al. // *New J. Phys.* **17**, 023014 (2015).
 - [4] Syromyatnikov A.G., Saletsky A.M., Klavsyuk A.L. // *J. Magn. Magn. Mater.* **510**, 166896 (2020).
 - [5] Syromyatnikov A.G., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M. et al. // *Mater. Lett.* **179**, 69 (2016).
 - [6] Hashemi H., Fischer G., Hergert W. et al. // *J. Appl. Phys.* **107**, 09E311 (2010).
 - [7] Bezerra-Neto M.M., Ribeiro M.S., Sanyal B. et al. // *Sci. Rep.* **3**, 3054 (2013).
 - [8] Tsysar K.M., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M. // *Chin. Phys. B* **24**, 097302 (2015).
 - [9] Hirjibehedin C.F., Lutz C.P., Heinrich A.J. // *Science* **312**, 1021 (2006).
 - [10] Loth S., Baumann S., Lutz C.P. et al. // *Science* **335**, 196 (2012).
 - [11] Bazhanov D.I., Stepanyuk O.V., Farberovich O.V. et al. // *Phys. Rev. B* **93**, 035444 (2016).
 - [12] Ferstl P., Hammer L., Sobel C. et al. // *Phys. Rev. Lett.* **117**, 046101 (2016).
 - [13] Korobova J.G., Nikitina I.A., Bazhanov D.I. et al. // *J. Phys. Chem. C* **124**, 26026 (2020).
 - [14] Zutic I., Fabian J., Das Sarma S. // *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
 - [15] Bose S. // *Phys. Rev. Lett.* **91**, 207901 (2003).
 - [16] Verma H., Chotorlishvili L., Berakdar J. et al. // *Europhys. Lett.* **119**, 30001 (2017).
 - [17] H. Verma H., Chotorlishvili L., Berakdar J. et al. // *Quant. Inform. Proc.* **20**, 54 (2021).
 - [18] Kaczor M., Tralle I., Jakubczyk P. et al. // *Ann. Phys.* **442**, 168918 (2022).
 - [19] Mermin N.D. // Quantum Computer Science: An Introduction. Cambridge, 2007.
 - [20] Choi D.-J., Lorente N., Wiebe J. et al. // *Rev. Mod. Phys.* **91**, 041001 (2019).
 - [21] Сыромятников А.Г., Колесников С.В., Салецкий А.М. и др. // УФН **191**, 705 (2021). (Syromyatnikov A.G., Kolesnikov S.V., Saletsky A.M. et al. // *Phys. Usp.* **64**, 671 (2021).)
 - [22] Kohn W. // *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
 - [23] Ebert H., Ködderitzsch D., Minár J. // *Rep. Prog. Phys.* **74**, 096501 (2011).
 - [24] Ландау Л.Д., Либшиц Е.М. // *Phys. Zs. Sowjet.* **8**, 153 (1935). (Landau L.D., Lifshitz E.M. // *Phys. Zs. Sowjet.* **8**, 153 (1935).)
 - [25] Tao K., Polyakov O.P., Stepanyuk V.S. // *Phys. Rev. B* **93**, 161412 (2016).
 - [26] Li Y., Liu B.-G. // *Phys. Rev. B* **73**, 174418 (2006).
 - [27] Колесников С.В. // Письма в ЖЭТФ **103**, 668 (2016). (Kolesnikov S.V. // *JETP Lett.* **103**, 588 (2016).)
 - [28] Kolesnikov S.V., Kolesnikova I.N. // *Phys. Rev. B* **100**, 224424 (2019).
 - [29] Popov A.P., Anisimov A.V., Eriksson O. et al. // *Phys. Rev. B* **81**, 054440 (2010).
 - [30] Popov A.P., Rettori A., Pini M.G. // *Phys. Rev. B* **90**, 134418 (2014).
 - [31] Hänggi P., Talkner P., Borkovec M. // *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251 (1990).
 - [32] Li J., Liu B.-G. // *J. Magn. Magn. Mater.* **378**, 186 (2015).
 - [33] Smirnov A.S., Negulyaev N.N., Hergert W. et al. // *New J. Phys.* **11**, 063004 (2009).
 - [34] Колесников С.В., Цыбарь К.М., Салецкий А.М. // *ФТТ* **57**, 1492 (2015). (Kolesnikov S.V., Tsysar K.M., Saletsky A.M. // *Phys. Solid State* **57**, 1513 (2015).)
 - [35] Колесников С.В., Колесникова И.Н. // ЖЭТФ **152**, 759 (2017). (Kolesnikov S.V., Kolesnikova I.N. // *J. Exper. Theor. Phys.* **125**, 644 (2017).)
 - [36] Schweflinghaus B., Zimmermann B., Heide M. et al.

- // Phys. Rev. B **94**, 024403 (2016).
- [37] Лобанов И.С., Поткина М.Н., Уздин В.М. // Письма в ЖЭТФ **113**, 833 (2021). (Lobanov I.S., Potkina M.N., Uzdin V.M. // JETP Lett. **113**, 801 (2021).)
- [38] Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jónsson H. // Comput. Phys. Comm. **196**, 335 (2015).
- [39] Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jónsson H. // Zeit. Phys. Chem. **227**, 1543 (2013).
- [40] Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jónsson H. // Phys. Rev. B **85**, 184409 (2012).
- [41] Bessarab P.F., Uzdin V.M., Jónsson H. // Phys. Rev. Lett. **110**, 020604 (2013).
- [42] Chudnovsky E.M., Gunther L. // Phys. Rev. Lett. **60**, 661 (1988).
- [43] Wernsdorfer W., Clérac R., Coulon C. et al. // Phys. Rev. Lett. **95**, 237203 (2005).
- [44] Kolesnikov S.V., Sapronova E.S., Kolesnikova I.N. // J. Magn. Magn. Mater. **579**, 170869 (2023).
- [45] Kolesnikov S.V., Kolesnikova I.N. // Europhys. Lett. **137**, 56003 (2022).
- [46] Kolesnikov S.V., Glazova E.S., Saletsky A.M. // J. Stat. Mech.: Theor. Exper. **2025**, 053207 (2025).
- [47] Meyer W., Neldel H. // Z. Tech. Phys. **12**, 588 (1937).
- [48] Boisvert G., Lewis L.J., Yelon A. // Phys. Rev. Lett. **75**, 469 (1995).
- [49] Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin V. et al. // Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. Boca Raton, 2013.
- [50] Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A. et al. // Supercomput. Front. Innovat. **6**, 4 (2019).

A New Kinetic Monte Carlo Model for Investigation of Magnetic Properties of Atomic Chains

S. V. Kolesnikov^{1,a}, I. N. Kolesnikova²

¹ Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

² Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

E-mail: ^akolesnikov@physics.msu.ru

Magnetic atomic chains have potential applications across various fields, including spintronics, quantum communication, and quantum computing. The kinetic Monte Carlo method is a powerful tool for investigating the magnetic properties of atomic chains over long time scales. In this paper, we extend the simple kMC model proposed by Li and Liu. The primary improvement involves accounting for the dependence of the frequency prefactors on the model parameters. Our results demonstrate that the Meyer-Neldel empirical rule applies to magnetic systems: higher energy barriers are correspond to with higher frequency prefactors. Using numerical approaches such as the geodesic nudged elastic band method and the harmonic approximation within transition state theory, we have calculated the corrections due to the non-collinearity of the magnetic moments of atoms in the transition state. The limitations of the applicability of the presented model are found and discussed. We have demonstrated that, in general, the dependence of frequency prefactors on model parameters cannot be neglected.

PACS: 05.10.Ln, 75.10.Hk

Keywords: atomic chains, magnetic properties, kinetic Monte Carlo method.

Received 17 December 2025.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2026. **81**, No. 1. Pp. .

Сведения об авторах

- Колесников Сергей Владимирович — доктор физ.-мат. наук, доцент, профессор; e-mail: kolesnikov@physics.msu.ru.
- Колесникова Инна Николаевна — канд. хим. наук, ст. преподаватель; e-mail: kolesnikova_i_n@mail.ru.