Национальный исследовательский технологический университет
“МИСиС”

На правах рукописи

КАРПОВ Петр Игоревич

ИНДУЦИРОВАННЫЕ СВЕРХСТРУКТУРЫ ЗАРЯЖЕННЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Специальность 01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Мухин Сергей Иванович

Научный консультант:
доктор физико-математических наук
Бразовский Сергей Александрович

Москва – 2017

Оглавление

Введение **6**

Список использованных сокращений **9**

1 Аналитический обзор литературы **10**

1.1 Фазовые переходы и топологические дефекты в системах со спонтанно нарушенной симметрией 11

1.1.1 Нарушение дискретной симметрии: модель Изинга 16

1.1.2 Нарушение непрерывной симметрии: XY модель 18

1.2 Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики 22

1.2.1 Феноменологическая модель магнитоэлектрического взаимодействия 24

1.2.2 Заряженные дефекты магнитной структуры 26

1.3 Квазиодномерные проводники 27

1.3.1 Дискретное вырождение – соизмеримая ВЗП 29

1.3.2 Непрерывное вырождение – несоизмеримая ВЗП 33

1.4 Тригональная фаза дисульфида тантала, $1T - TaS_2$ 34

2 Создание мультивихревых магнитных структур электрическим полем в магнитоэлектрических системах с непрерывной симметрией типа легкая плоскость **36**

2.1 Модель 38

2.2 Создание магнитных вихрей электрическим полем 44

2.2.1 Геометрия системы 44
2.2.2 Критический заряд кантилевера, необходимый для создания первой пары вихрь-антивихрь 46
2.2.3 Создание вихрей в малых образцах 48
2.3 Распределение вихрей в непрерывном приближении 49
2.3.1 Самосогласованное вычисление распределения плотности и полного числа вихрей 49
2.3.2 Полная энергия основного состояния системы 52
2.4 Температурная зависимость электрической поляризуемости . . 53
2.4.1 Низкие температуры: описание “энергетического ландшафта” случайными евклидовыми матрицами 54
2.4.2 Промежуточные температуры: вклад флуктуационных пар 59
2.5 Численное моделирование 61
2.5.1 Алгоритм вычислений 61
2.5.2 Число вихрей и критическое поле 62
2.5.3 Поляризуемость больших образцов 64
2.6 Возможности экспериментального наблюдения 66
2.6.1 Теоретические оценки для реальных материалов 67
2.6.2 Магнитная анизотропия 71
2.7 Обсуждение и выводы к главе 2. 75

3 Фазовые переходы в ансамблях солитонов, индуцированных оптической или электрической накачкой, в квазиодномерных системах с нарушением дискретной симметрии 78

3.1 Взаимодействие и фазовые переходы в ансамблях солитонов. . . 79
3.1.1 Взаимодействие между солитонами 80
3.1.2 Качественное описание фазовых переходов в ансамблях нейтральных солитонов 81

3.1.3 Эволюция системы после оптической накачки 86
3.2 Основная модель 88
3.2.1 Отображение на модель Изинга с ограничениями 88
3.2.2 Оценки, основанные на эффективной модели Изинга для нейтральной системы 91
3.3 Численное моделирование 93
3.3.1 Моделирование методом Монте-Карло 93
3.3.2 Численные результаты для 2D систем 96
3.3.3 Численные результаты для 3D систем 100
3.4 Обсуждение и выводы к главе 3. 112

4 Моделирование сетей и глобул заряженных доменных стенок, создаваемых оптической или электрической накачкой в $1T-TaS_2$ 115

4.1 Модель 116
4.2 Сверхрешетка и ее заряженные дефекты. 117
4.3 Фазовый переход порядок-беспорядок: теория среднего поля. . . 119
4.4 Численное моделирование. 122
4.4.1 Недопированная система. 122
4.4.2 Допированная система. 123
4.5 Обсуждение и выводы к главе 4. 127

Заключение 128

Приложения 132

А Приложения к главе 2 132
А.1 Энергия вихря в параллельном электрическом поле . . . 132
А.2 Термоактивированные вихревые пары 134
Б Приложения к главе 3 136
Б.1 Аналитические результаты для нейтральной системы . . 136

Б.2 Аналитические результаты для заряженной системы . . . 138

Публикации автора по теме диссертации **147**

Литература **149**

Введение

Актуальность темы

Данная диссертация посвящена изучению низкоразмерных сильно коррелированных электронных систем. Обычно они обладают нетривиальными основными состояниями, относящимися к таким классам, как сверхпроводники, антиферромагнетики, сегнетоэлектрики и мультиферроики, состояния с волнами зарядовой и спиновой плотности, пайерлсовские и моттовские диэлектрики. Спонтанно нарушенная симметрия основного состояния приводит к возможности появления различных топологических дефектов параметра порядка, таких как вихри Абрикосова в сверхпроводниках второго рода, топологические дефекты магнитной структуры (доменные стенки, вихри, скирмионы), солитоны в квазиодномерных проводниках, "несоизмеримости" (discommensurations) в волнах зарядовой плотности.

Особый интерес представляет случай электрически заряженных топологических дефектов, так как их можно создавать с помощью электрического поля или инжекции заряда, а также управлять ими, что несет в себе большой потенциал для создания новых типов памяти, отличающихся надежностью, высокой плотностью записи информации и малой диссипацией энергии при ее записи/считывании.

Чтобы успешно исследовать такие системы, необходимо, во-первых, знать свойства отдельных топологических дефектов (которые, во многих случаях, известны), а затем изучить их взаимодействие, которое может приводить к образованию сверхструктур. Ансамбли топологических дефектов подвержены фазовым переходам, которые преобразуют систему в упорядоченные

состояния (например, появление вихревых решеток, полосатых фаз и т.п.). Комбинация короткодействующего и дальнодействующего взаимодействия между дефектами приводит к образованию сложных структур, исследование которых требует применения как аналитических методов, так и численного моделирования.

Тема данной диссертации лежит на пересечении нескольких бурно развивающихся ("горячих") областей современной теоретической и экспериментальной физики конденсированных сред, таких как фазовые переходы под действием внешней накачки (pump-induced phase transition), мультиферроики, топологические фазовые переходы (в частности, переход Березинского-Костерлица-Таулесса), что делает ее особо актуальной.

Целью данной работы является изучение фазовых переходов в ансамблях заряженных топологических дефектов и установление закономерностей их агрегации в крупномасштабные структуры при низких температурах.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Теоретически показана возможность создания электрическим полем сложных управляемых мультивихревых магнитных структур в магнитоэлектрических материалах.

2. Найдено критическое поле, необходимое для создания первой пары вихрь-антивихрь в магнитоэлектрическом материале, зависимость числа индуцированных вихрей от заряда кантилевера и основной вклад в температурную зависимость поляризуемости магнитоэлектрика с мультивихревой структурой.

3. Методом численного моделирования Монте-Карло исследована эволюция индуцированных ансамблей амплитудных солитонов – аномальных квази-частиц, характерных для квазиодномерных проводников со спонтанной димеризацией основного состояния, ответственной за диэлектри-

зацию металлической фазы. Исследована агрегация солитонов в линейные и плоские пространственные структуры, происходящая через последовательность фазовых переходов.

4. Для важного случая заряженных амплитудных солитонов показано, что даже локально слабое кулоновское взаимодействие подавляет низкотемпературный фазовый переход с агрегацией солитонов в доменные стенки, сохраняя высокотемпературный переход их конфайнмента (связывания в бисолитонные пары). Агрегация заряженных солитонов приводит к образованию локальных структур типа поперечных дисков, и, в случае сильного кулоновского взаимодействия – к полной фрагментации в вигнеровскую жидкость бисолитонов или даже отдельных солитонов.

Структура диссертации

Диссертация состоит из четырех глав. В **первой главе** дан обзор современного состояния литературы и общее введение в тему диссертации. Здесь дано краткое введение в тему топологических дефектов в системах со спонтанно нарушенной симметрией, а также описаны конкретные классы материалов, являющиеся объектами исследования последующих глав (магнетоэлектрики и мультиферроики, квазиодномерные проводники, а также слоистый моттовский изолятор $1T - TaS_2$). **Вторая глава** посвящена созданию мультивихревых магнитных структур в тонкопленочных магнитоэлектрических материалах и мультиферроиках с магнитной симметрией типа “легкая плоскость” с помощью неоднородных электрических полей. В **третьей главе** исследованы фазовые переходы в ансамблях амплитудных солитонов, которые можно создавать оптической или электрической накачкой в квазиодномерных проводниках. **Четвертая глава** описывает моделирование сетей и глобул доменных стенок, наблюдающихся в оптически или электрически индуцированном “скрытом состоянии” в $1T - TaS_2$. Наконец, в **заключении** представлены главные результаты и основные выводы диссертации.

Список использованных сокращений

АСМ – атомная силовая микроскопия

ВА – вихрь-антивихрь

ВЗП – волна зарядовой плотности

КВ – кулоновское взаимодействие

МК – Монте-Карло

СТМ – сканирующая туннельная микроскопия

СТС – сканирующая туннельная спектроскопия

Глава 1

Аналитический обзор литературы

Новой тенденцией в управлении коллективными состояниями в электронных системах является применение либо очень коротких мощных оптических импульсов (длительностью десятков фемтосекунд) или “электростатическое легирование” – применение очень сильных электрических полей (до 10^7 В/см), см. [1, 2, 3, 4]. Эти воздействия приводят к очень высокой концентрации возбуждений (до 10% от узлов решетки). Такие возбужденные состояния могут существенно отличаться от ансамблей электронов и дырок (создаваемых, например, при оптической накачке или инжекции зарядов в обычных полупроводниках) и включают в себя сверхпроводимость, антиферромагнетизм, сегнетоэлектричество, зарядовое упорядочение, волны зарядовой и спиновой плотности, моттовские и пайерлсовские диэлектрики. Причина этого состоит в том, что в сильно коррелированных электронных системах возможны различные типы нарушения симметрии, благодаря чему основное состояние может стать вырожденным. Подобное вырождение приводит к существованию топологически нетривиальных конфигураций, непрерывно связывающих разные основные состояния. Наиболее известными из таких конфигураций являются доменные стенки, полосы, вихревые линии, дислокации, амплитудные и фазовые солитоны. Исследованию ансамблей таких топологически нетривиальных объектов и посвящена эта диссертация.

В данной главе представлено общее введение в тему диссертации и дан обзор современного состояния литературы. Эта вводная глава имеет следующую структуру. Во вводном разделе 1.1 дано описание фазовых переходов, порождающих спонтанное нарушение симметрии, и рассмотрена физика топологических дефектов, которые играют важную роль в системах с вырожденным основным состоянием. Оставшиеся разделы данной главы являются более специализированными и посвящены конкретным системам, которые будут подробно изучены в дальнейших главах. В разделе 1.2 рассмотрены магнитоэлектрические материалы и мультиферроики, которые являются предметом исследования главы 2. Раздел 1.3 посвящен квазиодномерным проводникам, которые будут подробно изучены в главе 3. Наконец, в разделе 1.4 дан обзор тригональной фазы дисульфида тантала – основного действующего лица главы 4. Во всех вышеуказанных системах мы будем исследовать ансамбли индуцированных электрически заряженных топологических дефектов, таких как вихри и антивихри, амплитудные солитоны и доменные стенки.

1.1 Фазовые переходы и топологические дефекты в системах со спонтанно нарушенной симметрией

Концепция спонтанного нарушения симметрии зародилась на стыке физики конденсированных сред и физики высоких энергий. Первые идеи восходят к работам Ландау по теории фазовых переходов II рода [5], развитым позднее в феноменологическую теорию Гинзбурга-Ландау для неоднородного параметра порядка, применительно к сверхпроводимости [6]. Важной вехой стал выход за рамки феноменологической теории и предсказание квантования, связанного со спонтанно нарушенной непрерывной симметрией, а именно сузествование безмассовых Намбу-Голдстоуновских бозонов. Эта идея была предложена Намбу в контексте механизма сверхпроводимости Бардина-

Купера-Шриффера [7], и затем развита Голдстуном применительно к квантовой теории поля [8]. Концепцию спонтанного нарушения симметрии легче всего понять на примере из физики твердого тела – гейзенберговского ферромагнетика: несмотря на то, что все направления в пространстве равноправны (то есть гамильтониан инвариантен по отношению к группе вращений), ферромагнетик выбирает случайную ось намагничивания (то есть, в основном состоянии симметрия по отношению к вращениям спонтанно нарушена).

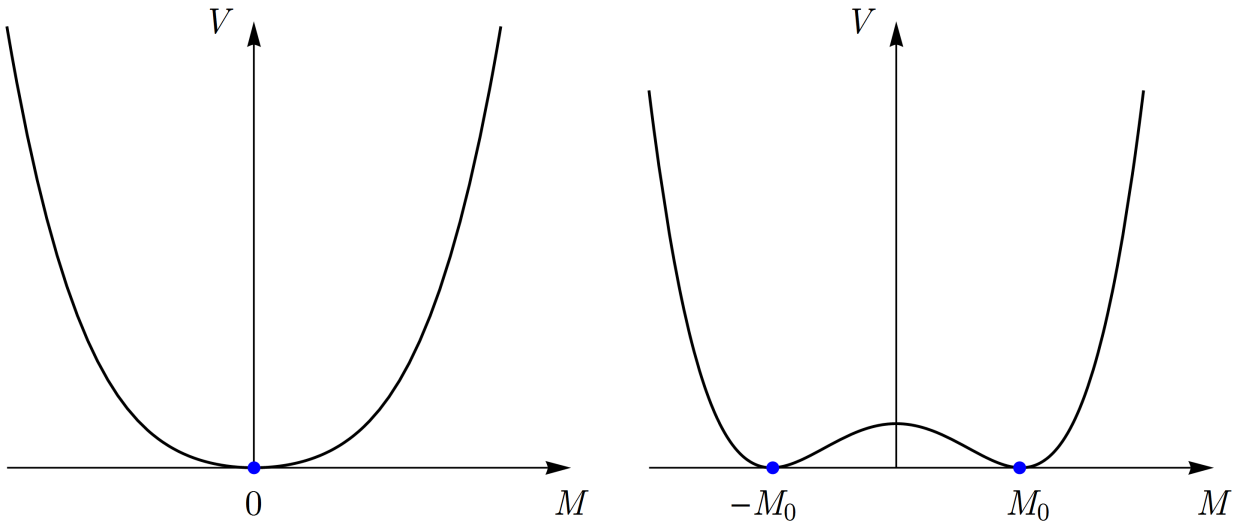
В духе теорий Ландау и Гинзбурга-Ландау рассмотрим поле $M(\mathbf{r})$ (параметр порядка) в пространстве произвольной размерности $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^D$, пространственное распределение которого определяет конфигурационную ("потенциальную") энергию системы $V(M)$. Приведем несколько примеров. В простейшей модели классической частицы, находящейся во внешнем поле, $V(M)$ – её потенциальная энергия, зависящая от координаты M. В теории поля и физике высоких энергий $V(M)$ – "потенциальная" (то есть не содержащая пространственно-временных производных) часть лагранжиана системы, M – рассматриваемое поле. Аналогично, в физике конденсированных сред $V(M)$ – потенциальная часть свободной энергии системы, M – соответствующий параметр порядка.

Сначала, для простоты, будем считать, что параметр порядка является постоянным во всем пространстве $M(\mathbf{r}) \equiv M$ (что соответствует теории Ландау в ее классическом варианте [5]; обобщение на случай неоднородного параметра порядка будет рассмотрено ниже). Типичным, хотя и не единственно возможным, является случай, когда энергия системы не меняется из-за преобразования $M \to -M$ (как, например, для случая магнетика в отсутствии внешнего магнитного поля), в этом случае "потенциальная энергия" в двух наинизших порядках по M может быть записана как

$$V(M) = AM^2 + BM^4, \tag{1.1}$$

где A и B – некоторые коэффициенты. Важно, является ли параметр по-

рядка однокомпонентным (что приводит к нарушению дискретной симметрии, в этом случае низкоэнергетические возбуждения системы имеют щель в спектре) или многокомпонентным (что приводит к нарушению непрерывной симметрии и тогда низкоэнергетические возбуждения являются "мягкими модами", то есть не имеют щели). Мы рассмотрим два наиболее простых случая: когда параметр порядка – скаляр M или же двумерный вектор $\mathbf{M} = (M_1, M_2)$.



(a) $T > T_c$ (b) $T < T_c$

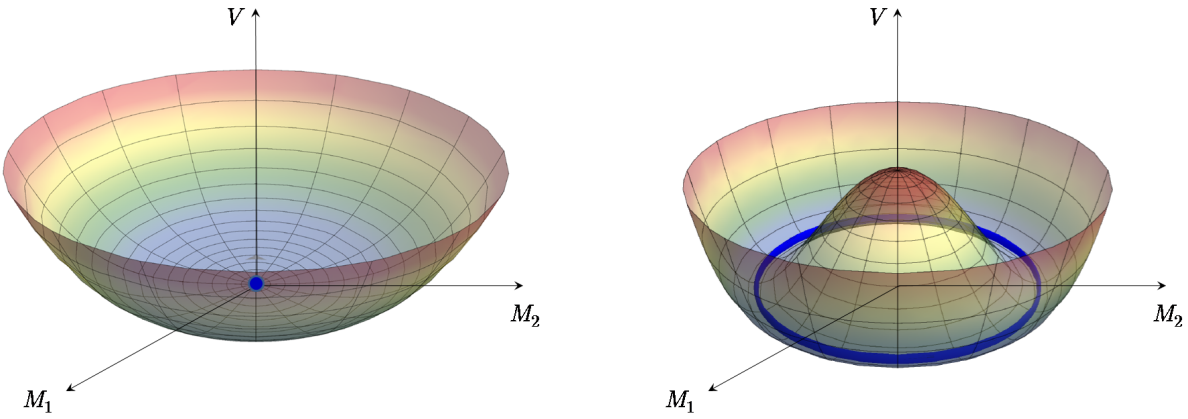
Рис. 1.1: "Потенциальная" энергия $V(M)$; жирными синими точками показаны значения M, соответствующие основным состояниям. (a) Высокотемпературная фаза, $T > T_c$, основное состояние сохраняет симметрию потенциала $M \to -M$. (b) Низкотемпературная фаза, $T < T_c$, в каждом из двух основных состояний симметрия нарушена.

1. Рассмотрим сначала случай однокомпонентного параметра порядка. Согласно теории Ландау фазовых переходов II рода, вблизи критической температуры T_c, коэффициент A можно представить как:

$$A(T) = \alpha \cdot (T - T_c). \tag{1.2}$$

При $T > T_c$ имеем $A > 0$, а при $T < T_c$ – наоборот $A < 0$. Потенциальная функция $V(M)$ при $T > T_c$ показана на рис. 1.1a, при $T < T_c$ – на рис. 1.1b. Мы видим, что $V(M)$ симметрична по отношению к изменению знака

параметра порядка $M \to -M$ как в высокотемпературном пределе, так и в низкотемпературном. В последнем случае имеется два отличных от нуля значения параметра порядка $M = \pm M_0 \equiv \sqrt{|A|/2B}$, соответствующих двум основным состояния системы, каждое из которых в отдельности не обладает симметрией $M \to -M$. При охлаждении система случайным образом выбирает один из этих минимумов $V(M)$ и происходит спонтанное нарушение симметрии.



(a) (b)

Рис. 1.2: "Потенциальная" энергия $V(M_1, M_2)$ в случае двухкомпонентного параметра порядка; основные состояния выделены синим цветом. (a) Высокотемпературная фаза, $T > T_c$: одно симметричное основное состояние. (b) Низкотемпературная фаза, $T < T_c$: бесконечное множество основных состояний, непрерывно связанных друг с другом.

2. Теперь рассмотрим случай двухкомпонентного параметра порядка $\mathbf{M} = (M_1, M_2)$. Вид потенциальной функции (1.1) не претерпевает никаких изменений, но под M теперь понимается $|\mathbf{M}|$. Характер температурной зависимости параметра A (1.2) также остается неизменным. Потенциальная функция $V(M)$ при $T > T_c$ показана на рис. 1.2a, при $T < T_c$ – на рис. 1.2b. В отличии от случая дискретной симметрии, непрерывно меняя параметр порядка можно переходить из одного основного состояния в другое.

Рассмотрим обобщение на случай неоднородного в пространстве параметра порядка [6] (с соответствующим вкладом в плотность свободной энергии

$\sim (\nabla M)^2$). Теперь параметр порядка может варьироваться от точки к точке, и для систем с непрерывной симметрией это имеет важное последствие – теорему Мермина-Вагнера [9]. Она гласит, что для таких систем в пространстве размерности $D \leq 2$ не может существовать дальнего порядка, то есть корреляционная функция стремится к нулю $\langle \mathbf{M}(\mathbf{r}_1)\mathbf{M}(\mathbf{r}_2)\rangle \to 0$, при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \to \infty$ при любой отличной от нуля температуре. При низких температурах локально система может выглядеть так, будто она находится в основном состоянии, и коррелятор мало отличается от M_0^2, но длинноволновые флуктуации (или по-другому "мягкие" или голдстоуновские моды) подавляют дальний порядок.

Помимо решений, соответствующих состояниям системы вблизи одного из вакуумных состояний, существуют, так называемые, топологические решения, которые непрерывно соединяют различные основных состояния при изменении пространственной координаты. Такие решения, в зависимости от контекста, называют солитонами, топологическими дефектами, доменными стенками. Чтобы "разгладить" такое топологическое решение в основное состояние, необходимо изменить параметр порядка в области пропорциональной размеру самой системы.

В следующих двух подразделах мы рассмотрим два примера: модели Изинга со спонтанным нарушением дискретной симметрии и XY модели со спонтанным нарушением непрерывной симметрии. Фазовые переходы в этих моделях можно рассматривать с точки зрения деконфайнмента или диссоциации топологических дефектов [10]. Более подробное обсуждение спонтанного нарушения симметрии в применении к статистическим моделям можно найти в [11].

1.1.1 Нарушение дискретной симметрии: модель Изинга

Гамильтониан классической модели Изинга в отсутствие магнитного поля имеет вид

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i \tag{1.3}$$

Суммирование ведется по всем ближайшим соседям.

1D случай

Одномерный случай был точно решен Эрнстом Изингом в 1925 году [12] (история модели Изинга подробно описана в [13]). Здесь мы коротко приведем основные результаты. Рассмотрим случай $h = 0$, с N узлами при открытых граничных условиях. В этом случае несложно точно вычислить статсумму [14]:

$$Z(T) = 2^N \left[\cosh(J/T)\right]^{N-1}. \tag{1.4}$$

Отсюда можно найти свободную энергию, приходящуюся на один спин

$$f(T) = -T \ln\left[2\cosh(J/T)\right]. \tag{1.5}$$

При $T \neq 0$ свободная энергия является аналитичной функцией, а значит при ненулевых температурах в системе нет фазового перехода. Тепловые флуктуации при $T \neq 0$ создают ненулевую концентрацию перевернутых спинов. Представим себе такой перевернутый спин как пару доменных стенок – кинков. Так как энергия не зависит от расстояния между кинками, то они свободно “диссоциируют”, то есть расходятся сколь угодно далеко и разрушают дальний порядок.

На основе того, что в одномерном случае нет фазового перехода, Изинга сделал вывод, что и в высших размерностях его тоже нет.

2D случай

Однако, вскоре стало ясно что это не так. В 1936 году Рудольф Пайерлс показал, что в двумерной модели Изинга должен быть фазовый переход [15]. Здесь мы приведем слегка модернизированный вариант этого рассуждения [10, 11], в духе аргумента Костерлица и Таулесса, который мы рассмотрим в следующем подразделе.

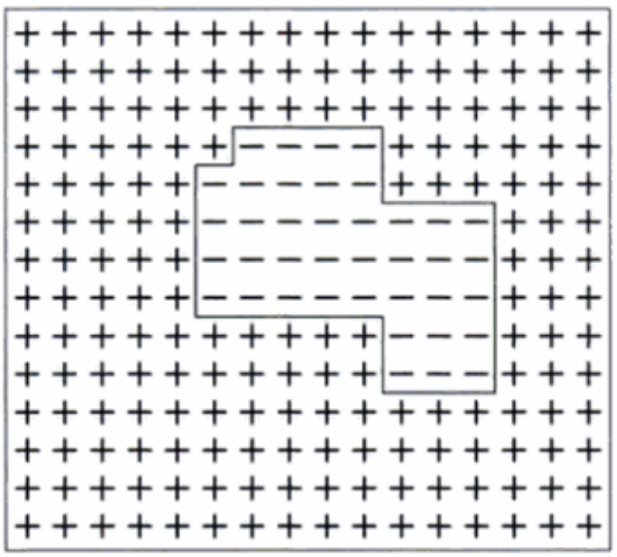


Рис. 1.3: Островок перевернутых спинов. Рисунок взят из монографии [10].

Рассмотрим низкотемпературные возбуждения упорядоченного состояния – связные островки перевернутых спинов (рис. 1.3). При возрастании температуры, увеличивается как их количество, так и средний размер. Оценим T_c как температуру, при которой становится энергетически выгодным появление островков сколь угодно большого размера, то есть когда их свободная энергия становится отрицательной. Энергия такого островка с периметром P равна $2JP$. Его энтропия равна логарифму числа замкнутых петель длины P без самопересечений, $C(P)$. Можно грубо оценить $C(P)$, если не учитывать ограничения, накладываемые отсутствием самопересечений и обязательностью возврата петли в исходную точку, как $C(P) \simeq 3^P$. Более тщательный анализ дает асимптотическую формулу $C(P) \simeq (2.639)^P$ [16]. Таким образом,

получим свободную энергию кластера с периметром P:

$$F = E - TS = 2JP - T \ln C(P) \simeq [2J - T \ln(2.639)]\, P \tag{1.6}$$

Появление кластеров сколь угодно больших размеров становится выгодным, при $T > T_c$, где

$$T_c \approx \frac{2J}{\ln(2.639)} \approx 2.06J. \tag{1.7}$$

Вскоре Крамерс и Ваннье вывели соотношения самодуальности для модели Изинга на квадратной решетке, откуда они смогли получить точное значение критической температуры [17]:

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27J. \tag{1.8}$$

Мы видим, что грубая оценка (1.7) достаточно неплохо согласуется с точным выражением (1.8).

В 1944 году Ларс Онзагер получил выражение для свободной энергии [18], и через несколько лет предъявил без доказательства выражение для намагниченности анизотропной модели Изинга [19]:

$$m(T, J_\perp, J_{||}) = \left[1 - \left(\sinh \frac{2J_\perp}{T} \sinh \frac{2J_{||}}{T}\right)^{-2}\right]^{1/8}. \tag{1.9}$$

1.1.2 Нарушение непрерывной симметрии: XY модель

Теперь рассмотрим подробнее случай непрерывного нарушения симметрии на примере классической двумерной XY модели. В ней особую роль играют вихревые возбуждения, которые приводят к фазовому переходу Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ). XY модель находит широкое применение: от двумерных магнетиков, до сверхпроводников и жидкого гелия.

XY модель на квадратной решетке описывает систему классических спинов, каждый из которых ограничен в плоскости xy: $\mathbf{S}_i = (\cos\phi_i, \sin\phi_i)$ – спин

на i-м узле. Гамильтониан системы:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -JS^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \tag{1.10}$$

Здесь $\langle i, j \rangle$ означает суммирование по всем ближайшим соседям, а также предполагается, что обменный интеграл $J > 0$. Переходя к непрерывному пределу $\phi_i \to \phi(\mathbf{x})$, получим

$$H = \frac{1}{2} \rho_s \int d^2x (\nabla \phi)^2, \tag{1.11}$$

где $\rho_s = JS^2$ – спиновая жесткость; постоянный член мы опустили.

Варьируя (1.11) по ϕ, получим уравнение на экстремальные решения:

$$\Delta \phi = 0. \tag{1.12}$$

Решения, соответствующие основному состоянию имеют вид $\phi = const$. Кроме них существуют метастабильные решения; простейшее из них, зависящее только от полярного угла θ имеет вид $\phi = k\theta + \phi_0$, или то же в декартовых координатах:

$$\phi = k \arctan \frac{y}{x} + \phi_0. \tag{1.13}$$

Здесь k – топологический заряд вихря (его число намотки): при обходе вокруг центра вихря по произвольному контуру магнитный момент делает k полных оборотов. Если направление поворота магнитного момента совпадает с направлением обхода контура, то мы имеем $k > 0$, что соответствует вихревому решению. В противном случае, имеем $k < 0$, что соответствует антивихревому решению. Можно показать, что энергия одиночного вихря логарифмически расходится с размером образца [11]: $E_v = \pi k^2 \rho_s \ln R/a$ (R – размер порядка размера системы, a – постоянная решетки). Таким образом, одиночные вихри не появляются в макроскопических системах в низкотемпературном пределе $T \to 0$.

В силу линейности уравнения (1.12) существуют также метастабильные конфигурации, которые представляют собой суперпозиции одновихревых решений, например, пара вихрь-антивихрь: $\phi = k(\arctan \frac{y-y_v}{x-x_v} - \arctan \frac{y-y_a}{x-x_a})$

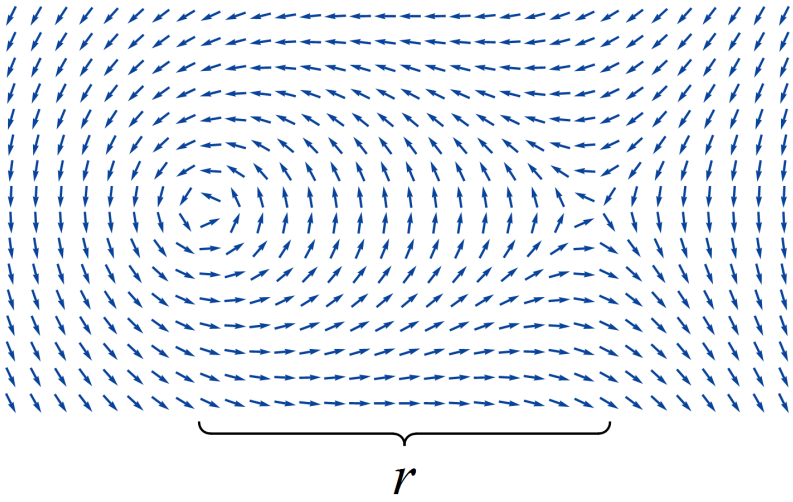


Рис. 1.4: Пара вихрь-антивихрь. r – расстояние между центрами вихря и антивихря.

(рис. 1.4), где (x_v, y_v) и (x_a, y_a)– координаты центра вихря и антивихря соответственно. Энергия такой конфигурации является конечной

$$E_{va} = 2\pi k^2 \rho_s \ln \frac{r}{a}. \tag{1.14}$$

Здесь $r = \sqrt{(x_v - x_a)^2 + (y_v - y_a)^2}$ – расстояние между центрами вихря и антивихря.

Таким образом, система связанных вихрей и антивихрей имеет конечную энергию. При низких температурах вихри и антивихри связаны в пары и существует ненулевая равновесная концентрация этих пар.

На первый взгляд, расходящаяся энергия одиночного вихря вовсе запрещает их появление при ненулевой температуре. Однако, это не так: при ненулевых температурах необходимо минимизировать свободную энергию $F = E - TS$, то есть учитывать энтропийный фактор. Вихрь повышает энтропию системы на величину

$$S_v = \ln \frac{R^2}{a^2}. \tag{1.15}$$

Отсюда получим свободную энергию, соответствующую одновихревому решению:

$$F_v = E - TS = q_m^2 \ln \frac{R}{a} - T \ln \frac{R^2}{a^2} = (q_m^2 - 2T) \ln \frac{R}{a}. \tag{1.16}$$

Появление одиночных вихрей становится энеретически выгодным (то есть F_v становится меньше нуля), когда температура повышается до

$$T_{BKT} \simeq q_m^2/2. \tag{1.17}$$

Эта температура называется температурой Березинского-Костарлица-Таулесса.

Согласно упомянутой теореме Мермина-Вагнера, в низкоразмерных системах $D \leq 2$ с непрерывной группой симметрии не может существовать дальнего порядка. Поэтому, на первый взгляд, в таких системах вообще не может быть фазового перехода. Однако, Березинский [20], Костерлиц и Таулесс [21], показали, что возможен переход от квази-дальнего порядка (когда корреляционные функции спадают степенным образом) к беспорядку (когда они спадают экспоненциальным образом).

В случае трехмерной XY модели, низкотемпературная фаза имеет настоящий дальний порядок.

Отметим, что переход Березинского-Костерлица-Таулесса можно рассматривать как переход диссоциации вихревых пар [21], а фазовый переход в модели Изинга можно рассматривать как диссоциацию бисолитонов: для квазиодномерного режима мы обсудим такой взгляд в главе 3, в изотропном случае аналогичную роль играет упомянутый аргумент Пайерлса.

Подводя итоги этого подраздела, приведем таблицу, описывающую тип нарушенной симметрии для разных систем (кристаллы, магнетики и сверхпроводники), соответствующие мягкие моды и топологические дефекты.

Таблица 1.1: Системы со спонтанно нарушенной симметрией, их мягкие моды и топологические дефекты

Система	Нарушенная симметрия	Классические мягкие моды	Квантовая квазичастица	Топологический дефект
кристалл	трансляция	упругие волны	фононы	дислокации
магнетик	поворот	спиновые волны	магноны	доменные стенки, вихри
сверхпроводник	калибровочное $U(1)$ преобразование	ток	куперовские пары	вихри Абрикосова, контакты слабой связи
сверхтекучая жидкость	калибровочное $U(1)$ преобразование	сверхтекучий поток	бозоны конденсата	вихри

1.2 Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики

Данный раздел посвящен магнитоэлектрическим материалам и мультиферроикам и является обзорной частью для главы 2.

Магнитоэлектрический эффект заключается во влиянии электрического поля на намагниченность или магнитного поля на электрическую поляризацию. Он явился предвестником появления мультиферроиков и был обнаружен “на кончике пера”: сначала он был теоретически предсказан в оксиде хрома Cr_2O_3 Дзялошинским [22] в 1959 году, а через год это предсказание было экспериментально подтверждено Астровым [23]. После бурного развития магнитоэлектрических материалов в 1960-х и 1970-х годах, интерес к ним стал постепенно угасать, в основном, из-за малости наблюдаемого эффекта. Но на рубеже нового тысячелетия пришли новые экспериментальные успехи – были усовершенствованы методы получения высококачественных тонких пленок, что привело к открытию многих новых мультиферроиков с большой поляризацией и возрождению этой области. Согласно каноническому определению

Шмидта [24] (которые впервые и ввел данный термин) мультиферроики – это вещества, в которых присутствуют как минимум два “ферро-” упорядочения, например, ферромагнитное, сегнетоэлектрическое (ferroelectric) или ферроэластическое. В контексте данной диссертации мы будем рассматривать мультиферроики с сосуществованием именно магнитного и электрического упорядочений. Сейчас понятие мультиферроиков трактуется более широко, рассматривается не только ферромагнитное, но и антиферромагнитное и другие типы магнитного и электрического упорядочений, такие как спирали и циклоиды. На сегодняшний день магнитоэлектрические материалы и мультиферроики остаются в фокусе как экспериментальных, так и теоретических исследований. Для недавних обзоров мультиферроиков см. [25, 26, 27, 28, 29].

Согласно классификации Хомского [30], существует два рода мультиферроиков. В мультиферроиках I рода как магнитная, так и электрическая подсистемы являются упорядоченными, при этом две эти подсистемы относительно слабо связаны друг с другом. В мультиферроиках II рода магнитное и электрическое упорядочения тесно взаимосвязаны друг с другом и, обычно, магнитный порядок создает электрический. Этот эффект может быть применен и в обратном направлении: прилагая электрическое поле и индуцируя электрическую поляризацию, можно создавать магнитные структуры и управлять ими. Изначально концепция о взаимодействии электрической и магнитной подсистем появилась именно благодаря мультиферроикам II рода, но сейчас приходит понимание того, что такая связь между намагниченностью и электрической поляризацией может присутствовать в любом магнитном изоляторе, где это допускается симметрией [25]. Например, в 2008 году Дзялошинский теоретически предсказал возможность создания и управления доменными стенками с помощью электрического поля в ферромагнетиках и слабых ферромагнетиках [31], что также было экспериментально обнаружено [32, 33].

В данной главе диссертации мы будем рассматривать магнитоэлектрические вещества, то есть такие в которых есть взаимодействие между электрической и магнитной подсистемами. Главным образом, мы будем держать в уме мультиферроики II рода, но возможны также и другие виды магнитных диэлектриков.

Очень перспективным для конструирования магнитной памяти на основе мультиферроиков является использование доменных стенок и других топологических дефектов [34], поскольку их создание и управление ими возможны с помощью электрического поля, они допускают очень высокую плотность упаковки информации, при том, что топологический характер возбуждения защищает информацию от потери под влиянием внешних возмущений, таких как как нагревание или механическое воздействие [35, 36]. Яркими примерами таких топологических дефектов являются решетки скирмионов [37], а также отдельные скирмионы, наблюдаемые в магнитоэлектрических материалах [38], магнитные вихри [39, 40] и их дискретные аналоги [41, 42, 43], доменные стенки [32, 33, 44]. Зачастую такие дефекты и структуры наблюдаются в тонкопленочных магнитоэлектрических материалах, которые будут рассмотрены в главе 2.

1.2.1 Феноменологическая модель магнитоэлектрического взаимодействия

Этом подразделе мы опишем феноменологическую модель магнитоэлектрического взаимодействия, предложенную Мостовым на основе симметрийных аргументов и подхода Гинзбурга – Ландау к термодинамике магнитных структур [45]

Найдем соотношение для минимальной связи между электрической поляризацией $\mathbf{P}$ и намагниченностью $\mathbf{M}$ в магнитоэлектрическом материале. Вид этой взаимосвязи может быть установлен с помощью соображений симмет-

рии. Энергия образца должна быть инвариантна по отношению к обращению времени: $t \to -t$, а также к пространственной инверсии: $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$. При обращении времени поляризация и намагниченность преобразуются следующим образом: $\mathbf{P} \to \mathbf{P}$, $\mathbf{M} \to -\mathbf{M}$. Поэтому слагаемое в плотности свободной энергии, связывающее намагниченность и поляризацию, в наинизшем порядке должно быть квадратично по M. При инверсии пространства происходит преобразование: $\mathbf{P} \to -\mathbf{P}$, $\mathbf{M} \to \mathbf{M}$. Поэтому связующий член, при котором неоднородная намагниченность может создавать электрическую поляризацию, должен быть линеен по $\mathbf{P}$ и содержать одну пространственную производную $\mathbf{M}$. Связующий член, линейный по пространственным производным параметра порядка называется инвариантом Лифшица. Такой член может существовать в системах с нарушенной центральной симметрией, где он может приводить к периодическим модуляциям намагниченности. Такие состояния экспериментально наблюдаются, например, в феррите висмута [46]. Учитывая вышесказанное, согласно работе [45], запишем связующий член в плотности свободной энергии в виде:

$$w_{me} = \gamma \mathbf{P}(\mathbf{M}(\nabla \mathbf{M}) - (\mathbf{M}\nabla)\mathbf{M}). \tag{1.18}$$

где γ – константа взаимодействия электрической и магнитной подсистем. Один из возможных микроскопических механизмов появления этого члена основан на обратном взаимодействии Дзялошинского-Мории [47]. Считая для простоты, что в отсутствии намагниченности система не обладает спонтанной поляризацией, запишем электрическую часть энергии в виде $w_e = P^2/2\chi_e$, где χ_e —- затравочная диэлектрическая восприимчивость (при отсутствии намагниченности). Минимизируя суммарную энергию $w_e + w_{em}$ по $\mathbf{P}$, получим:

$$\mathbf{P} = \gamma \chi_e((\mathbf{M}\nabla)\mathbf{M} - \mathbf{M}(\nabla \mathbf{M})). \tag{1.19}$$

Таким образом, при наличии взаимосвязи намагниченности и поляризации, неоднородные магнитные структуры (например, циклоиды, доменные стенки,

топологические дефекты) могут порождать ненулевую поляризацию образца.

1.2.2 Заряженные дефекты магнитной структуры

Как было выяснено в предыдущем разделе, благодаря взаимосвязи (1.19) неоднородная намагниченность может порождать электрическую поляризацию. Рассмотрим несколько примеров магнитных структур, которые оказываются электрически заряженными.

Сначала рассмотрим доменные стенки. Два наиболее характерных вида магнитных доменных стенок – блоховская и неелевская. В блоховской доменной стенке (рис. 1.5a) намагниченность вращается в плоскости самой доменной стенки; из формулы (1.19) такая стенка оказывается неполяризованной. В неелевской доменной стенке (рис. 1.5b) намагниченность вращается в плоскости, содержащей вектор нормали к доменной стенке; такая доменная стенка оказывается поляризованной. При этом на одной поверхности образца выступает положительный заряд, а на другой – отрицательный. Подобные заряженные доменные стенки, движением которых можно управлять, были обнаружены в пленках феррита-граната [48].

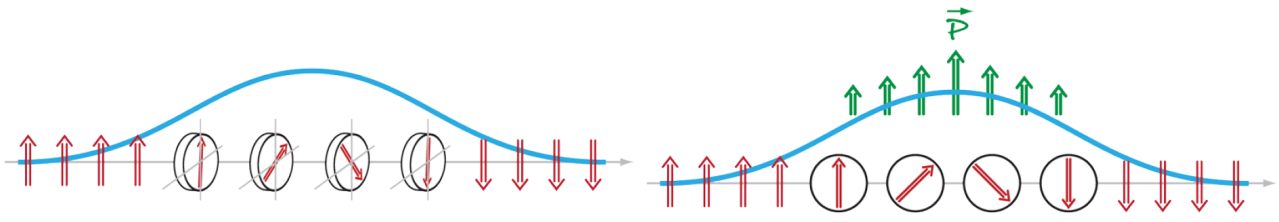
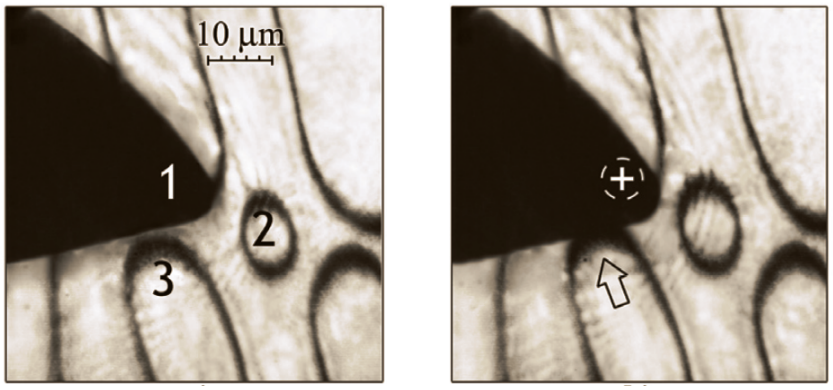


Рис. 1.5: (a) Блоховская доменная стенка. (b) Неелевская доменная стенка. Красные стрелки показывают намагниченность, зеленые – поляризацию. Рисунок взят из работы [30].

Другой пример, который будет более подробно изучен в главе 2 данной диссертации – магнитные вихри. [28, 45, 49]. Вихрь, описываемый уравнением (1.13), благодаря магнитоэлектрическому взаимодействию (1.19) приобретает



(a) (b)

Рис. 1.6: Движение доменной стенки под действием электрического поля. (a) Начальное состояние в отсутствии приложенного напряжения. 1 – игла зонда, 2 и 3 – магнитные домены. (b) Сдвиг доменов 2 и 3 по направлению к игле, на которую подан потенциал −500 В. Рисунок взят из работы [40].

поляризацию

$$\mathbf{P} = -k\gamma\chi_e M_0^2 \frac{\mathbf{e}_r}{r}, \tag{1.20}$$

где $\mathbf{e}_r$ – единичный вектор по направлению от центра вихря. Легко видеть, что при $r \neq 0$, $\nabla\mathbf{P} = 0$, таким образом, весь заряд сосредоточен в его центре. Линейная плотность электрического заряда вихревой линии:

$$\lambda_e = -\int (\nabla\mathbf{P}) dS = k \times 2\pi\gamma\chi_e M_0^2, \tag{1.21}$$

Мы видим, что вихрь в мультиферроике обладает электрическим зарядом, сосредоточенным в центре вихря, причем электрический заряд оказывается пропорциональным его топологическому заряду. Таким образом, вихри оказываются заряженными положительно, а антивихри – отрицательно. При этом пара вихрь-антивихрь образует электрический диполь.

1.3 Квазиодномерные проводники

В этом разделе мы опишем квазиодномерные проводники с дискретно или непрерывно вырожденными основными состояниями, которые будут предметом исследования главы 3.

Вырождение основного состояния приводит к существованию топологически нетривиальных возбуждений – солитонов. Но в отличие от вихревых линий или доменных стенок, протяженных в одном или двух направлениях, они являются полностью локализованными и микроскопическими объектами с энергиям и квантовыми числами того же порядка, что и у одного электрона. Солитоны могут определять наблюдаемые свойства системы, которые обычно приписываются электронным возбуждениям см. ранние обзоры [50, 51] и дополнения к ним [52, 53, 54].

Микроскопические солитоны играют определяющую роль в электронных процессах квази-1D системах и экспериментально обнаружены в таких системах как: сопряженные полимеры (см. теоретический обзор [51] и теоретико-экспериментальный обзор [55]), спин-пайерлсовские цепочки [56], донорно-акцепторные комплексы, включая "электронные сегнетоэлектрики" [57, 58] и семейства так называемых "электронных кристаллов", в частности волн зарядовой плотности (ВЗП) и моттовских диэлектриков с зарядовым упорядочением (см. обзоры [52, 53, 59]). Солитоны перенимают на себя функции электронов зоны проводимости и становятся основным типом возбуждений, переносящих заряд и спин, так как их энергия активации, как правило, ниже, чем величина щели в электронном спектре [50]. С помощью солитонов осуществляется автолокализация электронов в середине щели спектра и разделение спиновой и зарядовой степеней свободы: образуются спиноны (солитоны обладающие спином и не обладающие зарядом) и холоны (бесспиновые солитоны, несущие электрический заряд), иногда с их последующим воссоединением на существенно разных масштабах. Сегнетоэлектрическое зарядовое упорядочение в органических проводниках (см. обзор [59]) приводит к появлению нескольких типов солитонов, наблюдаемых в проводимости (холонов) и диэлектрической проницаемости (полярных кинков), солитонных связанных пар, наблюдаемых в оптике, и комбинированных спин-зарядовых солитонов.

Эксперименты по сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) позволили визуально наблюдать отдельные солитоны (амплитудные кинки) в ВЗП [60]. С помощью исследования туннельных спектров [61] можно наблюдать те же солитоны в динамике. Создание туннельным образом солитонных пар приводит к нелинейным транспортным эффектам в ВЗП [62] и полимерах [63, 64]. Солитоны могут также выступать в качестве ядер, образующихся при "плавлении" полосатой фазы в легированных моттовских диэлектриках или фазы Ларкина-Овчинникова-Фулде-Феррелля в спин-поляризованных сверхпроводниках [65, 66].

Для квазиодномерных проводников характерно состояние с волной зарядовой плотности, то есть с модуляцией плотности заряда электронов:

$$\rho(x) = \rho_0 + A(x)\sin(kx + \phi(x)) \tag{1.22}$$

В случае соизмеримой волны зарядовой плотности фаза $\phi(x) = \phi_0$ – фиксирована и можно ввести действительный параметр порядка $A(x)$; зависимость энергии от параметра порядка при низких температурах аналогична представленной на рис. 1.1b.

В случае несоизмеримой волны зарядовой плотности фаза $\phi(x)$ не является фиксированной и можно ввести комплексный параметр порядка $\Delta(x) = A(x)e^{i\phi(x)}$; зависимость энергии от параметра порядка при низких температурах аналогична представленной на рис. 1.2b.

1.3.1 Дискретное вырождение – соизмеримая ВЗП

Рассмотрим два конкретных примера соизмеримых волн зарядовой плотности.

Полиацетилен

Начнем с полиацетилена – прототипической квазиодномерной системы с соизмеримой ВЗП [50, 51, 55]. Полиацетилен представляет собой набор сла-

бовзаимодействующих углеродных цепочек $(CH)_n$, сплетенных в волокна. При высоких температурах на каждый атом углерода приходится по одному электрону зоны проводимости, поэтому зона является полузаполненной и полиацетилен является проводником. С понижением температуры происходит пайерлсовский переход, сопровождающийся появлением неэквивалентных связей (двойных и одинарных), открытием щели $2\Delta_0$ на поверхности Ферми, понижением энергии электронов вблизи границы зоны Бриллюэна и двукратным вырождением основного состояния, которое соответствует двум способам чередования двойных и одинарных связей. Если на одном конце цепочки система находится в одном основном состоянии, а на другом конце – в другом состоянии, то они должны плавно соединяться друг с другом солитонным возбуждением (рис. 1.7). В этом случае параметр порядка меняется как

$$A(x) = A_0 \tanh(x/a), \tag{1.23}$$

где характерный масштаб на котором происходит его изменение $a \approx 7a_0$ (a_0 – постоянная элементарной ячейки) [67, 68].

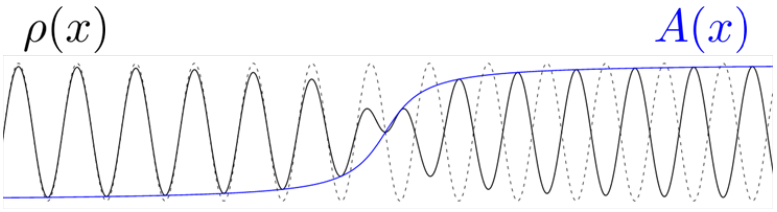
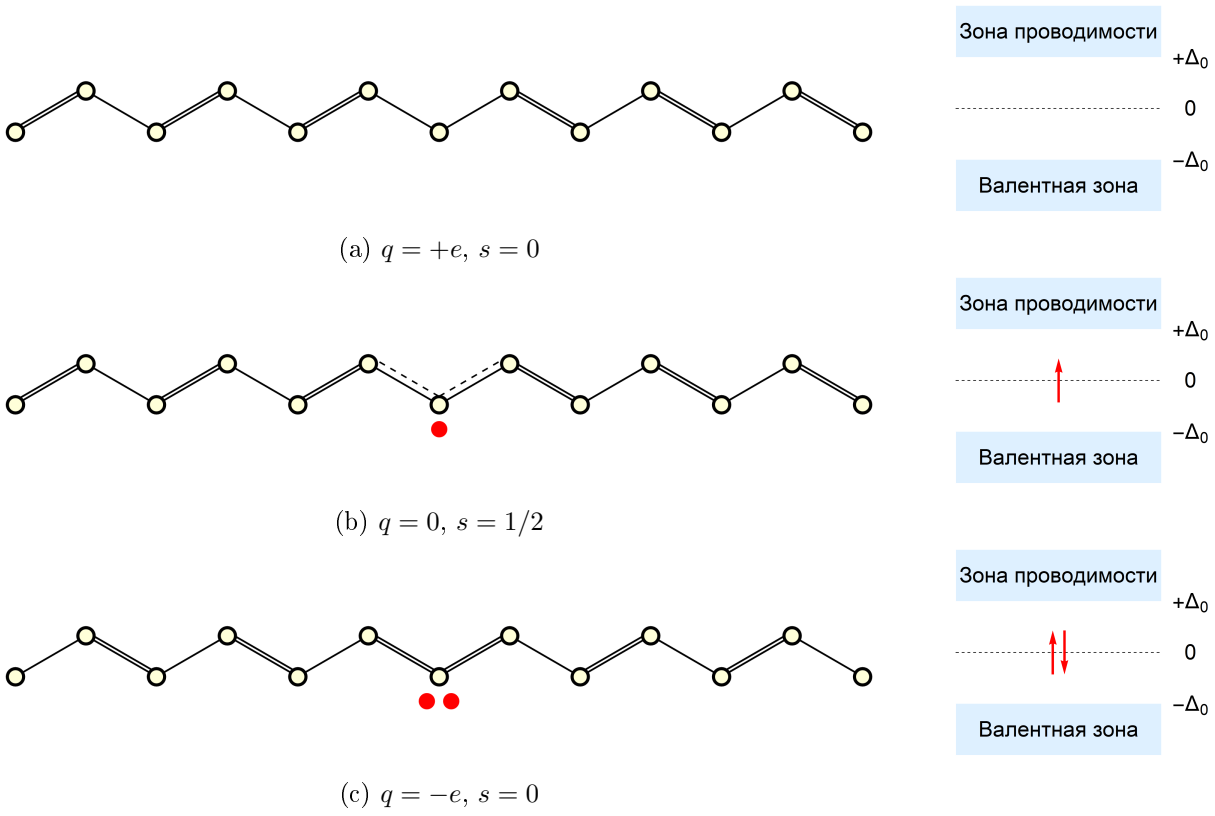


Рис. 1.7: Солитон в системе с двукратно вырожденным основным состоянием: модуляция зарядовой плотности $\rho(x)$ (черная кривая) и параметра порядка $A(x)$ (синяя кривая). Пунктиром показана зарядовая плотность в отсутствие солитона.



(a) $q = +e$, $s = 0$

(b) $q = 0$, $s = 1/2$

(c) $q = -e$, $s = 0$

Рис. 1.8: Схематичное изображение солитонного состояния, на котором может находиться 0, 1 или 2 электрона (обозначенных красными кружками). В реальности переход от одного основного состояния в другое более плавный, чем показано на рисунке, и происходит на характерном масштабе около 14 констант элементарной ячейки.

Благодаря солитонному состоянию, в цепочке открывается новый электронный уровень в точности в центре щели. На этом уровне может находиться 0, 1 или 2 электрона (рис. 1.8). Если на солитонном уровне нет электронов, получаем частицу, называемую “холоном” и имеющую положительный заряд $+e$ (из-за фонового заряда) и нулевой спин. При одном электроне на солитонном уровне, получаем частицу, называемую “спиноном” и имеющую нулевой заряд и спин $s = 1/2$. Если на солитонном уровне 2 электрона, получаем опять “холон”, имеющий отрицательный заряд $-e$ и $s = 0$. Существование таких квазичастиц характерно для квазиодномерных систем и является манифестацией спин-зарядового разделения.

Оказывается, что при допировании системы электронами, энергия электрона, локализующегося на солитонном уровне (равная $(2/\pi) \times 2\Delta_0$), полу-

чается ниже, чем энергия электрона в зоне проводимости ($2\Delta_0$), поэтому образование солитона является энергетически выгодным.

Индиевые цепочки

Другой пример соизмеримой ВЗП, активно исследуемый последние несколько лет – индиевая цепочка на (111) поверхности кремния. Этот случай напоминает полиацителен, но с несколькими важными отличиями: система цепочек здесь двумерная, а основное состояние 4-кратно вырождено. Благодаря этому разнообразие солитонных возбуждений в индиевых цепочках больше, чем в полиацетилене [69, 70, 71]. Преимущество данной неорганической системы заключается в том, что в отличие от органики, здесь есть больше возможностей прямой визуализации солитонов.

Данные СТМ сканирования электронной плотности для амплитудного солитона (аналогичного приведенной на рис. 1.7 теоретической зависимости для случая полиацетилена) показаны на рис. 1.9. Зависимость амплитуды модуляций от x-координаты соответствует теоретической формуле (1.23) с $a \approx 9a_0$.

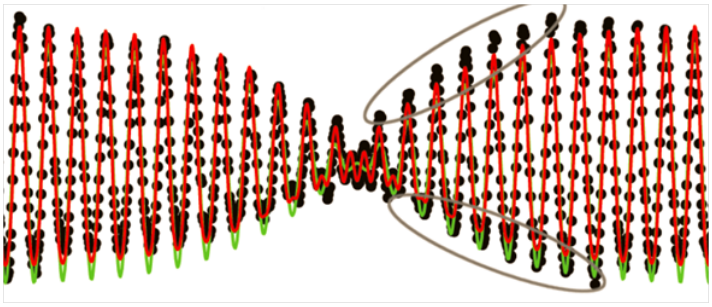
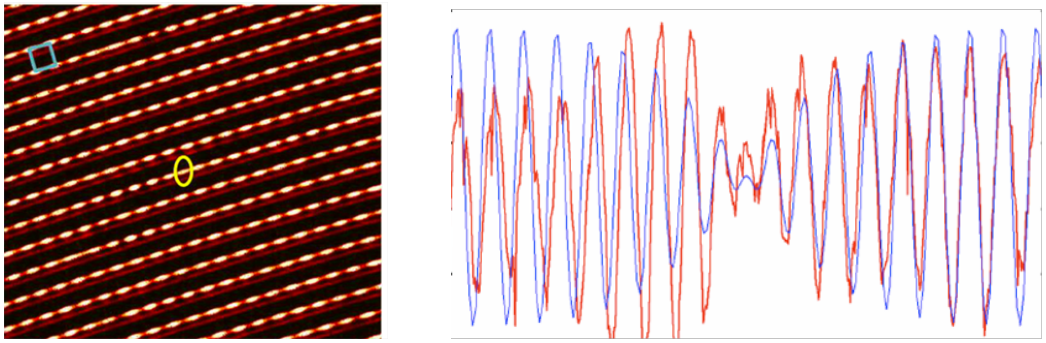


Рис. 1.9: Данные из СТМ эксперимента [69] (черные точки), вместе с наилучшим фитированием с учетом решеточной модуляции (красная линия) или без ее учета (зеленая линия). Модуляции зарядовой плотности соответствует формуле (1.22) с фазой $\phi = const$ и амплитудой (1.23), где $a \approx 9a_0$. Рисунок взят из работы [69].

1.3.2 Непрерывное вырождение – несоизмеримая ВЗП

Для неорганических квазиодномерных систем достаточно типичным является случай непрерывного вырождения основного состояния с соответствующей несоизмеримой волной зарядовой плотности. Наличие фазовой степени свободы позволяет с помощью поворота фазы полностью “залечить” амплитудный солитон, сохраняя межцепочечное упорядочение:

$$\rho(x) = \rho_0 + A_0 \tanh(x/a) \sin[2\pi x/\lambda + \arctan(x/l)], \tag{1.24}$$



(a) (b)

Рис. 1.10: (a) СТМ-скан поверхности $NbSe_3$: яркие области соответствуют максимумам ВЗП; голубой прямоугольник показывает сверхъячейку ВЗП. Эллипсом обведен центр солитона – соответствующая цепочка имеет лишний максимум ВЗП по сравнению с соседними. (b) Плотность заряда вдоль цепочки, содержащей солитон: эксперимент (красная кривая) и теоретическая зависимость (синяя кривая) с параметрами $a = 3\lambda$ и $l = 5\lambda$. Рисунок адаптирован из работы [60].

где λ – период невозмущенной волны зарядовой плотности. Такие комбинированные амплитудно-фазовые солитоны не являются топологически стабильными, но тем не менее могут быть энергетически стабильными, что действительно наблюдается в триселениде ниобия, $NbSe_3$ [60], СТМ скан поверхности которого и электронная плотность вдоль цепочки, содержащей солитон, изображены на рисунке 1.10.

1.4 Тригональная фаза дисульфида тантала, $1T - TaS_2$

Дисульфид тантала TaS_2 – слоистый материал, из семейства дихалькогенидов переходных металлов MX_2, где M означает переходный металл – Nb, Ta или Ti, в то время как X – элемент из подгруппы серы, например, S, Se (для обзоров см. [72], [73]). В материалах из этого семейства возможна эксфолиация вплоть до нескольких слоев и даже до монослоя, что роднит его с графеном. Дихалькогениды переходных металлов, наряду с графеном, являются очень перспективными материалами и, ожидается, что они должны составить элементную базу новой посткремниевой электроники.

Особенно интересным представителем данного класса является тригональная фаза дисульфид тантала, в которой недавно было индуцировано “скрытое состояние вещества” [74], результаты моделирования которого будут описаны в главе 4.

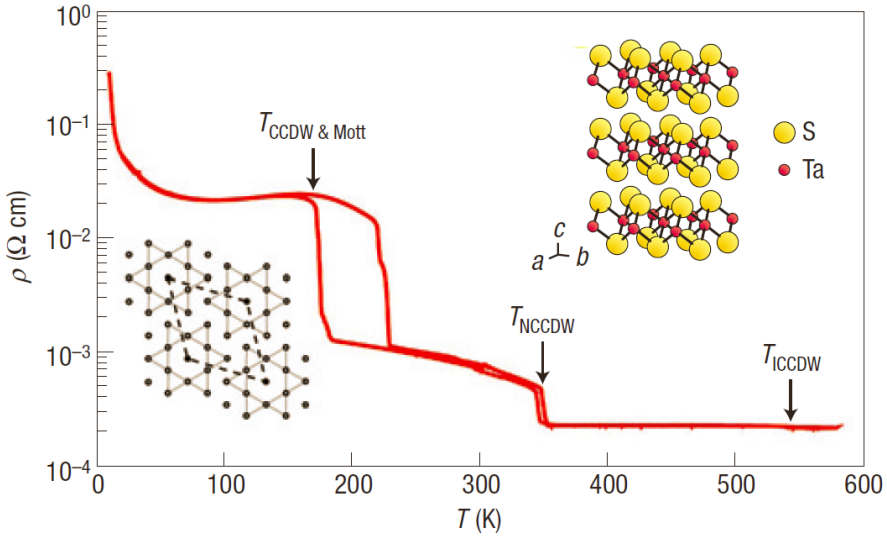


Рис. 1.11: Термодинамические фазы $1T - TaS_2$ при нормальном давлении, переходы между которыми видны из графика зависимости удельного сопротивления от температуры. Эти фазы включают в себя: металлическую фазу при $T > 550$K; фазу несоизмеримой ВЗП (ICCDW) выше 350 K; фазу почти соизмеримой ВЗП (NCCDW) выше 190 K; соизмеримую фазу моттовского изолятора (CCDW) ниже 190 K. Также показаны искажения подрешетки атомов Ta в соизмеримой фазе (нижняя левая вставка) и кристаллическая структура $1T - TaS_2$ (верхняя правая вставка). Рисунок взят из работы [75].

При изменении температуры, в $1T-TaS_2$ происходит несколько фазовых переходов с образованием различных видов волн зарядовой плотности (рис. 1.11). При высоких температурах ($T > 550$K) $1T-TaS_2$ является металлом, с одним электроном в зоне проводимости, приходящемся на один атом Ta. При понижении температуры, из-за частичного нестинга ферми-поверхности, в нем происходит несколько фазовых переходов с образованием несоизмеримой (при $T = 550$K), затем почти соизмеримой (при $T = 350$K) и, наконец соизмеримой ВЗП (при $T = 190$K). При последнем из фазовых переходов над щелью ВЗП все еще должна оставаться $1/13$ исходных электронов проводимости, и если не учитывать электронных корреляций, то можно подумать, что вещество должно оставаться металлом. Однако, из-за малой концентрации носителей, начинает доминировать потенциальная энергия взаимодействия между ними, в результате чего происходит их вигнеровская кристаллизация, открывается щель Мотта-Хаббарда (с полностью заполненной нижней хаббардовской зоной) и материал становится диэлектриком [76]. Из-за того, что каждый из локализованных электронов, вследствие кулоновского взаимодействия, искажает решетку и образует полярон, получающееся основное состояние называют “поляронным кристаллом”.

Недавние успехи в исследовании этого материала были достигнуты благодаря применению воздействий сильных электрических полей или сверхбыстрой оптической накачки. В результате таких воздействий происходит кардинальное преобразованиях электронных состояний. Одной из главных целей является создание “скрытых” фаз, которые недоступны и даже неизвестны в равновесных условиях. Такие состояния были получены благодаря ультракоротким лазерным импульсам [74, 77], импульсам напряжения [78, 79], а также с помощью локальных манипуляций заряженной иглой СТМ [80, 81]; полученные состояния оказываются проводящими [80]. Зарегистрированное сверхбыстрое переключение состояний электронной подсистемы уже рассматривается как способ создания новых типов памяти RAM, см. [82].

Глава 2

Создание мультивихревых магнитных структур электрическим полем в магнитоэлектрических системах с непрерывной симметрией типа легкая плоскость

Эффективное управление магнитными структурами с помощью электрического поля может привести к прорыву в создании устройств магнитной памяти. Существующие технологии используют для переключения магнитных состояний либо магнитные головки (подверженные механическим воздействиям), либо электрические токи (посредством создаваемых ими магнитных полей или с помощью спин-поляризованных токов), что приводит к джоулеву нагреву [83]. Если удастся вместо токов использовать электростатические поля, это позволит уменьшить диссипацию энергии в $\sim$ 100 раз [84]. Было предложено несколько механизмов управления магнитными свойствами электрическим полем, например изменение электрическим полем концентрации носителей тока, которые передают магнитные взаимодействия в магнитных полупроводниках; изменение магнитной анизотропии в гетероструктурах изолятор/магнитный металл; и использование магнитоэлектрического взаи-

модействия в мультиферроиках [84]. Здесь мы сосредоточимся на последнем механизме.

В данной главе мы проводим теоретический анализ феноменологической модели, предложенной Мостовым [45] для описания мультиферроиков II рода, и применяем ее к тонкопленочному материалу с симметрией типа легкая плоскость. Мы покажем аналитически и численно, что достаточно сильное локально сосредоточенное электрическое поле может привести к образованию "магнитного атома", состоящего из "ядра" магнитных вихрей, окруженного "оболочками" из антивихрей. Эта идея позволяет предложить способ экспериментальной реализации 2D кулоновской плазмы в ловушке и сделать предсказания относительно ее нормальных колебательных мод. Тема конечных кулоновских плазменных кластеров и, особенно, их нормальных мод привлекает большое внимание в разных областях физики (см. [85, 86] и ссылки в них). Однако, обычно, частицы в 2D кластерах взаимодействуют между собой через трехмерный кулоновский потенциал $1/r$. Напротив, системы, которые мы рассматриваем в данной главе, дают уникальную возможность создания двухкомпонентной плазмы с двумерным кулоновским логарифмическим взаимодействием.

Представленное в данной главе исследование имеет черты, схожие с некоторыми эффектами в квантовой электродинамике и физике тяжелых атомов. В работе Померанчука [87], развитой Зельдовичем [88] предсказано, что для атомных чисел $Z \gtrsim 1/\alpha$ ($\alpha \approx 1/137$ – постоянная тонкой структуры) электрическое поле ядра становится настолько сильным, что оно может вырывать электроны из вакуума и заполнять нижние электронные уровни, испуская при этом позитроны. Этот эффект еще не наблюдался, поскольку такие тяжелые ядра очень нестабильны. Однако, недавно был реализован твердотельный аналог в этого эксперимента в графене [89].

В данной главе мы предлагаем способ экспериментальной реализации схо-

жего эффекта в другом классе твердотельных веществ – в магнитоэлектриках и мультиферроиках: пары магнитных вихрей и антивихрей могут быть созданы из основного состояния ("вакуума") магнитоэлектрической пленки с симметрией типа легкая плоскость, с помощью сильного неоднородного электрического поля. Важное отличие заключается в том, что из-за своей топологической природы вихрь и антивихрь оказываются связаны логарифмическим взаимодействием и не могут быть разнесены на бесконечное расстояние друг от друга. Результаты представленные в данной главе, основываются на работе [90].

2.1 Модель

Чтобы описать тонкопленочный материал со связанными магнитными и электрическими подсистемами, мы будем использовать обобщение феноменологической модели, описанной в разделе 1.2.1, включающее внешнее электрическое поле. Запишем полную плотность свободной энергии как сумму частей, возникающих из-за электрической поляризации, намагниченности и магнитоэлектрической связи:

$$w = w_e + w_m + w_{me}. \tag{2.1}$$

Здесь

$$w_e = \frac{P^2}{2\chi_e} - \mathbf{EP} - \frac{\mathbf{E}^2}{8\pi} \tag{2.2}$$

– энергия электрической поляризации [91], χ_e – электрическая восприимчивость в отсутствие намагниченности. Мы предполагаем, что в отсутствие намагниченности, в материале не возникает спонтанной электрической поляризации, поэтому в свободной энергии (2.2) отсутствует член $\sim P^4$. Запишем магнитную часть свободной энергии как

$$w_m = \frac{\alpha}{2}\left[\left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial y}\right)^2\right], \tag{2.3}$$

что является энергией магнитной неоднородности [91]; вклад $AM^2 + BM^4$, который сохраняет $|\mathbf{M}| = M_0 = const$, подразумевается и явно не выписан. Поскольку мы моделируем тонкопленочный материал, мы предполагаем, что толщина пленки h много меньше магнитной обменной длины и пренебрегают изменением $\mathbf{M}$ в нормальном к пленке направлении. Отметим также, что аналогичный анализ можно провести и для антиферромагнитной модели, которая тоже обладает вихревыми возбуждениями [92].

Наибольший интерес представляет энергия магнитоэлектрической связи, выражение для которой было выведено для мультиферроиков II рода [45], но соответствующий вклад также присутствует и для мультиферроиков I рода, и может иметь место для более широкого класса магнитоэлектрических материалов:

$$w_{me} = \gamma \mathbf{P}(\mathbf{M}(\nabla \mathbf{M}) - (\mathbf{M}\nabla)\mathbf{M}). \tag{2.4}$$

Комбинация трех вкладов (2.2), (2.3), и (2.4) дает полную плотность свободной энергии магнитоэлектрического материала

$$w = \frac{P^2}{2\chi_e} - \mathbf{E}\mathbf{P} - \frac{\mathbf{E}^2}{8\pi} - \gamma \mathbf{P}((\mathbf{M}\nabla)\mathbf{M} - \mathbf{M}(\nabla \mathbf{M})) + \\ + \frac{\alpha}{2}\left[\left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial y}\right)^2\right]. \tag{2.5}$$

Предположим, что намагниченность $\mathbf{M}$ является первичным параметром порядка, который может навести поляризацию $\mathbf{P}$. Таким образом, мы можем найти поляризацию, минимизируя (2.5) по $\mathbf{P}$:

$$\mathbf{P} = \gamma \chi_e((\mathbf{M}\nabla)\mathbf{M} - \mathbf{M}(\nabla \mathbf{M})) + \chi_e \mathbf{E}. \tag{2.6}$$

Из-за тонкопленочной геометрии образца, намагниченности выгодно лежать в плоскости пленки (в противном случае система бы значительно проиграла в энергии размагничивающего поля). Кроме того, материал может дополнительно обладать симметрией типа “легкая плоскость”. Поэтому, наложим

ограничение, что намагниченность лежит в плоскости пленки:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M_0 \begin{pmatrix} \cos\phi(\mathbf{r}) \\ \sin\phi(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

С использованием угловой переменной ϕ поляризация может быть записана как

$$\mathbf{P} = \gamma\chi_e M_0^2 \begin{pmatrix} -\partial_y\phi \\ \partial_x\phi \\ 0 \end{pmatrix} + \chi_e \mathbf{E}. \tag{2.8}$$

Подставляя (2.7) и (2.8) в (2.5), мы видим, что электрическая, магнитная и магнитоэлектрическая части энергии объединяются в

$$\begin{aligned} w = \frac{1}{2}\left(\alpha M_0^2 - \chi_e\gamma^2 M_0^4\right)(\nabla\phi)^2 - \\ -\chi_e\gamma M_0^2\left(\partial_x\phi E_y - \partial_y\phi E_x\right) - \frac{1}{2}\chi_e E^2. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Предположим на некоторое время, что $\mathbf{E} = 0$. В этом случае выражение для энергии $W = \int w\, dV$ аналогично выражению (1.11) для XY-модели с эффективной спиновой жесткостью

$$\rho_s = (\alpha M_0^2 - \chi_e\gamma^2 M_0^4)h, \tag{2.10}$$

где h – толщина пленки. Следовательно, в отсутствие электрического поля магнитоэлектрическая связь просто перенормирует спиновую жесткость XY-модели. Для типичных значений параметров (подробнее см. раздел 2.6, особенно текст после формулы (2.57)), αM_0^2 превосходит $\chi_e\gamma^2 M_0^4$ на несколько порядков; поэтому ρ_s практически не изменяется из-за магнитоэлектрического взаимодействия, и далее мы используем $\rho_s \approx \alpha M_0^2 h$.

Несмотря на то, что магнитоэлектрическая связь не влияет на спиновые волны в первом порядке по γ, все же она приводит к важным изменениям в системе. Хорошо известно, что в XY и связанных с ней моделях важную роль

играют магнитные вихри [21]. Вихрь с центром в точке начале координат и топологическим зарядом k описывается уравнением 1.13. Оказывается, что магнитоэлектрическая связь влияет на вихри: из (2.8) следует, что поляризация магнитного вихря равна $\mathbf{P} = -k\gamma\chi_e M_0^2 \mathbf{r}/r^2$. Это приводит к тому, что магнитный вихрь приобретает электрический заряд kq_e, пропорциональный его топологическому заряду k [45], где

$$q_e = 2\pi\gamma\chi_e M_0^2 h. \tag{2.11}$$

Рассмотрим теперь, что происходит в ненулевом электрическом поле. Зависящая от ϕ часть энергии может быть переписана с точностью до $o(\gamma)$ по константе связи как

$$\begin{aligned} W &= \frac{h}{2}\int \left(\alpha M_0^2 (\nabla\phi)^2 - 2\chi_e\gamma M_0^2 \left(\partial_x\phi E_y - \partial_y\phi E_x\right)\right) dS = \\ &= \frac{h\alpha M_0^2}{2}\int \left((\partial_x\phi - \frac{\chi_e\gamma}{\alpha}E_y)^2 + (\partial_y\phi + \frac{\chi_e\gamma}{\alpha}E_x)^2\right) dS. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Отсюда видно, что основное состояние системы в электрическом поле достигается, когда $\nabla\phi = (E_y, -E_x)\chi_e\gamma/\alpha$.

Например, слабое однородное электрическое поле, лежащее в плоскости, изменяет конфигурацию основного состояния в циклоидальную магнитную структуру с периодом $\lambda = 2\pi\rho_s/\chi_e\gamma E$ и волновым вектором, перпендикулярным электрическому полю. При $T = 0$ эта магнитная структура создает поляризацию $\mathbf{P} = \chi_e^2\gamma^2 M_0^2 \mathbf{E}/\rho_s$ и дает вклад в электрическую восприимчивость: $\chi_{cycloid} = \chi_e^2\gamma^2 M_0^2/\rho_s$. Также можно заметить, что при $E \to 0$, $\lambda \to \infty$ и, следовательно, бесконечно малое электрическое поле не оказывает влияния на магнитные дефекты конечных размеров.

Если электрическое поле не является ни однородным, ни слабым, его удобно записать с помощью электростатического потенциала $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, поэтому связующий член (2.4) может быть записан как

$$W_{me} = h\chi_e\gamma M_0^2 \int \left(\partial_x\phi\,\partial_y\varphi - \partial_y\phi\,\partial_x\varphi\right) dS \tag{2.13}$$

Исключая сингулярные точки (центры вихрей) из области интегрирования и проводя разрезы, чтобы сделать ее односвязной, мы можем проинтегрировать (2.13) по частям и получить:

$$W_{me} = h\chi_e\gamma M_0^2 \left(\oint (\partial_x\phi\hat{n}_y - \partial_y\phi\hat{n}_x)\,\varphi\, dl - \right.$$
$$\left. - \int (\partial_y\partial_x\phi - \partial_x\partial_y\phi)\,\varphi\, dS \right), \qquad (2.14)$$

где в интеграл по краю образца dl входит единичный вектор нормали к ней $\hat{n}$. Так как область интегрирования односвязна и не содержит сингулярных точек подынтегрального выражения, то второй интеграл в (2.14) обращается в нуль.

Первый интеграл можно преобразовать, используя тот факт, что $d\mathbf{l} \sim (-\hat{n}_y, \hat{n}_x)$, поэтому $\oint (\partial_x\phi\hat{n}_y - \partial_y\phi\hat{n}_x)\,\varphi\, dl = -\oint \varphi\,\nabla\phi d\mathbf{l}$. Контур интегрирования включает не только внешнюю границу образца, но и обходит вокруг всех сингулярных точек выражения $\nabla\phi$. Так как интеграл вокруг особенностей идет по часовой стрелке, мы можем вынести множитель -1 и вести интегрирование против часовой стрелки; $\oint \nabla\phi d\mathbf{l} = 2\pi k_i$, где k_i – число намотки вихря с центром в i-й особой точке. Интегралы вдоль разрезов дают 0, так как $\partial_i\phi$ является однозначной функцией (несмотря на то, что ϕ не является однозначной). Поэтому мы получаем

$$W_{me} = h\chi_e\gamma M_0^2 \left(\sum_{cores} 2\pi k_i\varphi(\mathbf{r}_i) - \oint_{edge} \varphi\nabla\phi d\mathbf{l} \right). \qquad (2.15)$$

Первый член в (2.15) имеет вид $\sum q_i\varphi(\mathbf{r}_i)$. Это означает, что аналогично случаю нулевого электрического поля (2.11), в ненулевом электрическом поле вихри также имеют электрический заряд, пропорциональный топологическому заряду вихря $q_i = k_i q_e = k_i \cdot 2\pi h\chi_e\gamma M_0^2$. Поэтому вихри обладают положительным зарядом q_e, а антивихри – отрицательным $-q_e$.

Однако из (2.15) видно, что при приложении внешнего электрического поля, становятся важны граничные эффекты. Рассмотрим одиночный вихрь,

который несет электрический заряд (2.11) из-за магнитоэлектрического взаимодействия. Из электронейтральности системы следует, что граница образца также становится заряженной; она приобретает заряд той же величины, но противоположного знака. В продольном внешнем электрическом поле граничный заряд эффективно экранирует заряд вихря, причем величина экранирования зависит от геометрии образца. Для простоты будем считать, что наш образец является диском с радиусом R. Для такого диска экранирование продольного постоянного электрического поля уменьшает эффективный заряд вихрей в два раза (подробнее см. в Приложении А.1). Для аксиально-симметричных электрических полей с потенциалом $\varphi(r)$ интеграл в (2.15) дает только $q_{edge}\varphi(R)$ с $q_{edge} = h\chi_e\gamma M_0^2 \oint \nabla\phi d\mathbf{l}$. Таким образом, для магнитно-нейтральных систем (когда $\oint \nabla\phi d\mathbf{l} = 0$, т.е. когда число вихрей в образце равно числу антивихрей), граничный заряд равен нулю и (2.15) преобразуется в

$$W_{me} = -q_e \sum_i k_i \varphi(\mathbf{r}_i). \tag{2.16}$$

Энергия связи (2.15) аддитивна как по угловой переменной ϕ, так и по электростатическому потенциалу φ. Аддитивность по ϕ говорит о том, что магнитоэлектрическая связь не влияет на магнитное взаимодействие вихрей, которое появляется только вследствие неаддитивного члена $(\nabla\phi)^2$ в (2.9). Поэтому вихри взаимодействуют между собой так же, как и в XY модели, через двумерный кулоновский потенциал [21]: $W = \pm 2q_m^2 \ln(r/a)$, где a – короткомасштабный параметр обрезания порядка постоянной решетки и q_m – “магнитный заряд”:

$$q_m^2 = \pi\rho_s \approx \alpha M_0^2 h. \tag{2.17}$$

Здесь и далее мы считаем для простоты что все вихри несут минимально возможные топологические заряды $k = \pm 1$, так как вихри с большим числом намотки неустойчивы по отношению к распаду на элементарные.

Магнитная энергия магнитно-нейтральной системы N вихрей и N антивихрей может быть записана как [11]

$$W_m = -2q_m^2 \sum_{i<j} k_i k_j \ln \frac{r_{ij}}{a}. \tag{2.18}$$

Здесь $k_i = \pm 1$ – топологический заряд i-го вихря, r_{ij} – расстояние центрами i-го и j-го вихрей.

Для образца в котором число вихрей N_1 не равно числу антивихрей N_2, формулу (2.18) можно обобщить до

$$W_m = (N_1 - N_2)^2 q_m^2 \ln \frac{R}{a} - 2q_m^2 \sum_{n<m} k_i k_j \ln \frac{r_{ij}}{a}. \tag{2.19}$$

Необходимо подчеркнуть, что кроме магнитного, существует также чисто электростатическое кулоновское взаимодействие между центрами вихрей, но оно дает вклад $\sim \gamma^2$, который пренебрежимо мал по сравнению со вкладом от взаимодействия со внешним электрическим полем $\sim \gamma$. Поэтому далее мы используем приближение, в котором вихри и антивихри взаимодействует между собой только через магнитную подсистему и, кроме того, они взаимодействуют со внешними электрическими полями благодаря магнитоэлектрической связи.

2.2 Создание магнитных вихрей электрическим полем

В этом разделе мы проанализируем одну из основных идей данной главы, заключающейся в том, что сильное неоднородное электрическое поле может разрушить “магнитный вакуум” магнитоэлектрического материала за счет создания пар вихрь-антивихрь (ВА).

2.2.1 Геометрия системы

На рисунке 2.1 показана типичная геометрия рассматриваемой системы (она была предложена в работах [40, 49]). Электрическое поле создается иглой

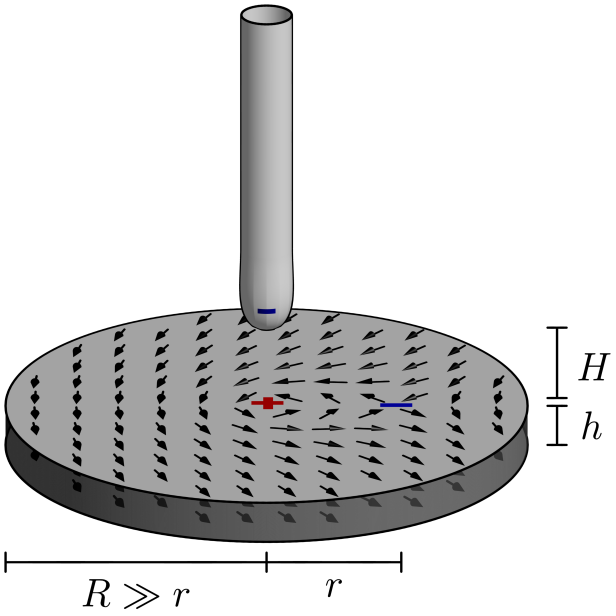


Рис. 2.1: Геометрия системы. Образец представляет собой диск радиусом R и толщиной h. Над его центром на высоте H помещается игла кантилевера с отрицательным зарядом $-Q_{tip}$.

кантилевера с фиксированным точечным зарядом $-Q_{tip} < 0$. Из-за магнито-электрического взаимодействия, достаточно сильное электрическое поле может порождать магнитные вихри. В этом разделе мы рассмотрим предел низких температур, когда термоактивированные ВА пары отсутствуют (при $T \ll \pi\rho_s = q_m^2$ их количество экспоненциально мало).

Электрический потенциал, создаваемый иглой кантилевера с зарядом $-Q_{tip}$, равен

$$\varphi(r) = -\frac{Q_{tip}}{\sqrt{r^2 + H^2}}, \tag{2.20}$$

где H – расстояние от кантилевера до образца, r – расстояние от центра образца до точки наблюдения. Мы предполагаем, что образец достаточно тонкий: его толщина $h \ll H$, и поэтому пренебрегаем изменением электрического поля по толщине пленки.

2.2.2 Критический заряд кантилевера, необходимый для создания первой пары вихрь-антивихрь

В этом подразделе мы находим критическое значение электрического поля, которое создает первую ВА пару при $T = 0$ в “большом образце”, то есть таком, радиус которого достаточно велик для чтобы вместить ВА пару целиком (более точное определение понятия “большой образец” будет приведено ниже).

Пусть электрическое поле создает одну ВА пару, у которой вихрь расположен в центре диска, а антивихрь – на расстоянии r от его него (в рассматриваемом случае больших образцов $r \ll R$). Энергия пары как функция r состоит из магнитной энергии (2.18) взаимодействия ВА пары и магнитоэлектрической части (2.16):

$$W = 2q_m^2 \ln \frac{r}{a} + Q_{tip} q_e \left(\frac{1}{\sqrt{r^2 + H^2}} - \frac{1}{H} \right).$$

Вместо Q_{tip}, r и H удобно ввести новые безразмерные переменные κ, x и h:

$$\kappa = \frac{Q_{tip} q_e}{2q_m^2 H}, \tag{2.21}$$

$$x = \frac{r^2}{H^2}, \tag{2.22}$$

$$h = \frac{H}{a}. \tag{2.23}$$

Полная безразмерная энергия системы, выраженная через параметры κ, x и h, равна

$$W = \kappa \left(\frac{1}{\sqrt{x+1}} - 1 \right) + \frac{1}{2} \ln x + \ln h.$$

Минимизируя энергию по расстоянию r между вихрем и антивихрем с помощью условия $dW/dx = 0$, получим следующее кубическое уравнение:

$$(x+1)^3 = \kappa^2 x^2. \tag{2.24}$$

Это уравнение всегда имеет отрицательный корень (см. рис. 2.2). При возрастании параметра κ от 0 до некоторого критического значения κ_0, у уравнения

появляется также положительный корень двойной кратности. Это происходит, когда дискриминант кубического уравнения равен 0, откуда мы находим $\kappa_0^2 = 3\sqrt{3}/2$ и $x_{min} = 2$, что означает, что для соответствующего критического значения заряда, наиболее выгодный размер BA пары составляет $r_{min} = H\sqrt{2}$. При $\kappa > \kappa_0$ потенциальная энергия всегда имеет локальный минимум. Будет ли он также глобальным минимумом или нет, зависит от безразмерного параметра $h = H/a \gg 1$.

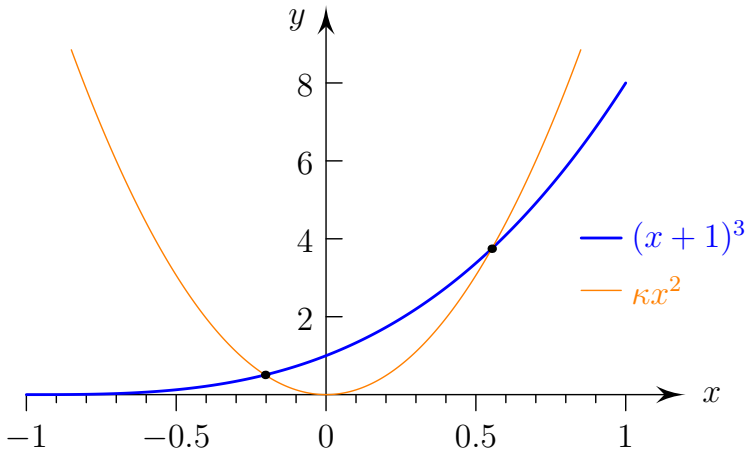


Рис. 2.2: Графики левой и правой частей уравнения (2.24) в зависимости от x для $\kappa = 3.5 > \kappa_0$. Видны две точки пересечения $x \approx -0.2$ и $x \approx 0.6$, а третья точка пересечения $x \approx 8.9$ лежит далеко справа за пределами графики.

Безвихревое состояние имеет нулевую энергию. Значит локальный минимум энергии системы с одной BA парой становится глобальным, когда соответствующая ему энергия становится отрицательной. Это условие $W < 0$ выполняется, когда:

$$\frac{\kappa}{\sqrt{x_0+1}} < \kappa - \ln h - \frac{1}{2}\ln x_0, \tag{2.25}$$

где $x_0(\kappa)$ - наибольший корень уравнения (2.24), который соответствует локальному минимуму энергии; $x_0(\kappa) \geq 2$. Поскольку левая часть (2.25) положительна, указанное неравенство может быть выполнено только в том случае, если правая часть также положительна, поэтому уж точно $\kappa > \ln h \gg 1$. Для таких больших κ уравнение (2.24) всегда имеет 2 положительных корня,

где больший из них $x_0 \approx \kappa^2$ (а также меньший $x \approx 1/\kappa$, соответствующий локальному максимуму энергии). Возвращаясь к исходным переменным, мы находим оптимальное расстояние между вихрем и антивихрем, минимизирующее энергию W:

$$r = H\sqrt{x_0} \approx \frac{Q_{tip} q_e}{2q_m^2}. \tag{2.26}$$

Подставляя $x_0 \approx \kappa^2$ в (2.25) с точностью до $O(\kappa^{-1})$, получим

$$\kappa - \ln h - \ln \kappa > 1 \tag{2.27}$$

Приближенным решением уравнения $\kappa - \ln h - \ln \kappa = 1$ является $\kappa \approx \ln h + 1 + \ln(\ln h + 1) \approx \ln h$. Отсюда мы находим критический заряд Q_{tip}^{crit}, необходимый для рождения первой ВА пары:

$$\kappa_{crit} = \frac{Q_{tip}^{crit} q_e}{2q_m^2 H} \approx \ln h \equiv \ln \frac{H}{a}; \tag{2.28}$$

$$Q_{tip}^{crit} = \frac{2q_m^2 H}{q_e} \ln \frac{H}{a}. \tag{2.29}$$

При $Q_{tip} \gtrsim Q_{tip}^{crit}$ ВА решение соответствует не только локальному, но и глобальному минимуму энергии.

Определим критическое напряжение иглы кантилевера как потенциал, создаваемый ею в ближайшей к ней точке поверхности образца:

$$\varphi_0^{crit} = \frac{Q_{tip}^{crit}}{H} = \frac{2q_m^2}{q_e} \ln \frac{H}{a} \tag{2.30}$$

Более высокие значения потенциала будут приводить к созданию нескольких ВА пар. Оценки критического напряжения для конкретных материалов приведены в разделе 2.6.

2.2.3 Создание вихрей в малых образцах

Выше мы рассмотрели случай большого образца, когда ВА пара лежит далеко от его границы. Противоположный случай малых образцов также возможен, и некоторые оценки были сделаны в работе [49]. Если расстояние между

вихрем и антивихрем (2.26) становится больше R (т.е. при $R < Q_{tip}q_e/2q_m^2$), антивихрь покидает образец, а поскольку положительно заряженный вихрь остается в его центре, то граница образца приобретает отрицательный заряд (подробнее см. в Приложении А.1). Энергия такой системы равна

$$W = q_m^2 \ln \frac{R}{a} - q_e \Delta\varphi,$$

где $\Delta\varphi = Q_{tip}(1/H - 1/\sqrt{R^2 + H^2})$ – разность электрических потенциалов между границей и центром образца. В этом случае создание одиночного вихря становится возможным, когда энергия W становится отрицательной, то есть когда приложено напряжение

$$\Delta\varphi = \frac{q_m^2}{q_e} \ln \frac{R}{a}.$$

2.3 Распределение вихрей в непрерывном приближении

В этом разделе мы построим аналитическую теорию распределения вихрей по площади образца в непрерывном приближении. Мы увидим, что даже такое грубое приближение ухватывает множество эффектов и позволяет найти профиль распределения вихрей, число вихрей в зависимости от заряда иглы Q_{tip} и энергию основного состояния системы. Эти результаты будут численно проверены в разделе 2.5.

2.3.1 Самосогласованное вычисление распределения плотности и полного числа вихрей

Число вихрей в системе не является фиксированным (как если бы оно было внешним параметром), а определяется условием минимимизации энергии. В этом разделе мы самосогласованно вычислим число вихрей N, созданных зарядом $-Q_{tip}$ при $T = 0$.

Рассмотрим непрерывный предел (это означает, что как минимум $N \gg 1$, поэтому $Q_{tip} \gg Q_{tip}^{crit}$, см. (2.29)). Пусть $n_v(\mathbf{r})$ и $n_a(\mathbf{r})$ – концентрации вихрей

и антивихрей соответственно, $n(\mathbf{r}) = n_v(\mathbf{r}) - n_a(\mathbf{r})$. При $T = 0$ области с ненулевыми n_v и n_a не пересекаются, так как в противном случае в области пересечения вихри и антивихри бы аннигилировали с понижением энергии системы.

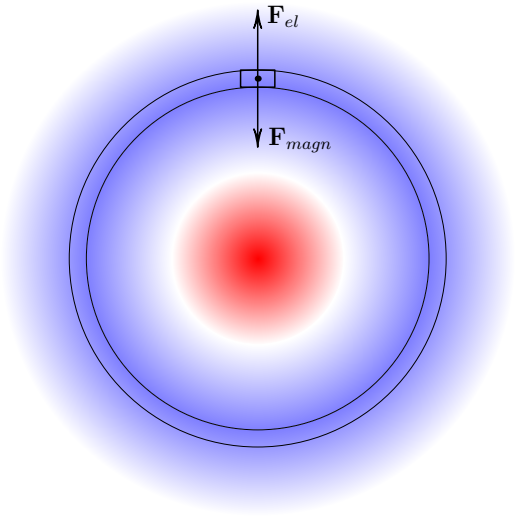


Рис. 2.3: Плотность вихрей (обозначены красным цветом) и антивихрей (обозначены синим цветом) в непрерывном приближении. На рассматриваемый элемент площади действуют электрическая и магнитная силы, уравновешивающие друг друга.

Рассмотрим кольцо между радиусами r и $r + dr$ (рис. 2.3). В состоянии равновесия электрическая и магнитная силы, действующие на кольцо, уравновешивают друг друга. Магнитное взаимодействие толкает вихри наружу, а внешняя электрическая сила тянет их внутрь кольца (и наоборот для антивихрей). Из (2.20) внешняя электрическая сила, действующая на данный элемент площади с электрическим зарядом $q_e dN = q_e n dS$ равна

$$F_{el} = q_e dN \frac{d\varphi}{dr} = Q_{tip} q_e n dS \frac{r}{(r^2 + H^2)^{3/2}}. \tag{2.31}$$

Из (2.18) магнитная сила равна $2q_m^2/r$. Вычислим магнитную силу, действующую на тот же элемент площади с магнитным зарядом $dq_m = q_m n dS$, используя теорему Гаусса из электростатики: аксиально-симметричное кольцо действует на внешние заряды с такой же силой, как если бы весь заряд кольца был сосредоточен в его центре, и не действует на заряды внутри кольца,

поэтому искомая магнитная сила равна

$$F_{magn} = \frac{2dq_m q_m^{inside}}{r}, \tag{2.32}$$

где $q_m^{inside} = q_m \int n(\mathbf{r}) d^2r = 2\pi q_m \int_0^r n(r) r dr$ – полный магнитный заряд внутри рассматриваемого кольца.

Приравнивая (2.31) и (2.32) получим

$$\frac{Q_{tip} q_e r}{(r^2 + H^2)^{3/2}} = \frac{4\pi q_m^2}{r} \int_0^r n(r) r dr \tag{2.33}$$

Домножая на r и, затем, дифференцируя по r, получим профиль плотности распределения вихрей:

$$n(r) = \frac{Q_{tip} q_e}{4\pi q_m^2} \frac{2H^2 - r^2}{(r^2 + H^2)^{5/2}} \tag{2.34}$$

На рисунке 2.4 схематически представлена функция $rn(r)$, пропорциональная числу вихрей на расстоянии r от центра диска. Вихри сосредоточены внутри небольшого круга радиуса $r_0 = H\sqrt{2}$, антивихри размазаны по образцу в области $r > r_0$ причем их число убывает с расстоянием как $rn(r) \sim -1/r^2$.

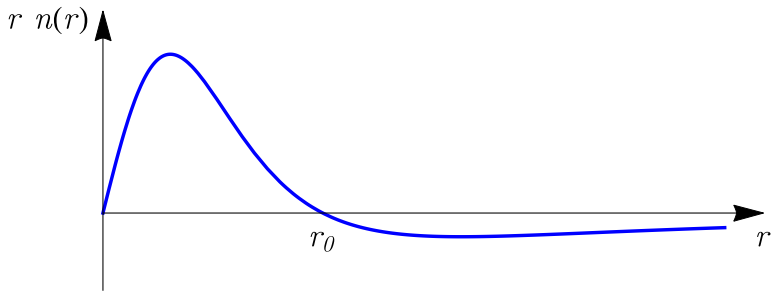


Рис. 2.4: Схематический график для $rn(r)$ в зависимости от r. Здесь $rn(r)$ пропорционально числу вихрей на расстоянии r от центра диска; $n(r)$ определяется формулой (2.34).

Из (2.33) получим полный топологический заряд вихрей и антивихрей внутри круга радиуса r:

$$N(r) = 2\pi \int_0^r n(r) r dr = \frac{Q_{tip} q_e}{2q_m^2} \frac{r^2}{(r^2 + H^2)^{3/2}} \tag{2.35}$$

Теперь мы можем вычислить общее количество вихрей в системе (которое для больших образцов совпадает с числом антивихрей). Граница между

вихрями и антивихрями проходит по радиусу $r_0 = H\sqrt{2}$. Используя (2.35), получим

$$N = \frac{1}{3^{3/2}} \frac{Q_{tip} q_e / H}{q_m^2}. \tag{2.36}$$

Для малых систем с радиусом R число антивихрей может быть меньше числа вихрей, и на краю образца будет образовываться линейная плотность заряда. Этот краевой заряд равен

$$q_{edge} = -q_e N(R) = -\frac{Q_{tip} q_e^2}{2q_m^2} \frac{R^2}{(R^2 + H^2)^{3/2}}.$$

2.3.2 Полная энергия основного состояния системы

Вычислим магнитную, (магнито-) электрическую и полную энергии системы вихрей и антивихрей в основном состоянии.

Во-первых, вычислим магнитную энергию. Мы используем непрерывную версию формулы (2.18), которую можно получить с помощью подстановки $k_i \to n(\mathbf{r})dS \equiv n(r)dS$:

$$W_m = -2q_m^2 \int d^2r\, n(r) \int\limits_{r'<r} d^2r' n(r') \ln \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a}$$

Интегрирование по d^2r' может быть выполнено с помощью теоремы Гаусса для потенциальной энергии: $\int_{r'<r} d^2r' n(r') \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/a = \ln(r/a) \int d^2r' n(r') \equiv \ln(r/a) N(r)$, где $N(r)$ дается формулой (2.35). Таким образом, получим

$$W_m = -\frac{Q_{tip}^2 q_e^2}{2q_m^2} \int\limits_0^\infty dr\, \frac{r^3(2H^2 - r^2)}{(r^2 + H^2)^4} \ln \frac{r}{a}$$

Интегрируя это выражение, получим

$$W_m = \frac{Q_{tip}^2 q_e^2}{16 q_m^2 H^2}. \tag{2.37}$$

Во-вторых, вычислим энергию вихрей во внешнем электрическом поле (2.20):

$$W_{me} = q_e \int_0^\infty d^2r\, n(r)\varphi(r) = -\frac{Q_{tip}^2 q_e^2}{8 q_m H^2} \tag{2.38}$$

Суммируя (2.37) и (2.38), получим полную энергию основного состояния системы в непрерывном пределе:

$$W = -\frac{Q_{tip}^2 q_e^2}{16 q_m^2 H^2}. \tag{2.39}$$

Так как она отрицательна, а энергия безвихревого однородного состояния равна 0, то в непрерывном пределе формирование вихревых структур заряженным кантилевером всегда энергетически выгодно. Напомним, что эта оценка, как и сам непрерывный предел применимы только в случае $Q_{tip} \gg Q_{tip}^{crit}$.

В заключение этого раздела отметим, что, несмотря на то, что непрерывный предел является грубым приближением, из него можно получить плотность распределения индуцированных вихрей, а также их число – этот результат будет численно проверен в разделе 2.5. В следующем разделе мы рассмотрим эффекты, выходящие за рамки непрерывного приближения.

2.4 Температурная зависимость электрической поляризуемости

В этом разделе мы найдем характер температурной зависимости электрической поляризуемости больших образцов (то есть образцов с нулевым полным топологическим зарядом, в котором даже наиболее удаленные от центра антивихри не чувствуют границ образца). Как будет объяснено ниже, континуальный подход не может быть применен для вычисления поляризуемости и мы должны явным образом учитывать дискретность распределения вихрей по образцу.

Рассмотрим два предельных случая: 1. случай очень низких температур $T \ll q_m/2 \simeq T_{BKT}$, когда присутствуют только вихри, индуцированные кантилевером; 2. случай более высоких температур $T \lesssim T_{BKT}$, когда при приближении к температуре Березинского-Костерлица-Таулесса, также существует

некоторое число термодинамически активированных пар.

2.4.1 Низкие температуры: описание "энергетического ландшафта" случайными евклидовыми матрицами

Здесь мы исследуем случай низких температур $T \ll T_{BKT}$. Рассмотрим систему N вихрей и N антивихрей. В первом приближении можно пренебречь эффектом конечности размера положительного вихревого "ядра" и считать его точечным, пренебрегая его вкладом в поляризуемость. Тогда оставшаяся двумерная система N антивихрей имеет $2N$ степеней свободы и, следовательно, $2N$ нормальных колебательных мод.

Пусть система находится вблизи локального минимума энергии. Поляризуемость при $T = 0$ во многом определяется самыми мягкими модами. Если в системе присутствует нулевая мода, которая взаимодействует с электрическим полем, то любое, даже небольшое, его значение будет приводить к огромным искажениям, поэтому поляризуемость такого состояния бесконечна. Однако тепловые флуктуации могут эффективно "размазывать" низколежащие моды, что приводит к тому, что при $T \neq 0$ поляризуемость оказывается конечной и, притом, сильно зависящей от температуры.

Задача о вычислении поляризуемости может быть точно аналитически решена при конкретных малых значениях N, но точное решение, по-видимому, недоступно для произвольного (большого) N. Мы применим стратегию, аналогичную подходу "энергетического ландшафта", используемому для исследования переохлажденных жидкостей, стекол и спиновых стекол, сворачивания белков и плавления конечных кластеров [93].

Пусть $r_i = r_i^{(0)} + \Delta r_i$ $(i = 1,...,2N)$, где Δr_i – отклонения декартовых координат N антивихрей по отношению к локальному минимуму $r_i^{(0)}$, где первые N компонент вектора r_i – x координаты антивихрей, а вторые – их y координаты: $r_1 = x_1$, ..., $r_N = x_N$; $r_{N+1} = y_1$, ..., $r_{2N} = y_N$. Полная энергия

$W = W^{(0)} + W^{(1)}$, где $W^{(0)} = \sum_{i,j} V(x_i, y_i; x_j, y_j) + \sum_i V_{tip}(x_i, y_i)$ представляет собой сумму магнитной энергии антивихрей и энергии их электростатического взаимодействия с кантилевером. В качестве малого возмущения мы рассмотрим $W^{(1)} = q_e E \sum_{i=1}^{N} \Delta r_i$ – энергию взаимодействия антивихрей с бесконечно малым электрическим полем E, направленным вдоль оси x в плоскости образца.

Рассмотрим Гессиан системы – матрицу вторых производных энергии по координатам антивихрей

$$K_{i,j} = \frac{\partial^2 W^{(0)}}{\partial r_i \partial r_j}. \tag{2.40}$$

С его помощью, энергия $W^{(0)}$ вблизи своих локальных минимумов может быть записана как положительно определенная квадратичная форма (вектор $\Delta\mathbf{r} = (\Delta r_1, ..., \Delta r_{2N})$):

$$W^{(0)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2N} \Delta r_i K_{ij} \Delta r_j = \frac{1}{2} \Delta\mathbf{r} K \Delta\mathbf{r}. \tag{2.41}$$

Симметричная матрица K_{ij} может быть диагонализована некоторым ортогональным преобразованием O: $\tilde{K} = OKO^{-1}$, при этом координаты Δr_i должны согласованно с ней преобразоваться к нормальным координатам R_i: $\Delta\mathbf{r} = O\mathbf{R}$. С их помощью невозмущенная часть энергии $W^{(0)}$ может быть записана как

$$W^{(0)} = \frac{1}{2} \mathbf{R} \tilde{K} \mathbf{R}, \tag{2.42}$$

где $\tilde{K} = diag\{K_1, ..., K_{2N}\}$, и K_i – собственные значения Гессиана, играющие важную роль, как мы увидим далее.

Так как $\Delta r_i = (O\mathbf{R})_i = \sum_{j=1}^{2N} O_{ij} R_j$, то $W^{(1)}$ может быть записана как

$$W^{(1)} = q_e E \sum_{i=1}^{N} \Delta r_i = q_e \sum_{j=1}^{2N} o_j R_j, \tag{2.43}$$

где

$$o_j = \sum_{i=1}^{N} O_{ij}. \tag{2.44}$$

Статсумма системы может быть записана с помощью нормальных координат R_i

$$\begin{aligned} Z(E) &= \int \prod_{i=1}^{2N} d\Delta r_i \exp\left(-\beta(W^{(0)} + W^{(1)})\right) = \\ &= \int_{-L}^{L} \prod_{i=1}^{2N} dR_i \exp\left(-\frac{1}{2}\beta \sum_{j=1}^{2N} R_j K_j R_j - \beta q_e E \sum_{j=1}^{2N} o_j R_j\right). \end{aligned} \tag{2.45}$$

Здесь мы ввели параметр крупномасштабного обрезания L, который учитывает тот факт, что при достаточно больших R_i, потенциал $W^{(0)}$ уже не является параболическим. L соответствует такому смещению антивихрей, которое сдвигает точку в конфигурационном пространстве из локального минимума к ближайшей седловой точке; по порядку величины L будет равна расстоянию между ближайшими антивихрями.

Электрическая поляризация антивихрей, несущих отрицательные заряды $-q_e$, равна

$$p_x(E) = -q_e \sum_{i=1}^{N} \langle r_i \rangle = \frac{T}{Z(E)} \frac{\partial Z}{\partial E} \tag{2.46}$$

Поляризуемость определяется как

$$\alpha = \left.\frac{\partial p_x}{\partial E}\right|_{E=0} = \left.\frac{T}{Z(0)} \frac{\partial^2 Z}{\partial E^2}\right|_{E=0} \tag{2.47}$$

Подставляя сюда статсумму (2.45), получим

$$\alpha = \frac{q_e^2}{T} \sum_{i=1}^{2N} o_i^2 \frac{\displaystyle\int_{-L}^{L} dR_i R_i^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\beta K_i R_i^2\right)}{\displaystyle\int_{-L}^{L} dR_i \exp\left(-\frac{1}{2}\beta K_i R_i^2\right)}. \tag{2.48}$$

При $T \to 0$ ($\beta \to \infty$) гауссовы интегралы сходятся очень быстро и параметр обрезания L не играет никакой роли: пределы интегрирования можно

распространить до бесконечности. Тогда из (2.48) находим, что

$$\alpha(T \to 0) = \frac{q_e^2}{T} \sum_{i=1}^{2N} o_i^2 \frac{1}{\beta K_i} = q_e^2 \sum_{i=1}^{2N} \frac{o_i^2}{K_i}. \tag{2.49}$$

Таким образом, при $T \to 0$ поляризуемость α определяется, в основном, самыми "мягкими" модами (наименьшими K_i).

Теперь рассмотрим случай $T \neq 0$. Производя интегрирование в (2.48) мы видим, что параметр обрезания L теперь входит в выражение для поляризуемости явным образом:

$$\alpha(T) = q_e^2 \sum_{i=1}^{2N} \frac{o_i^2}{K_i} f\left(\sqrt{\frac{\beta K_i}{2}} L\right), \tag{2.50}$$

где мы обозначили

$$f(x) = 1 - \frac{2xe^{-x^2}}{\sqrt{\pi}\,\mathrm{erf}\,x}, \tag{2.51}$$

которая играет роль функции гладкого обрезания для членов в сумме (2.50) с наименьшими значениями K_i. Функция $f(x)$ изображена на рис. 2.5.

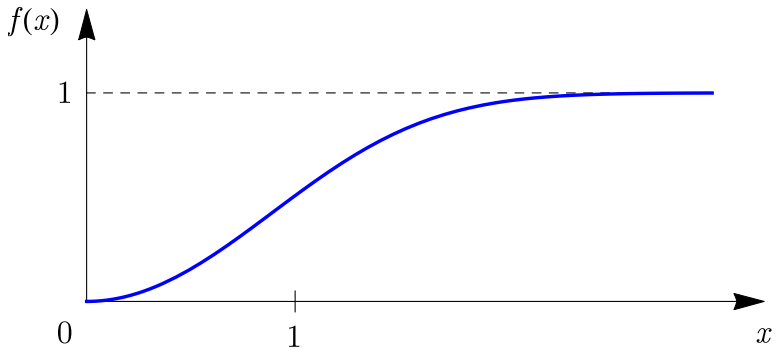


Рис. 2.5: График функции обрезания $f(x)$, определяемой формулой (2.51). При $x \to 0$, $f(x) \sim \frac{2}{3}x^2$; при $x \to +\infty$, $f(x) \sim 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} xe^{-x^2}$.

В пределе большого числа вихрей и антивихрей $N \gg 1$ сумма (2.50) может быть аппроксимирована интегралом:

$$\alpha(T) \approx q_e^2 \int_{K_{min}}^{K_{max}} \frac{o^2(K)}{K} f\left(\sqrt{\frac{\beta K}{2}} L\right) D(K) dK, \tag{2.52}$$

где $D(K)$ – плотность K-мод.

Чтобы сделать оценки для $\alpha(T)$ и вывести ее лидирующую температурную зависимость, мы используем следующие три приближения.

(i) Оценим $D(K)$, используя теорию случайных матриц для евклидова ансамбля [94], то есть такого, что случайные матричные элементы зависят от евклидовых координат взаимодействующих частиц. В работе [95] была аналитически рассчитана плотность собственных значений для некоторых одномерных разреженных систем с короткодействующим потенциалом и получено, что $D(K) \sim 1/K$; для больших размерностей было предсказано, что степень получает некоторую поправку

$$D(K) \sim 1/K^{1-\eta}, \tag{2.53}$$

где $\eta > 0$ определяется размерностью системы и видом потенциала взаимодействия частиц. В разделе 2.5.3 мы проверим это предположение с помощью точной численной диагонализации Гессиана и найдем степень η для нашего случая.

(ii) Заменим гладкую функцию обрезания на скачкообразную тэта-функцию Хевисайда $f(x) \to \theta(1-x)$. Таким образом, нижний предел интегрирования в (2.52) становится равным $T/2L^2$. Это можно сделать, так как $f(x) \sim \frac{2}{3}x^2$ при $x \to 0$ и интеграла (2.52) сходится на нижнем пределе как $\int K^{1-\eta}dK$.

(iii) Поскольку связь с электрической полем определяется только зеркальной симметрией $x \to -x$ данной моды, мы предполагаем, что все моды связываются с электрическим полем с примерно одинаковой силой, и пренебрегаем флуктуациями на малых масштабах изменения K:

$$\langle o^2(K)\rangle = \frac{1}{\Delta K}\int_K^{K+\Delta K} o^2(K)dK \approx \mathrm{const}(K). \tag{2.54}$$

Например, если стационарная конфигурация $r^{(0)}$ симметрична относительно отражения $x \to -x$, то все моды являются двукратно вырожденными и, либо

симметричными (не связанными с электрическим полем), либо антисимметричными (связанными с электрическим полем с одинаковым весом).

Наконец, используя вышеприведенные три приближения, получим следующую температурную зависимость поляризуемости:

$$\alpha(T) \sim \int_{T/2L^2}^{+\infty} \frac{D(K)dK}{K} \sim \int_{T/2L^2}^{+\infty} \frac{dK}{K^{2-\eta}} \sim \frac{1}{T^{1-\eta}} \tag{2.55}$$

Поскольку интеграл сходится на верхнем пределе, мы распространили интегрирование до $+\infty$. Эта оценка сохраняется до тех пор, пока $T \gg K_{min}L^2$. Для сверхнизких температур $T \ll K_{min}L^2$ степенная зависимость (2.55) нарушается и поляризуемость выходит на постоянное значение $\alpha \sim 1/K_{min}^{1-\eta} = const(T)$.

Как было отмечено выше, степень η не является универсальной и может зависеть не только от размерности системы, но и от потенциала межчастичного взаимодействия. Мы численно проверим справедливость приведенных выше приближений и зависимость $\alpha \sim 1/T^{1-\eta}$ для нашего случая в разделе 2.5.3.

2.4.2 Промежуточные температуры: вклад флуктуационных пар

Теперь рассмотрим случай $T \lesssim T_{BKT} \simeq q_m^2/2$. При таких температурах, кроме ВА пар, индуцированных электрическим полем, существуют также пары, созданные тепловыми флуктуациями. Распределение плотности топологического заряда $n(\mathbf{r}) = n_v(\mathbf{r}) - n_a(\mathbf{r})$ остается тем же, что и в разделе 2.3.1 – см. рис. 2.4 и формулу (2.34), так как соображения баланса сил применимы и при $T \neq 0$. Отличие заключается в том, что теперь области неисчезающих $n_v(\mathbf{r})$ и $n_a(\mathbf{r})$ пересекаются друг с другом. Это описывает процесс проникновения антивихрей в вихревую область и наоборот из-за образования флуктуационных ВА пар.

Для оценок можно выделить два вклада в поляризуемость:

(i) вклад вихрей, индуцированных кантилевером, но со взаимодействием, перенормированным диэлектрической функцией Костерлица-Таулесса: $W(r) = \pm 2q_m^2 \ln(r/a)/\epsilon(r)$;

(ii) чистый вклад термически активированных дипольных пар вдали от кантилевера (за пределами самой далекой координационной сферы антивихрей).

Ниже мы рассмотрим только перенормированный вклад (i) (чистый вклад термически активированных вихрей (ii) рассмотрен в Приложении А.2).

Перенормированная энергия взаимодействия равна $W(r) = \pm 2q_m^2 \ln(r/a)/\epsilon_{KT}(r)$. До тех пор, пока $\chi_{KT} = (\epsilon_{KT} - 1)/2\pi \lesssim 1$, что выполняется почти во всем диапазоне $T < T_{BKT}$ ($T_{BKT} \approx q_m^2/2$ – температура перехода Березинского-Костерлица-Таулесса) за исключением небольшой окрестности T_{BKT}, термически активированные ВА пары не будут оказывать качественного влияния на сверхструктуру, индуцированную полем.

Мы можем оценить температуру плавления индуцированных "магнитных атомов". Структура начинает плавиться при температуре T_c, когда характерные флуктуации положения вихрей становятся сравнимыми с расстоянием между ними $\Delta r \sim 1/\sqrt{n_v}$. Сделаем оценку для вихря, расположенного в центре диска. Электрический потенциал в центре диска близок к параболическому:

$$W_e(r) \approx \frac{kr^2}{2}, \qquad k = \frac{2Q_{tip}q_e}{H^3}$$

Используя (2.36) и $n_v \sim \pi r_0^2/N = 2\pi H^2/N$ получим:

$$T_c \sim \frac{k(\Delta r)^2}{2} \sim \frac{k}{2n_v} \sim \frac{kH^2}{2N} \sim \frac{2Q_{tip}q_eH^2}{2H^3N} \sim q_m^2 \sim T_{BKT}.$$

Следовательно, магнитная вихревая структура устойчива вплоть до $T \lesssim T_{BKT}$. При $T > T_{BKT}$ термодинамически индуцированные вихревые пары диссоциируют и нарушают локальный магнитный порядок.

2.5 Численное моделирование

В этом разделе описываются процедура и результаты численного моделирования.

2.5.1 Алгоритм вычислений

Мы провели численное моделирование системы точечных вихрей и антивихрей, которые взаимодействуют между собой (с магнитной энергией взаимодействия (2.18)) и с внешним электрическим полем, создаваемым кантилевером (с энергией взаимодействия (2.16), где электростатический потенциал определяется формулой (2.20)). Система демонстрирует "стекольное" поведение, то есть она обладает множеством локальных минимумов энергии, близких к глобальному. Чтобы найти состояние, соответствующее одному из таких локальных или глобальному минимуму энергии, мы применили алгоритм имитации отжига (simulated annealing) методом Монте-Карло (МК) [96]. Были использованы три типа МК-шагов: сдвиг вихря или антивихря, создание ВА пары и аннигиляция ВА пары. Производилось охлаждение системы от высоких температур $T_{start} \simeq q_m^2 > T_{BKT} \simeq q_m^2/2$ (что позволяло системе найти оптимальное количество вихрей) вплоть до $T_{stop} = 10^{-6} q_m^2$, в зависимости от численного эксперимента. Был использован геометрический режим охлаждения [97]:

$$T_k = T_{start} \gamma^{[k/N_{it}]}$$

с $\gamma = 0.99$ и порядка $N_{it} = 100000$ МК-шагов при данной температуре в зависимости от численного эксперимента.

Моделирование проводилось при следующих соотношениях между постоянной решетки a, расстоянием H от кантилевера до образца, и радиусом R образца: $a = 0.01H$, $R = 100H$.

2.5.2 Число вихрей и критическое поле

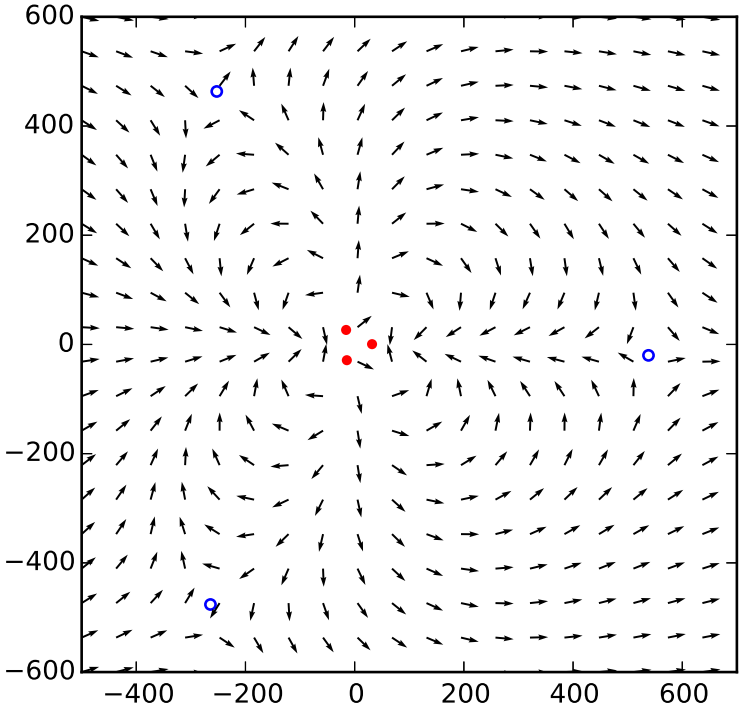
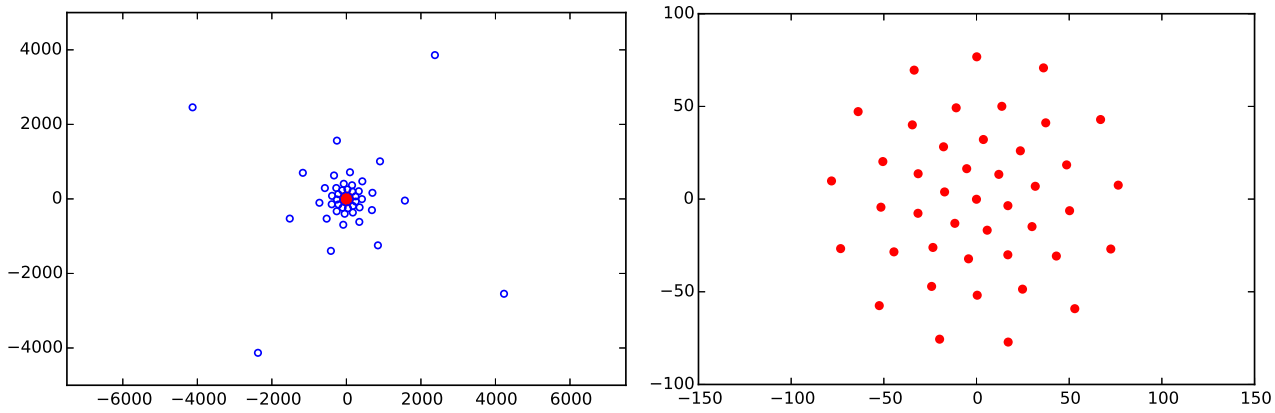


Рис. 2.6: Конфигурация системы вихрей-антивихрей при $Q_{tip}q_e/H = 23q_m^2$, $T = 0.001q_m^2$. Показаны центры вихрей (закрашенные кружки) и антивихрей (незакрашенные кружки); стрелки показывают намагниченность. Координаты даны в единицах постоянной решетки a.

Как было подробно описано в разделах 2.2 и 2.3, с помощью заряженного кантилевера возможно создание магнитных структур (“магнитных атомов”) в рассматриваемой системе. Рисунок 2.6 показывает типичное низкотемпературное ($T = 0.001q_m^2$) распределение намагниченности в системе для относительно небольшого значения заряда кантилевера ($Q_{tip}/H = 23q_m^2/q_e$), при котором создаются $N = 3$ вихря и 3 антивихря.

На рисунке 2.7 показана типичная низкотемпературная конфигурация системы для более высоких значений заряда иглы ($Q_{tip}q_e/H = 240q_m^2$). Наблюдаемое здесь число вихрей $N^{num} = 43$, тогда как аналитическая формула (2.36) дает $N^{analyt} = 240/3^{3/2} \approx 46.2$ (объяснение этому расхождению дано ниже). Система вихрей и антивихрей имеет очень регулярную структуру,



(a) (b)

Рис. 2.7: Конфигурация системы вихрей-антивихрей при $Q_{tip}q_e/H = 240q_m^2$, $T = 10^{-6}q_m^2$. Показаны центры вихрей (закрашенные кружки) и антивихрей (незакрашенные кружки). (a) Антивихревая подсистема; вихревое “ядро” не может быть разрешено и видно как один закрашенный кружок в центре. (b) Вихревая подсистема

напоминающую структуру атома: внешние “оболочки” из концентрических окружностей отрицательно заряженных антивихрей окружают положительное вихревое “ядро”. Рисунок 2.7(b) изображает только это вихревое “ядро атома”; конфигурация вихрей, взаимодействующих через двумерный кулоновский магнитный потенциал $\log r$, аналогична конфигурации частиц захваченной однозарядовой кулоновской плазмы, где заряды лежат в плоскости, но взаимодействуют через трехмерный кулоновский потенциал $1/r$ [98, 99]. Аналогичные структуры недавно были обнаружены в системах магнитных скирмионов [100].

Рисунок 2.8 показывает зависимость $N(Q_{tip})$ в основном состоянии системы. Мы видим, что аналитический результат (2.36) находится в хорошем согласии с численным моделированием. Аналитическая теория, полученная в непрерывном приближении, дает правильный наклон прямой, но немного переоценивает количество вихрей.

Мы также видим, что аналитический результат для критического заряда, создающего первую ВА пару (2.29), дает для рассматриваемых параметров ($a = 0.01H$) $Q_{tip}^{crit} = 2\ln 100 q_m^2 H/q_e \approx 9.2 q_m^2 H/q_e$, тогда как численное мо-

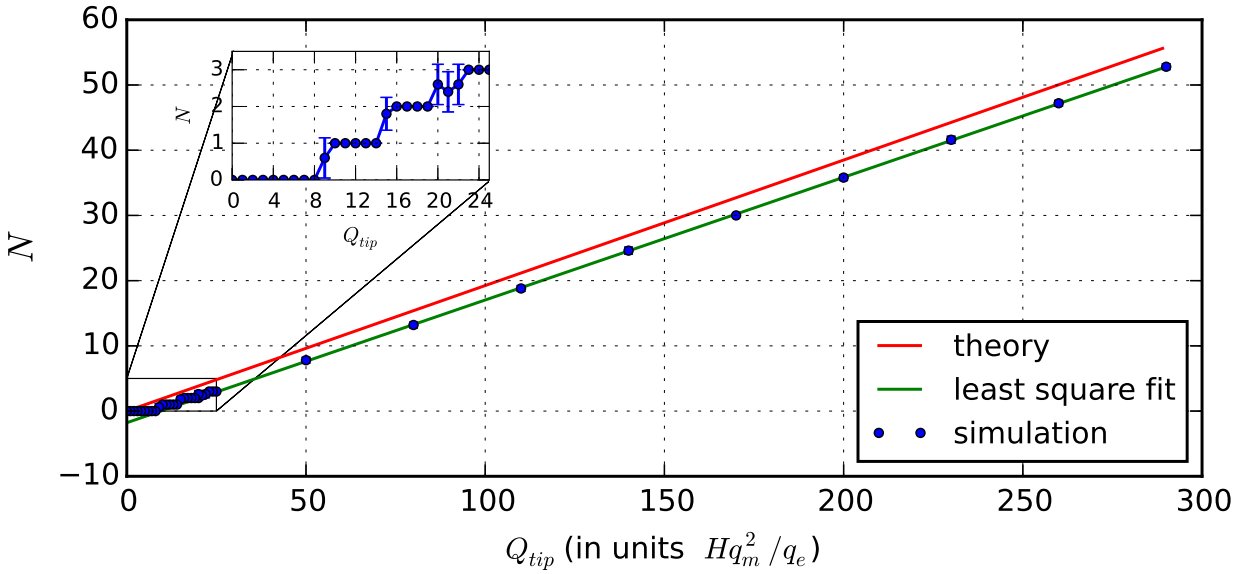


Рис. 2.8: График зависимости N от Q_{tip}. Вставка показывает увеличенную часть графика при $Q_{tip} = 0 \div 24Hq_m^2/q_e$; из нее можно определить критический заряд $Q_{tip}^{crit} \approx 9Hq_m^2/q_e$.

делирование дает $Q_{tip}^{crit} \approx 9q_m^2 H/q_e$ (см. вставку на рис. 2.8). Заметим, что в непрерывном пределе сколь угодно малое значение заряда Q_{tip} должно приводить к появлению малого (< 1) числа вихрей, то есть критическое значение заряда равно 0. Это расхождение $\Delta Q = Q_{tip}^{crit}$ между континуальной теорией и результатами моделирования для Q_{tip} при фиксированном N приводит к расхождению в обратной зависимости $N(Q_{tip})$, и, в среднем, несоответствие должно быть порядка $\Delta N \approx \Delta Q q_e/3^{3/2}q_m^2 H \approx 1.7$; кроме того, наблюдаемая ступенчатая зависимость дает дополнительное отклонение ± 1 от непрерывной формулы (2.36), что объясняет вышеупомянутое несоответствие $\Delta N \approx 3.2$ между аналитической формулой и численным моделированием для $Q_{tip}q_e/H = 240q_m^2$.

2.5.3 Поляризуемость больших образцов

В этом разделе мы численно найдем температурную зависимость поляризуемости больших образцов в низкотемпературном пределе. Чтобы найти поляризуемость, с помощью алгоритма имитации отжига было проведено мно-

гократное охлаждение системы при фиксированных малых значениях электрического поля E, лежащего в плоскости образца ($E \parallel x$), которое было независимо повторено для разных значений E (присутствие электрического поля кантилевера, создающего магнитную структуру, подразумевается). Из теоретического анализа раздела 2.4 мы ожидаем, что поляризуемость должна сильно зависесть от температуры.

Рисунок 2.9 показывает зависимость x- и y- компонент дипольного момента от приложенного электрического поля при фиксированной низкой температуре $T = 0.001 q_m^2$. Линейная аппроксимация зависимости $p_x(E) = \alpha_{num} E$ дает поляризуемость $\alpha_{num} = 1388.9 H^2 q_e^2 / q_m^2$.

На рисунке 2.10 показана температурная зависимость поляризуемости в логарифмических координатах, которая в пределе малых $\beta = 1/T$ может быть приближена как $\ln \alpha \approx 0.74 \ln(\beta q_m^2) + const$. Эта зависимость согласуется с оценкой (2.55), при выборе $\eta \approx 0.26$, что дает $\alpha \sim 1/T^{0.74}$. Используя точную численную диагонализацию Гессиана для данной системы, мы нашли его спектр собственных значений, представленный на рис. 2.11 (см. также формулу (2.53)), из которого, действительно, степень $\eta \approx 0.25$.

Мы предполагаем, что такая нетривиальная температурная зависимость поляризуемости является характерной для конечных кластеров. Для стекольных систем, то есть таких, ландшафт потенциальной энергии которых обладает множеством локальных минимумов, близких к глобальному, добавление одной ВА пары к системе полностью изменяет этот ландшафт и его локальные минимумы, но сохраняет статистическое распределение собственных значений Гессиана (2.53). Тепловые флуктуации размывают мелкие детали этого энергетического ландшафта, эффективно обрезая низколежащие нормальные моды $K_i \lesssim T/L^2$, что делает поляризуемость системы сильно зависящей от температуры со степенной зависимостью $\alpha \sim 1/T^{1-\eta}$. Показатель η не является универсальным и определяется плотностью собственных значений

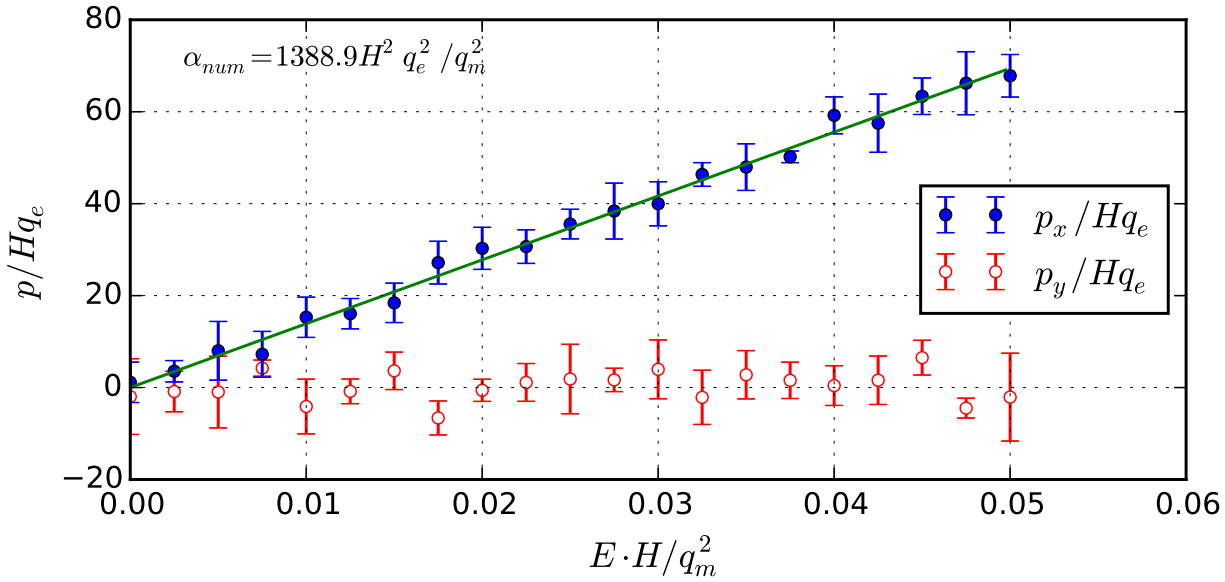


Рис. 2.9: График зависимости дипольного момента p от приложенного дополнительного электрического поля E в плоскости образца при $T = 0.001q_m^2$ для большой системы ($Q_{tip}q_e/H = 200q_m^2$, $N = 36$). Закрашенные (синие) кружки показывают зависимость p_x (компоненты, параллельной электрическому полю), незакрашенные (красные) – p_y (компоненты, перпендикулярной электрическому полю).

Гессиана. Например, для однокомпонентной двумерной плазмы, ограниченной квадратичным внешним потенциалом, с частицами, взаимодействующими через трехмерный кулоновский потенциал $1/r$ [101], наше моделирование дает $D(K) \sim 1/K^{0.33}$, то есть для этого случая из (2.53) следует, что $\eta \approx 0.67$.

2.6 Возможности экспериментального наблюдения

В этом разделе мы рассмотрим возможности экспериментального наблюдения описанных эффектов и для типичных материалов сделаем оценки электрического поля, необходимого для создания мультивихревых структур. Наиболее подходящими кандидатами материалов со значительным взаимодействием электрической и магнитной подсистем являются мультиферроики. Однако, большинство известных мультиферроиков являются антиферромагнетиками, где роль параметра порядка играет разность намагнитченностей

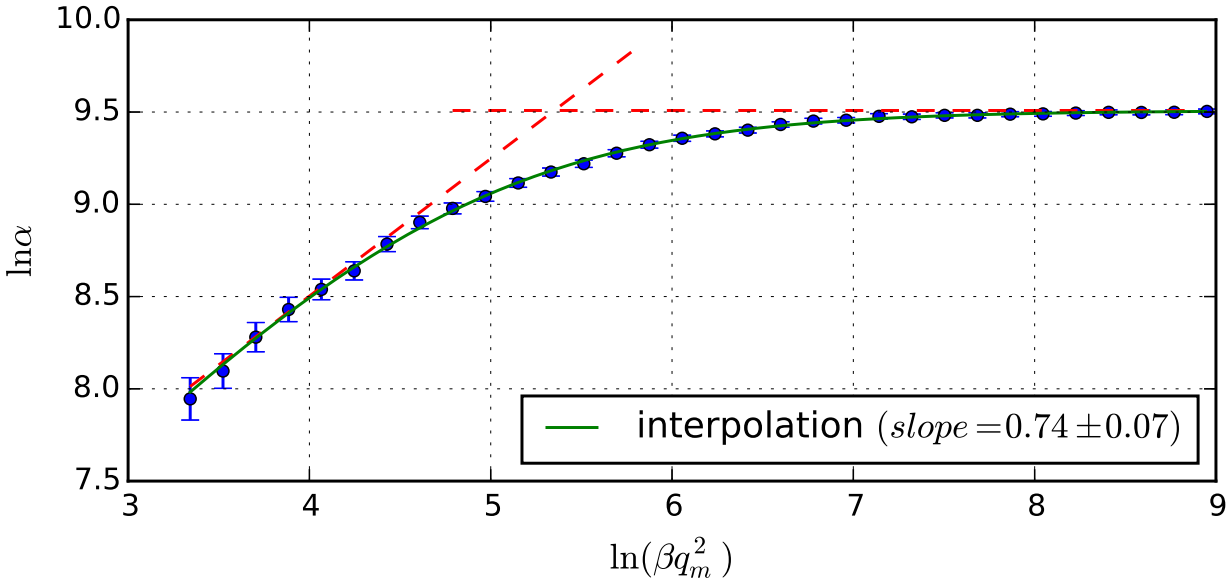


Рис. 2.10: Графики зависимости поляризуемости α от обратной температуры β в двойных логарифмических координатах: $\ln\alpha$ в зависимости от $\ln(\beta q_m^2)$, для значений параметров $Q_{tip}q_e/H = 200q_m^2$, $N = 36$. Символы показывают данные с их стандартным отклонением; сплошной линией показан наилучший фитинг. Угловой коэффициент наклонной пунктирной прямой равен 0.74 ± 0.07.

двух подрешеток. Теоретические результаты, представленные в предыдущих разделах, применимы к ним, по крайней мере, качественно, если не количественно; под вихрем/антивихрем в антиферромагнетике мы понимаем теперь вращение антиферромагнитного параметра порядка на $\pm 2\pi$. Для более удобного сравнения с экспериментальными данными, в данном разделе мы пользуемся единицами СИ; для перевода из гауссовских единиц в СИ единиц необходимо сделать следующие подстановки: $\chi_e \to \chi_e\epsilon_0$, $Q_{tip} \to Q_{tip}/4\pi\epsilon_0$.

2.6.1 Теоретические оценки для реальных материалов

Сначала обсудим материалы, в которых, предположительно, можно обнаружить предсказанные эффекты. Для создания “магнитных атомов” электрическим полем в тонкой пленке требуется достаточно сильная связь между электрической и магнитной подсистемами. Ниже мы делаем оценки для муль-

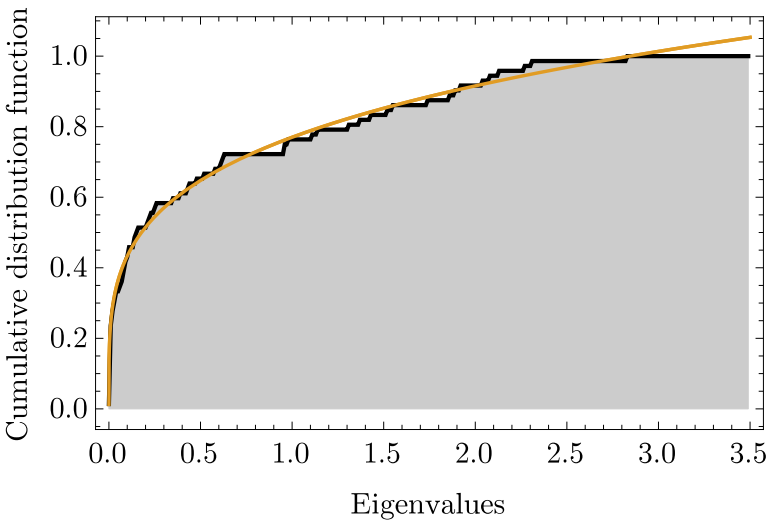


Рис. 2.11: Кумулятивная функция распределения собственных значений: $\int_0^K D(K)dK$ в зависимости от K. Толстая ломаная линия соответствует точной численной диагонализации Гессиана размерностью 72×72; тонкая линия – наилучшая подгонка $\sim K^{0.25}$; это приводит к зависимости $D(K) \sim K^{-0.75}$ (см. формулу (2.53)).

тиферроиков I и II рода.

Мультиферроики I рода. Рассмотрим прототипический мультиферроик I рода, феррит фисмута $BiFeO_3$. Его монокристаллы ромбоэдричны при комнатной температуре и обладают пространственной группой симметрии $R3c$ с псевдокубической элементарной ячейкой с $a \approx 4\,\text{Å}$ и антиферромагнитной структурой G-типа [102]; его спонтанная поляризация $P \simeq 1\,\text{C/m}^2$ [103, 104], и она вызывает циклоидальное вращение антиферромагнитного параметра порядка с длиной волны $\lambda \simeq 620 \div 640\,\text{Å}$ [102, 105]; диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 1 + \chi_e \simeq 50$ [106].

Чтобы оценить константу α, характеризующую силу обменного взаимодействия (см. формулу (2.3)), мы используем константу обменного взаимодействия ближайших соседей Fe-Fe, $J = 10\,\text{meV}$ [107]. Следовательно, для ОЦК псевдокубической установки получаем константу обменной жесткости $A \equiv \alpha M_0^2/2 = Ja^2/V = 4\,\text{pJ/m}$, что согласуется с оценкой, выведенной из температуры Нееля [108] ($V \approx a^3$ – объем псевдокубической элементарной ячейки).

Теперь, используя (2.3), (2.4), (2.7) и полагая $\phi = kx$, где $k = 2\pi/\lambda$, получим

$$w_{me} + w_m = -\gamma P_y k M_0^2 + \frac{\alpha}{2} k^2 M_0^2 \tag{2.56}$$

Минимизируя эту плотность энергии по k, получим $k = \gamma P_y/\alpha = 2\gamma P_y M_0^2/A$ или

$$\gamma M_0^2 = kA/2P \equiv \pi A/\lambda P \simeq 0.8\,\mathrm{mV}. \tag{2.57}$$

Используя оценку (2.57) получим, что $\chi_e \epsilon_0 \gamma^2 M_0^2 \simeq 3 \times 10^{-16}$ J/m, что намного меньше чем $\alpha M_0^2 \simeq 8 \times 10^{-12}$ J/m. Эта малость оправдывает примененное упрощение формулы (3.2) в разделе 2.1. Теперь из (2.11) с использованием $h = a \approx 4\,\text{Å}$ находим электрический заряд вихря на один слой $q_e \approx 9 \times 10^{-22}\,\mathrm{C} \approx 0.006e$ (e – заряд электрона). Из (2.17) находим значение "магнитного заряда" и используя (2.30) находим критический потенциал наконечника, необходимый для создания первой BA пары: $\varphi_0^{crit} \simeq 20\,\mathrm{V} \times \ln(H/a)$. Используя (2.29) с $\ln(H/a) \sim 1$ мы также можем оценить заряд примеси, необходимый для создания одной BA пары в моноатомном слое, как $Q_{impurity}^{crit} \simeq 10^{-18}\,\mathrm{C} \approx 6e$.

Мультиферроики II рода с неколлинеарным магнитным упорядочением выглядят довольно естественными кандидатами для наблюдения "магнитных атомов". Среди них – спиральные гелимагнетики, такие как $TbMnO_3$, $DyMnO_3$, $Eu_{0.75}Y_{0.25}MnO_3$, $Ni_3V_2O_8$, $MnWO_4$ и т. д., см. обзоры [27, 109]. Хотя основное состояние в спиральных гелимагнетиках отличается от коллинеарного, над этим основным состоянием также могут быть созданы вихревые возбуждения.

Здесь мы делаем оценки для прототипического мультиферроика II рода, манганита тербия $TbMnO_3$. При комнатной температуре он имеет орторомбически искаженную перовскитную структуру с пространственной группой $Pbnm$ и параметрами решетки $a = 5.3\,\text{Å}$, $b = 5.86\,\text{Å}$, $c = 7.49\,\text{Å}$ [110]. Ниже

температуры Нееля $T_N = 41\,\mathrm{K}$ появляется магнитный порядок с образованием синусоидальной волны спиновой плотности, вызванной фрустрациями; электрической поляризации при этом не создается. Ниже $T = 28\,\mathrm{K}$ система переходит в состояние с магнитной циклоидой, вращающейся в легкой плоскости bc с волновым вектором $k = \pi(0, 0.28, 0)$ (и соответствующей длиной волны $\lambda = 2\pi/k \approx 42\,\text{Å} \approx 7b$), которая индуцирует электрическую поляризацию, растущую с понижением температуры и достигающую значения $P = 8 \times 10^{-4}\,\mathrm{C/m^2}$ при $T = 10$ K. Главные компоненты тензора диэлектрические проницаемости равны $\epsilon_a \simeq 24$, $\epsilon_b \simeq 23$, $\epsilon_c \simeq 29$ [111]; для оценок мы используем усредненное значение $\epsilon_{bc} = (\epsilon_b + \epsilon_c)/2 = 26 = 1 + 4\pi\chi_e$. Используя (2.6), вычислим константу магнитоэлектрической связи

$$\gamma M_0^2 = P/\chi_e \epsilon_0 k \simeq 2.4\,\mathrm{mV}. \tag{2.58}$$

Ожидаемо, ее значение больше, чем для мультиферроика I рода (2.57), хотя разница не такая уж значительная: для манганита тербия магнитоэлектрическое взаимодействие в ≈ 3 раза сильнее. Из (2.11) также найдем электрический заряд вихревой линии, приходящийся на один слой $q_e \approx 1.8 \times 10^{-21}$ C $\approx 0.01e$.

Для оценки обменной жесткости и “магнитного заряда” мы используем значения микроскопических обменных констант. Литературные данные по ним достаточно противоречивы, причем разнятся даже относительные величины обменных констант вдоль разных направлений элементарной ячейки [112, 113, 114, 115]. Для оценки мы используем обменную константу в направлении c, свободном от магнитных фрустраций, $J_c = 1.5\,\mathrm{meV}$, что согласуется с оценкой исходя из температуры Нееля [116] $k_B T_N \simeq Jz/3$ (z – число ближайших соседей для магнитного атома). Поэтому мы используем значение обменной жесткости $A = J_c c^2/2V \simeq 0.3\,\mathrm{pJ/m}$.

Используя (2.30), находим критическое напряжение наконечника, необходимое для создания первой ВА пары $\varphi_0^{crit} \simeq 0.3$ V $\times \ln(H/a)$. Также из (2.29)

с $\ln(H/a) \sim 1$, можно оценить заряд примеси, необходимый для создания ВА пары в монослое материала: $Q^{crit}_{impurity} \simeq 1.6 \times 10^{-20}\,\mathrm{C} \approx 0.1e$.

Другие материалы. В принципе, существует достаточно широкий класс материалов, в которых магнитные структуры могут создаваться электрическим полем, причем мультиферроики составляют лишь его подкласс: потенциально в любом магнитном изоляторе могут наблюдаться магнитоэлектрические явления, если это допускается его симметрией [25]. Одним из микроскопических механизмов магнитоэлектрической связи является взаимодействие Дзялошинского-Мории, которое присутствует, например, в слабых ферромагнетиках и магнитных материалах с геликоидальной структурой.

2.6.2 Магнитная анизотропия

Здесь мы обсудим ограничения на нашу теоретическую модель, возникающие из-за возможности создания кантилевером внеплоскостной поляризации. Заряженный наконечник индуцирует компоненту электрического поля, перпендикулярную плоскости, и, следовательно, поперечную электрическую поляризацию; последняя может, в свою очередь, индуцировать магнитную циклоиду с компонентой намагниченности перпендикулярной плоскости (но волновым вектором, лежащим в плоскости).

Для того чтобы указанный эффект был незначительным, в образце должна присутствовать анизотропия типа легкая плоскость, которая, в первую очередь, должна удерживать намагниченность в плоскости и в отсутствие наконечника: например, одноионная анизотропия или анизотропия связанная с геометрией образца (для ферромагнитных систем она вызвана энергией размагничивания, но для антиферромагнитных систем также ожидаются слабые эффекты поверхностной анизотропии [117]).

Во-первых, рассмотрим систему с тетрагональной или орторомбической симметрией, где есть легкая плоскость, и энергия магнитной анизотропии от-

носительно велика. Оценим необходимое поперечное электрическое поле, которое может вызвать спираль в "трудной" плоскости (плоскости, содержащей ось трудного намагничивания). В качестве примера возьмем манганит тербия $TbMnO_3$, исследованный в предыдущем разделе. В основном состоянии он обладает циклоидальной спиральной структурой в плоскости bc (поэтому трудной, в данном случае, является ось a); для оценки возьмем параметр анизотропии $K_{an} \lesssim 0.1J \simeq 0.1$ meV [112] в расчете на один магнитный атом Mn.

Пусть электрическое поле достаточно сильно, чтобы индуцировать магнитную циклоиду с компонентой намагниченности вне плоскости. Используя (2.3) и (2.4), оценим выигрыш электрической энергии, возникающий из-за того, что магнитная циклоида индуцирует внеплоскостную поляризацию $P_z = \epsilon_0 \chi_e E_z = \epsilon_0 \chi_e E_{0z}/\epsilon \approx \epsilon_0 E_{0z}$ (z – ось перпендикулярная плоскости, E_z – поле внутри пленки, E_{0z} – поле в вакууме, $\epsilon = 1 + \chi_e \approx \chi_e$):

$$w_m + w_{me} \simeq -\gamma \epsilon_0 E_{0z} k M_0^2 + \frac{\alpha}{2} M_0^2 k^2 \tag{2.59}$$

Минимизируя эту плотность энергии по отношению к волновому вектору k, получим $k \simeq \gamma \epsilon_0 E_{0z}/\alpha$; поэтому (2.59) преобразуется в

$$w_m + w_{me} \simeq -\frac{\gamma^2 \epsilon_0^2 E_{0z}^2 M_0^2}{2\alpha}, \tag{2.60}$$

что представляет собой плотность энергии, которую система получает при создании циклоидального состояния. При этом плотность энергии анизотропии системы возрастает на величину порядка:

$$w_{anisotr} \simeq 4 \times \frac{K_{an}}{2V}, \tag{2.61}$$

где множитель 4 возникает из-за четырех магнитных атомов Mn на элементарную ячейку $TbMnO_3$, имеющую объем $V = abc$, а множитель 2 в знаменателе обусловлен усреднением локальной энергии анизотропии $\sim \cos^2(kx)$ по направлению волнового вектора циклоиды $\parallel x$. Сравнивая между собой

выигрыш в электрической энергии (2.60) и проигрыш в энергии анизотропии (2.61), принимая во внимание типичные значения параметров для $TbMnO_3$, рассмотренные выше, получим следующую оценку для электрического поля, необходимого для создания магнитной циклоиды, вращающейся в "трудной" плоскости:

$$E_{0z} \gtrsim \frac{2\sqrt{\alpha K_{an}}}{\sqrt{V}\epsilon_0 \gamma M_0} \simeq 1.9 \times 10^{10}\,\mathrm{V/m}.$$

Для сравнения, если наконечник кантилевера размещен на высоте $H = 10\,\mathrm{nm}$ над пленкой, то чтобы создать столь сильное электрическое поле, которое будет влиять на M_z компоненту намагниченности, напряжение наконечника должно быть равно $\varphi = E_{0z}H \approx 200\,\mathrm{V}$ (или еще больше при больших значениях H). Это значительно больше критического напряжения $0.3\,\mathrm{V} \times \ln(H/a)$ необходимого для формирования BA пары, согласно оценкам из раздела 2.6.1. Таким образом, мы заключаем, что почти любое разумное ненулевое значение магнитной анизотропии типа легкая плоскость, защищает внутриплоскостное направление намагниченности, несмотря на возможную вызванную наконечником сильную компоненту электрического поля, перпендикулярную плоскости.

Для систем с очень слабой одноионной анизотропией или в отсутствие ее, например для $BiFeO_3$, где только поверхностные эффекты защищают внутриплоскостную намагниченность, достаточно сильная перпендикулярная составляющая электрического поля все же может приводить к появлению компоненты намагниченности, перпендикулярной плоскости образца.

Одним из способов избежать перпендикулярной компоненты намагниченности для таких систем является использование двух симметричных заряженных кантилеверов с обеих сторон пленки (рис. 2.12, $H \ll h$).

Однако, даже для геометрии с одним кантилевером (рис. 2.1) перпендикулярная компонента намагниченности будет локализована внутри области радиуса $\sim H$ (расстояние от наконечника до пленки). Это не повлияет на ча-

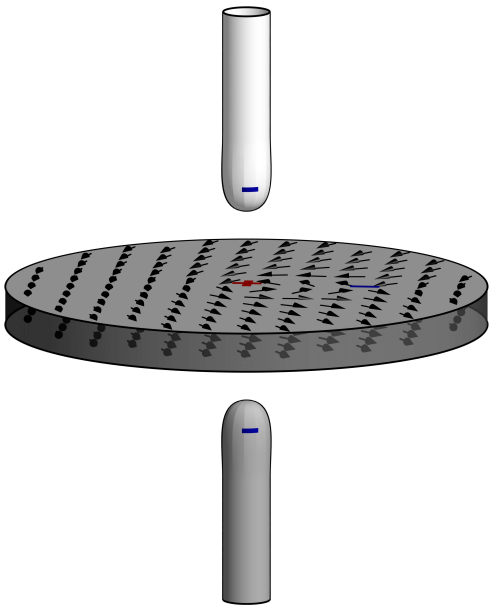


Рис. 2.12: Геометрия системы с двумя симметричными заряженными кантилеверами.

сти системы за пределами указанной области, вдали от кантилевера. Таким образом, ядро “магнитного атома”, состоящее из вихрей в области $r \lesssim H$, может претерпеть значительные изменения, но антивихревые оболочки сохранят свои качественные характеристики. Это произойдет из-за топологической природы вихревых возбуждений. Например, если анизотропия недостаточно сильна, в ядре вихрей намагниченность может выходить из плоскости; это сделает электрический заряд вихря более размазанным, но не повлияет на его величину по следующей причине. В качестве примера рассмотрим одиночный вихрь. При $R \gg H$ вблизи границы образца перпендикулярная составляющая электрического поля кантилевера мала (она убывает как $\sim 1/r^3$, в то время как параллельная компонента убывает только как $\sim 1/r^2$), поэтому она не повлияет на отрицательный граничный заряд. Значит, из сохранения заряда, положительный заряд в вихревом ядре должен оставаться неизменным.

2.7 Обсуждение и выводы к главе 2.

В магнитоэлектрических материалах взаимодействие магнитной и электрической подсистем позволяет создавать сложные магнитные структуры с помощью электрического поля. В этой главе представлен аналитический и численный анализ таких квазидвумерных материалов, где мультивихревые структуры ("магнитные атомы"), состоящие из магнитных вихрей и антивихрей могут создаваться сильным электрическим полем, изучена их структура и вычислена поляризуемость.

Когда локализованное электрическое поле, создаваемое иглой кантилевера, превышает некоторое критическое значение, образуется первая пара вихрь-антивихрь; с увеличением электрического поля из "магнитного вакуума" магнитоэлектрической пленки создается все больше вихрей и антивихрей. Мы нашли аналитически и подтвердили численно критическое напряжение, необходимое для создания первой вихрь-антивихревой пары, а также нашли зависимость числа вихревых пар от приложенного напряжения. Показано, что энергетически выгодным становится образование "магнитного атома", ядро которого состоит из вихрей, выстроенных в решетчатую структуру с ближним порядком, наподобие вихревой решетки Абрикосова; оно окружено антивихрями, образующими внешние концентрические круговые "оболочки". Получен профиль распределения плотности вихрей в непрерывном приближении.

Так как в исследованных здесь магнитоэлектрических материалах вихри несут положительный, а антивихри – отрицательный электрический заряды, то дополнительное слабое электрическое поле в плоскости пленки будет приводить к сдвигу вихрей и антивихрей в противоположных направлениях, создавая электрическую поляризацию. Нами изучена температурная зависимость поляризуемости таких "магнитных атомов". Поляризуемость конечного вихрь-антивихревого кластера определяется собственными значениями его

Гессиана. Мы проанализировали свойства нормальных мод кластера, используя результаты теории евклидовых случайных матриц. Мы предполагаем, что степенное поведение поляризуемости $\alpha \sim 1/T^{1-\eta}$ является характерным для "стекольных" конечных классических систем, обладающих многими конфигурациями с локальными минимумами энергии вблизи энергии основного состояния. Нами показано, что степень η не является универсальной и зависит от формы потенциала и размерности системы. Тепловые флуктуации размывают мелкие детали энергетического ландшафта, эффективно отсекая низколежащие собственные моды. С помощью точной численной диагонализации Гессиана достаточно большой системы, получена плотность его собственных значений, из которой получено, что поляризуемость зависит от температуры степенным образом $\alpha \sim 1/T^{1-\eta}$ ($\eta \approx 0.25$), и это подтверждено прямым моделированием методом Монте-Карло.

Нами предложены кандидаты материалов для экспериментальной реализации представленного теоретического и численного анализа. Описанные мультивихревые структуры могут быть созданы в тонких пленках мультиферроиков, например, в спиральных гелимагнетиках (таких как $TbMnO_3$, $Ni_3V_2O_8$, и других [27]). Хотя основное состояние в спиральных гелимагнетиках отличается от коллинеарного, не смотря на это, даже над таким нетривиальным основным состоянием возможно создание вихревых возбуждений. Кроме того, материалы, в которых магнитные вихри могут создаваться электрическим полем, не ограничиваются только мультиферроиками: потенциально любой магнитный изолятор может проявлять магнитоэлектрические свойства, когда это допускается его симметрией [25].

Для создания локально сильного электрического поля могут быть использованы методы атомной силовой микроскопии (АСМ). Прямое наблюдение за образованием магнитных вихревых структур может быть выполнено с помощью лоренцовской просвечивающей электронной микроскопии с высоким

разрешением [118, 119] в сочетании с АСМ [120]. В качестве альтернативы можно использовать комбинированные АФМ/СТМ установки [121, 122]. Для обнаружения собственных мод индуцированной вихрь-антивихревой системы можно использовать ряд косвенных методов. Например, они могут быть найдены путем измерения электрической поляризации в слабом параллельном электрическом поле (как это аналитически исследовано в разделе 2.4 и численно в разделе 2.5), но также путем измерения теплоемкости или спектра поглощения микроволн [123].

Глава 3

Фазовые переходы в ансамблях солитонов, индуцированных оптической или электрической накачкой, в квазиодномерных системах с нарушением дискретной симметрии

Тот факт, что солитоны обладают такими квантовыми числами как заряд или спин, позволяет управлять их концентрацией и наблюдать за ними. Электростатическое легирование (см. обзоры [3] и [4]) должно приводить к появлению стабильных 2D ансамблей одинаково заряженных кинков в тонком (вплоть до атомарного масштаба) поверхностном слое. Оптическая накачка должна приводить сначала к равному числу противоположно заряженных солитонов, которые при дальнейших столкновениях будут преобразовываться в ансамбль нейтральных обладающих спином солитонов (обычно, они имеют меньшую энергию, чем заряженные [124]). Вслед за этим неизбежно последует их рекомбинация, например, через образование экситонов [125]. Однако испускание оптического излучения займет много времени (более наносекунды), которое может быть дополнительно увеличено из-за того, что нейтральные несущие спин солитоны могут рекомбинировать только через триплетный ка-

нал, что достоверно установлено в оптике проводящих полимеров [124, 126]. Таким образом, при очень быстрой накачке, как систему противоположно заряженных, так и спиновых солитонов, можно рассматривать как квазистационарные, в которых число частиц уменьшается достаточно медленно. В экспериментах по электростатическому легированию число солитонов точно сохраняется и им можно управлять, а также измерять его.

Такие ансамбли солитонов должны иметь необычную фазовую диаграмму, с несколькими линиями фазовых переходов, которые система неизбежно пересекает в процессе эволюции или изменения концентрации или температуры. Изучение этих переходов является основной целью данной главы, основанной на работе [127].

3.1 Взаимодействие и фазовые переходы в ансамблях солитонов.

На основе приведенных в разделе 1.3 экспериментальных и теоретических результатов физики солитонов, мы рассмотрим систему, в которой солитоны являются самым низкоэнергитическими (по сравнению с электронами проводимости) возмущениями, переносящими заряд или спин. В данной главе мы исследуем случай нарушения дискретной симметрии, который является очень распространенным и может проявляться, как в димеризация связей (при пайерлсовском и аналогичных переходах) так и узлов (при переходах с зарядовым упорядочением или диспропорционированием). Как было описано в разделе 1.3 такие системы обладают, как правило, тремя типами солитонов: двумя бесспиновыми с зарядами $\pm e$ и нейтральным солитоном со спином 1/2 (есть и исключения, например, в сегнетоэлектрических системах все солитоны должны нести нецелые заряды – см. недавний обзор [128]). С появлением такого солитона параметр порядка меняет знак, отсюда происходит

второе название “амплитудный кинк” (то есть перегиб) или просто “кинк”. На протяжении всей диссертации мы будем рассматривать только амплитудные солитоны, поэтому названия “солитон” и “кинк” мы будем использовать как синонимы.

3.1.1 Взаимодействие между солитонами

Солитоны, также как и обычные электроны, участвуют в разных видах взаимодействий, как между собой, а так и с решеткой. Важное в данном случае кулоновское взаимодействие (КВ) может быть заэкранировано или не заэкранировано внешними носителями заряда, и мы рассмотрим оба этих случая. Но помимо него, присутствует необычное сверх-дальнодействующее взаимодействие, присущее солитонам, как топологически нетривиальным объектам. Солитон является одномерной границей, прерывающей правильное упорядочение между цепочками. Это приводит к появлению энергии конфайнмента Fl, которая линейно растет с расстоянием l между солитонами при не зависящей от l силе притяжения F (рис. 3.1). Эта энергия доминирует на больших расстояниях, даже если она локально мала, как для системы слабо взаимодействующих цепочек.

В некоторых случаях вырождение основного состояния может быть снято глобально даже для случая одной цепочки. Ярким примером служит цис-полиацетилен [50, 125, 55], где солитоны всегда связаны в пары. В случае непрерывной симметрии упорядочение, нарушенное амплитудным кинком, может быть восстановлено путем изменения фазы комплексного параметра порядка $\Psi(x)$, которое локализовано в хвостах солитона длины $l_{phase} \sim T_c^{-1}$, где T_c - температура упорядочения, обусловленная межцепочечной связью. Но везде, кроме истинно одномерных систем, таких как изолированные атомные цепочки, происходит локальное снятие вырождения, возникающее из-за межцепочечных взаимодействий, которые отвечают за установление дальнего

порядка в двух или трех измерениях. А именно, энергия системы повышается на энергию межцепочечного упорядочения $J_\perp$ (на единицу продольной постоянной решетки длины $a_\parallel$), если смежные области в соседних цепочках неправильно скоррелированы.

Взаимодействие конфайнмента между солитонами определяет промежуточные фазы и кинетику агрегации неравновесных (например, оптически индуцированных) доменов в упорядоченную фазу.

3.1.2 Качественное описание фазовых переходов в ансамблях нейтральных солитонов

Рассмотрим влияние слабого упорядочивающего взаимодействия между цепочками (в 2D и 3D) на состояние и статистические свойства кинков [129]. Слабая межцепочечная связь практически не влияет на структуру ядра солитона, но ниже температуры упорядочения T_1 ее роль оказывается определяющей на больших расстояниях. Поскольку каждый кинк отделяет два основных состояния системы, он нарушает корреляцию между цепочками. В результате, система теряет энергию $2J_\perp$ приходящуюся на продольную постоянную решетки $a_{||}$, и полная энергия увеличивается пропорционально расстоянию от солитона. Как видно из рис. 3.1, энергия растет как при увеличении расстояния между двумя солитонами на одной цепочке, так и для солитонов на соседних цепочках. Это приводит к тенденции образования бикинков на одной цепочке и к агрегации солитонов в стенки на разных цепочках соответственно. В результате этих двух различных тенденций, при понижении температуры в системе проходит два фазовых перехода: связывание солитонов в пары при $T = T_1$ и агрегация пар между цепочками при меньшей $T = T_2 \ll T_1$. Для трехмерной системы температура T_2 является точкой истинного фазового перехода, ниже которой в системе прорастают плоские доменные стенки, проходящие через все поперечное сечение. Для двумерной

системы T_2 является лишь температурой кроссовера: при $T < T_2$ происходит постепенное увеличение поперечного размера спаренных стенок. Для конечных систем, моделирование которых проведено в данной диссертации, существует также зависящая от поперечных размеров образца температура T_F, при которой первая стенка прорастает через все поперечное сечение даже в 2D случае.

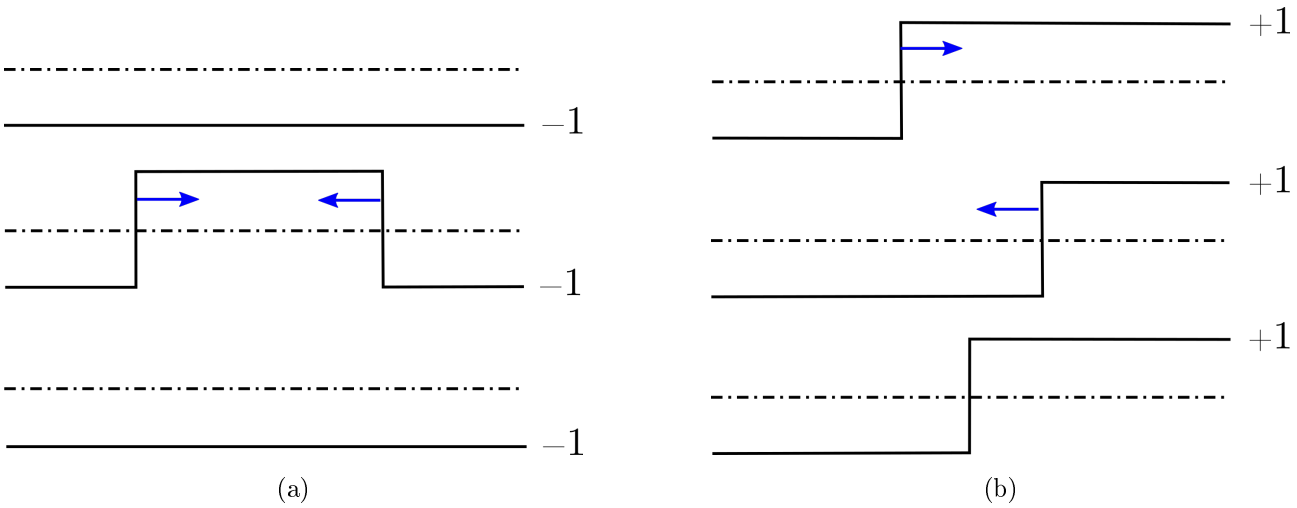
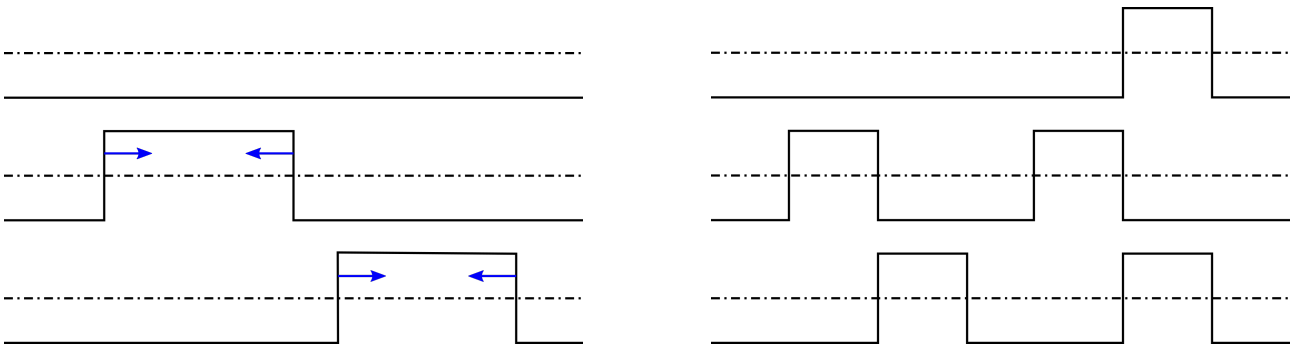


Рис. 3.1: Случай высоких температур $T > T_1$: существуют отдельные солитоны. Между ними уже есть дальнодействующее притяжение, делающее выгодным (a) связывание солитонов в пары на одной цепочке и (b) связывание солитонов в поперечные стенки на соседних цепочках. Горизонтальные прямые соответствуют основным состояниям системы с параметром порядка ± 1, вертикальные прямые показывают положения кинков, стрелками показаны действующие на них силы.

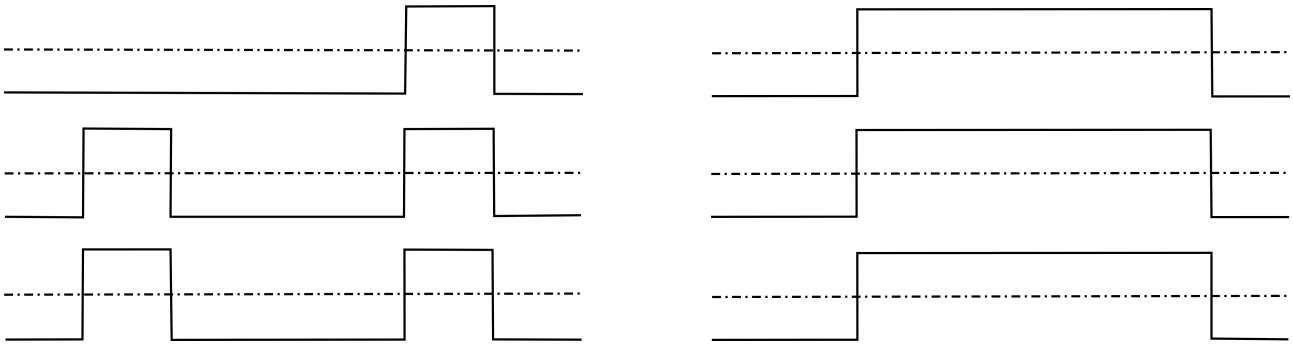
Эта качественная картина основана на точном решении, доступном для 2D-системы нейтральных солитонов с некоторыми качественными обобщениями на 3D системы [129]. Случай заряженных солитонов был рассмотрен в статьях Тебера и др. [130, 131], но с существенным ограничением: пары бисолитонов не должны перемещаться с одной цепочки на другую. В данной диссертации представлены результаты численного моделирования свободного от этого ограничения, которое также выполнено для сложного случая 3D систем как для нейтральных, так и заряженных ансамблей солитонов.

Не вдаваясь пока что в детали, мы имеем следующую картину равновес-



(a) (b)

Рис. 3.2: Случай промежуточных температуры $T_1 > T > T_2$: вместо газа отдельных солитонов наблюдается газ их связанных пар. (a) Размеры пар могут значительно меняться при $T_1 > T > J_\perp$; (b) пары имеют минимальный размер при $J_\perp > T > T_2$.



(a) (b)

Рис. 3.3: Случай низких температур $T < T_2$: (a) агрегация пар в растущие бисолитонные стенки, (b) раздвигание стенок и образование стенок из одиночных солитонов.

ных состояний. С понижением температуры при заданной концентрации кинков ν система проходит через последовательность двух фазовых переходов (при температурах $T = T_1, T_2$) и кроссовера между ними (при $T \sim J_\perp$), которые определяются тремя масштабами энергии: $J_\perp$ как локальная энергия межцепочечного упорядочения, большая энергия $J_\perp/\nu$ ($\propto T_1$) как нелокальная энергия конфайнмента солитонов и меньшая энергия $J_\perp/\ln(1/\nu)$ ($\propto T_2$) как характерная энергия их поперечной агрегации.

I. $T_1 \propto Fl \propto J_\perp/\nu$ (см. рис. 3.2). Для параметра порядка это обычный переход трехмерного упорядочения, реализованный в квазиодномерной системе. Однако для ансамбля солитонов – это переход конфайнмент-деконфайнмент,

который имеет место при понижении температуры ниже энергии среднего межцепочечного взаимодействия Fl ($l = a_{||}/\nu$ – среднее расстояние между солитонами). При понижении температуры до $T < T_1$, индивидуальные солитоны перестают существовать: они связываются в пары (бисолитоны) переменного размера, обладающие энергией порядка Fl_{bs}, где l_{bs} – средний размер бисолитона. T_1 можно также оценить как температуру, при которой средний размер бисолиона становится сравним со средним расстоянием между солитонами $l_{bs} \lesssim l$, то есть при $T < T_1$ появляются хорошо определенные связанные солитонные пары. С понижением температуры, расстояния между парами ограничиваются длинами порядка тепловой длины $l_T = T/F \ll l$, с редкими столкновениями между парами. При $T \ll J_\perp$ пары становятся тесно связанными, и их размеры больше не флуктуируют. Энергия конфайнмента уменьшается от высокотемпературных значений порядка $J_\perp$ на элементарную ячейку до $\sim J_\perp$ на один бисолитон. При этом размер пары l_{bs} сокращается от теплового l_T до нуль-температурного квантового размера l_q, такого что $Fl_q \sim \hbar^2/Ml_q^2$ (M – эффективная масса солитона).

Таким образом, на энергию T_1 можно смотреть с двух разных точек зрения. Для параметра порядка это обычная температура $T_1 = T_c$ фазового перехода второго рода в состояние с его ненулевым средним значением при $T < T_c$. Однако для солитонов – это температура перехода конфайнмент-деконфайнмент, ниже которой они становятся связанными в пары – бисолитоны.

II. $T_2 \propto J_\perp/\ln(1/\nu) < J_\perp$ (см. рис. 3.3). При этой температуре появляются первые доменные стенки, проходящие через все поперечное сечение образца. Когда температура опускается ниже $J_\perp$, бисолитоны начинают агрегатироваться в поперечные диски, размер которых увеличивается при понижении температуры и, наконец, при T_2 эти диски пересекают весь образец. Благодаря агрегации бисолитонов в доменные стенки система выигрывает в попе-

речной энергии конфейнмента, которая теперь не теряется вовсе – соседние цепочки теперь находятся в согласованных состояниях. Однако теряется энтропия, и этот баланс определяет температуру перехода T_2. Отдельные бисолитоны все еще сосуществуют со стенками при $T < T_2$, но с дальнейшим понижением температуры их количество уменьшается, обеспечивая материал для построения все большего числа макроскопических стенок.

Переход при $T = T_2$ можно рассматривать аналогично конденсации пара в заданном объеме, когда первые появляющиеся капли конденсата фиксируют химический потенциал (давление насыщенного пара). Другая аналогия – конденсация Бозе-Эйнштейна, но в реальном, а не в обратном пространстве. Действительно, при $T < J_\perp$ имеется газ "связанных пар" (бисолитонов) с энергиями $W_{bs} = Fl_{bs}$, химический потенциал которых μ_{bs} подстраивается для поддержания их общей концентрации постоянной $\nu_{bs}(\mu_{bs}, T) = \exp((\mu_{bs} - W_{bs})/T) = \nu/2$. При появлении первых макроскопических доменных стенок они становятся резервуарами для солитонов и фиксируют их химический потенциал $\mu_s = 0$, поэтому $\mu_{bs} = 2\mu_s = 0$. Тогда концентрация пар оказывается равна $\nu_{bs}(0, T) = \exp(-W_{bs}/T)$, и их число при $T < T_2$ стремится упасть ниже общего доступного их количества $\nu_{bs} = \nu/2$. Разница $\delta\nu = \nu - 2\nu_{bs}(0, T)$ показывает число солитонов, которые используются системой для построения доменных стенок; при этом расстояние $a_{||}/\delta\nu$, дает средний период полос доменов. Обратим внимание на следующее любопытное обстоятельство: при понижении температуры ниже T_2 среднее по объему значение параметра порядка исчезает, хотя оно остается ненулевым в каждом поперечном сечении. Таким образом, переход при $T = T_2$ происходит с эффективным понижением размерности системы D на единицу! Ниже мы покажем это явным образом с помощью эффективной модели Изинга с ограничениями.

3.1.3 Эволюция системы после оптической накачки

После того, как оптический импульс создал ансамбль солитонов, их средняя концентрация ν начинает эволюционировать как $\nu(t)$ как к тепловому равновесию при данной T, так и вместе с температурой $T(t)$. При этом система будет проходить через последовательность фазовых переходов или, по крайней мере, кроссоверов между различными фазами, которые были классифицированы выше. Схематичная траектория системы в переменных $\nu - T$ представлена на рис. 3.4.

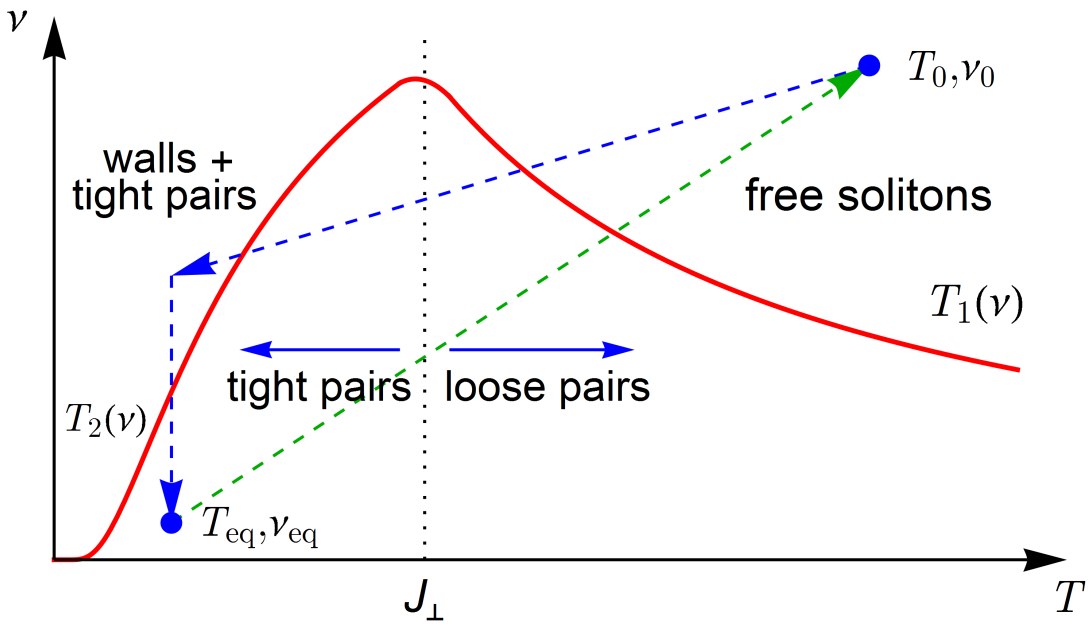


Рис. 3.4: Фазовая диаграмма ансамбля солитонов в переменных $\nu - T$ (концентрация и температура соответственно). Толстые сплошные кривые показывают линии фазовых переходов T_1 и T_2, вертикальная пунктирная линия показывает кроссовер при $T \approx J_\perp$, пунктирные стрелки схематически изображают траекторию накачки и последующей релаксации (происходящей с уменьшением суммарного ν и охлаждением).

До накачки при равновесной температуре окружающей среды T_{eq} солитоны присутствуют либо в виде свободных частиц, если $T_{eq} > T_{1eq}$, либо в виде связанных пар, если $T_{eq} < T_{1eq}$, где $T_{1eq} = T_1(\nu_{eq}) \approx E_s/\ln(E_s/J_\perp)$ – температура перехода упорядочения в отсутствии накачки (E_s – энергия ядра солитона). Однако, в любом случае, равновесная концентрация кинков мала:

$\nu_{eq} \sim \exp(-E_s/T)$ при $T_{eq} > T_{1eq}$ или $\nu_{bs} \sim \exp(-2E_s/T)$ при $T_{eq} < T_{1eq}$, так как для их создания должна быть затрачена энергии активации солитона E_s, которая велика по сравнению с малым масштабом межцепочечной энергии взаимодействия $J_\perp$, определяющим поведение системы при сохраняющемся числе солитонов.

Сразу после накачки начальная концентрация кинков ν_0 очень велика и начальная температура $T_0 > T_{eq}$ также высока (она может еще сильнее увеличиваться в промежуточные моменты времени из-за высвобождения энергии при релаксации возбуждений [58]). Предположим, что $\nu_0 > J_\perp/T_0$ так, что мы находимся в неупорядоченной фазе выше $T_1(\nu_0) \propto J_\perp/\nu_0$, то есть что накачка уничтожила дальний порядок и солитоны больше не связаны в пары. С течением времени как $\nu(t)$, так и $T(t)$ убывают, поэтому обе стороны последнего неравенства приближаются друг к другу, и в некоторый момент времени t_1, когда неравенство обращается в равенство $\nu(t_1) = J_\perp/T(t_1)$, происходит фазовый переход. Напомним, что эта температура значительно ниже термодинамической температуры перехода T_{1eq}, так как число солитонов все еще очень велико по сравнению с равновесным.

Для перехода T_2 ситуация, на первый взгляд, кажется менее определенной, так как его ожидаемая температура $T_2(\nu) = J_\perp/\ln(1/\nu)$ падает с уменьшением $\nu(t)$, в отличие от $T_1(\nu)$. Однако из-за того зависимость $T_2(\nu) \sim J_\perp/\ln(1/\nu)$ является только логарифмической, $T_2(t)$ меняется очень медленно, например как $\sim 1/t$ для экспоненциального спада ν, что гораздо медленнее любого ожидаемого уменьшения $T(t)$. Таким образом, второй фазовый переход также произойдет в некоторый момент времени t_2, когда $T(t_2) = J_\perp/\ln(1/\nu(t_2))$, при этом солитонные пары начнут агрегироваться в макроскопические доменные стенки. По прошествии достаточно большого времени релаксации, линия перехода T_2 будет обратно пересечена в процессе возвращения температуры к равновесной и полной аннигиляции избыточных

солитонов и “испарения” доменных стенок.

3.2 Основная модель

3.2.1 Отображение на модель Изинга с ограничениями

В модели без кулоновского взаимодействия конфигурационная энергия для параметра порядка $\eta_\alpha(x)$ равна (x – координата вдоль цепочки, α – индекс цепочки)

$$H_0 = \int dx \left(- \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} V_\perp \eta_\alpha(x) \eta_\beta(x) + \right.$$
$$\left. + \sum_\alpha \left(U(\eta_\alpha(x)) + C(\eta'_\alpha(x))^2 \right) \right) \qquad (3.1)$$

где $V_\perp$ – энергия межцепочечного упорядочения на единицу продольной длины (таким образом $2ZV_\perp$ – это удерживающая солитоны в парах сила F, где $Z = 2, 4$ - число ближайших соседней цепочки в размерности $D = 2, 3$) и $U(\eta)$ – двухямный потенциал с двумя симметричными минимумами, нормированными на $\eta = \pm 1$, который определяет два возможных эквивалентных основных состояния. Солитон представляет собой состояние с энергией E_s, которое соединяет эти два минимума; например $\eta(x) = \pm \tanh(x/a)$ или другое антисимметричное решение, определяемое конкуренцией второго и третьего членов в (3.1). Удобно дискретизовать координату вдоль цепочки $x \to x_n = n a_{||}$ с некоторым шагом $a_{||}$, значительно превышающим характерный размер ядра солитона a (мы выбираем $a_{||}$ равным предельной квантовой длине l_q – минимальному размеру бисолитона, см. раздел 3.1.2) и ввести изинговскую псевдоспиновую переменную $S_{n,\alpha} = \eta_\alpha(x_n)$. При таком выборе масштаба, солитоны с концентрацией $c_\alpha(x)$ на единицу длины цепочки будут видны как резкие скачки между двумя основными состояниями, число которых на одну

ячейку дискретизации $a_{||}$ задается решеточной функцией $\rho_{n,\alpha}$ такой, что [129]

$$\begin{aligned} c_\alpha(x)a_{||} = \rho_{n,\alpha} = \frac{1}{2}(1 - S_{n,\alpha}S_{n+1,\alpha}), \\ \langle\rho_{n,\alpha}\rangle = \nu = N_s/LH^{D-1}, \end{aligned} \tag{3.2}$$

где ν – средняя концентрация солитонов на один узел, N_s – их общее число, $L \times H^{D-1}$ – размеры образца в единицах $a_{||}$ и $a_\perp$, соответственно. Представление (3.2) подчеркивает тот факт, что солитон присутствует на узле n, α дуальной решетки, только если знаки $S_{n,\alpha}$ на соседних узлах различны: $S_{n,\alpha} = 1$ и $S_{n+1,\alpha} = -1$ или в обратном порядке. При рассмотрении только одной цепочки, S_n и ρ_n играют роли дуальных параметров порядка и беспорядка (см. например [132]). Среднюю плотность можно контролировать с помощью химического потенциала μ_s и, таким образом, мы приходим к энергии Гиббса $\widetilde{H}_0$ большого канонического ансамбля солитонов [129]:

$$\begin{aligned} \widetilde{H}_0 &= H_0 - \mu_s N_s = \\ &= -V_\perp \sum_{\langle\alpha,\beta\rangle} \int dx\, \eta_\alpha(x)\eta_\beta(x) + (E_s - \mu_s)N_s = \\ &= -J_\perp \sum_{\langle\alpha,\beta\rangle n} S_{n,\alpha}S_{n,\beta} - J_{||} \sum_{\alpha,n} (S_{n,\alpha}S_{n+1,\alpha} - 1), \end{aligned} \tag{3.3}$$

где

$$J_\perp = V_\perp a_{||}\ ,\ J_{||} = (E_s - \mu_s)/2. \tag{3.4}$$

В ряде случаев, особенно в случае легирования, солитоны могут обладать электрическим зарядом. Если экранирование внешними носителями достаточно велико, эти солитоны ведут себя как нейтральные. Однако в случае слабого или промежуточного экранирования, заряды солитонов необходимо рассматривать в явном виде. Поэтому, учитывая КВ, к гамильтониану можно добавить также кулоновскую энергию H_C [130]:

$$\widetilde{H} = \widetilde{H}_0 + H_C\ ,\ H_C = \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{n,m;\alpha,\beta} \frac{(\rho_{n,\alpha} - \nu)(\rho_{m,\beta} - \nu)}{|\mathbf{r}_{n,\alpha} - \mathbf{r}_{m,\beta}|}, \tag{3.5}$$

Где e – заряд электрона, ϵ – диэлектрическая постоянная, которую мы полагаем изотропной. Известно, что конкурирующие короткодействующее притягивающее и дальнодействующее отталкивающее взаимодействия могут привести к формированию многообразия сложных структур [133, 134, 135, 136]. В разделе 3.3, мы рассмотрим моделирование методом Монте-Карло как для случаев как нейтральных, так и заряженных солитонов.

Интересная особенность исследуемой системы заключается в том, что контролируя химический потенциал, большой канонический ансамбль солитонов в D-мерной системе может быть описан D-мерной моделью Изинга, в то время как канонический ансамбль описывается набором невзаимодействующих $(D-1)$-мерных моделей с общим ограничением. В такой анизотропной модели только межцепочечная энергия взаимодействия $J_{\perp}$ имеет физическое происхождение и является фиксированной, в то время как константа внутрицепочечного взаимодействия $J_{||}$ определяется химическим потенциалом и зависит от температуры. Поскольку интересующие нас физические ситуации соответствуют контролю концентрации ν, то ценой и источником самого интересного поведения является условие самосогласования, которое заключается в том, чтобы обратить функцию $\nu(\mu, T)$ в $\mu(\nu, T)$ и, следовательно, в том, что система может перемещаться только по специальной линии на поверхности параметров модели Изинга. Таким образом, в отсутствие КВ, мы можем использовать знания о модели Изинга (точное аналитическое решение в случае $D = 2$ и качественное поведение в случае $D = 3$) для исследования ансамбля солитонов. С другой стороны, как будет показано ниже, можно построить численный алгоритм, позволяющий непосредственно удерживать постоянным общее число солитонов. При этом, работая с каноническим ансамблем, мы получаем преимущество работы с $(D-1)$-мерной системой с присутствием только физического межцепочечного взаимодействия.

3.2.2 Оценки, основанные на эффективной модели Изинга для нейтральной системы

Рассмотрим эффективную модель Изинга с подстраиваемой константой $J_{||} = J_{||}(T, \nu)$ в размерности D. Концентрация солитонов всегда предполагается малой $\nu \ll 1$. В данном разделе мы найдем зависимости $J_{||}(T, \nu)$ для $D = 2$ и $D = 3$ в предельных случаях высоких и низких температур и сделаем оценки для $T_1(\nu)$ и $T_2(\nu)$. В высокотемпературном пределе $T \gg T_1 \gg J_\perp$ система является эффективно одномерной. Пренебрегая вкладом $J_\perp$ мы получаем, что энергия солитона равна $2J_{||}$, а вероятность найти солитон в данной точке дуальной решетки равна $\exp(-2J_{||}/T) \approx \nu$, поэтому

$$J_{||}(T, \nu) \approx \frac{T}{2} \ln \frac{1}{\nu} \tag{3.6}$$

является эффективной внутрицепочечной константой связи. Используя (3.4), мы видим, что химический потенциал солитона увеличивается с уменьшением T.

Экстраполируя это выражение в сторону более низкой температуры T_1, мы получаем оценку для T_1. В случае $D = 2$ из точного решения Онзагера [18] $\sinh(2J_\perp/T_1)\sinh(2J_{||}/T_1) = 1$ мы получаем $T_1 \sim 2J_\perp/\nu$, что, с точностью до численного множителя, согласуется с результатом работы [129]: $T_1 \approx 2J_\perp/\pi\nu$ (см. также Приложение Б.1). В случае $D = 3$ мы можем использовать приближение, в котором взаимодействие внутри цепочек рассматривается точно, а межцепочечное взаимодействие учитывается с помощью теории среднего поля. Для критической температуры анизотропной 3D модели Изинга этот подход дает [137, 138] $T_1 \approx 8J_\perp \exp\left(2J_{||}/T_1\right)$, откуда мы получаем $T_1 \sim 8J_\perp/\nu$. Мы видим, что критическая температура изинговского перехода как в 2D, так и в 3D случаях ведет себя как $T_1 \sim J_\perp/\nu$ при $\nu \to 0$, что оправдывает трактовку T_1 как температуры перехода конфайнмент-деконфайнмент.

Рассмотрим теперь противоположный предел низких температур $T \ll J_\perp$.

На первый взгляд может показаться, что при низких температурах система находится в очень простом состоянии, когда есть один упорядоченный домен, в котором имеются разреженные вкрапления перевернутых спинов, которые являются нашими плотно связанными бисолитонами с энергией $2ZJ_\perp$. Принимая во внимание химический потенциал и пренебрегая поправками, связанными с исключенным объемом, концентрация бисолитонов равна

$$\nu_{bs} = \exp\left(-\frac{4J_{||} + 2ZJ_\perp}{T}\right). \tag{3.7}$$

Так как это число фиксировано и равно $\nu_{bs} = \nu/2$, то понижение температуры должно быть скомпенсировано уменьшением $J_{||}$, которое ограничено снизу положительными значениями $J_{||} \geq 0$. Если, напротив, выполнялось бы $J_{||} < 0$ то система перешла бы в "антиферромагнитное" основное состояние с чередованием спинов вдоль каждой цепочки, следовательно, приобретая бесконечное число кинков. Это физически невозможно, а значит, должен образоваться новый резервуар где накапливаются солитоны, когда T падает ниже температуры $T_2(\nu)$, такой что $\nu = 2\exp(-2ZJ_\perp/T_2)$, то есть

$$T_2 \approx \frac{2ZJ_\perp}{\ln(2/\nu)}, \tag{3.8}$$

что согласуется как с оценкой (Б.3) для двумерных систем (с логарифмической точностью), так и с точным решением (Б.9), доступным в трехмерии. Этот новый резервуар можно рассматривать как систему полос (линий в 2D или плоскостей в 3D), которые поперечно пересекают весь образец, разделяя его объем на невзаимодействующих области чередующегося намагничивания. Более тщательный анализ [129] показывает, что $T = T_2$ является температурой истинного фазового перехода в 3D, тогда как в 2D это только характерная температура кроссовера для начала роста поперечных стенок конечной длины. Только для конечных 2D-систем ширины H поперечные стенки проходят через все сечение образца при $T_F \approx 4J_\perp/\ln(H/2\nu)$.

Оценки для $J_{||}(T,\nu)$ можно также найти в пределе $T \ll J_\perp$. В 2D при

$T \to 0$ и 3D при $T \to T_2 + 0$ мы находим, что $J_{||}$ стремится к нулю как (подробности вывода приведены в Приложении Б.1)

$$J_{||}(T,\nu) \propto T\exp(-2J_\perp/T)/\sqrt{\nu} \qquad (2D), \qquad (3.9)$$
$$J_{||}(T,\nu) \propto \nu\ln(1/\nu)\cdot(T-T_2) \qquad (3D).$$

Ниже T_2 в 3D поперечные слои не взаимодействуют и $J_{||}$ остается равной 0.

Эта картина и ее значительно усложненная версия, учитывающая дальнодействующее КВ будут численно проверены и обобщены в следующем разделе. Некоторые аналитические результаты как для нейтральных, так и для заряженных систем также приведены в приложении Б.1.

3.3 Численное моделирование

3.3.1 Моделирование методом Монте-Карло

В этом разделе мы рассмотрим моделирование ансамбля солитонов методом Монте-Карло (МК). Мы опишем изученные статистические свойства канонического ансамбля солитонов в широком диапазоне температур в двух и трех измерениях, как для нейтральных, так и для заряженных солитонов.

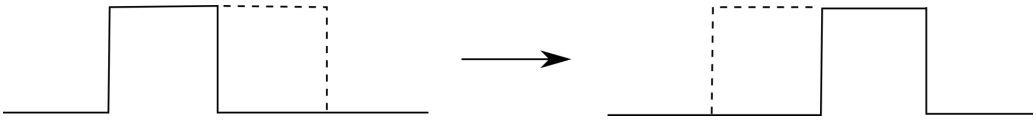
Для численного моделирования мы используем алгоритм, сохраняющий фиксированное количество солитонов, вместо использования самосогласованной константы $J_{||}(T,\nu)$, как это было сделано в предыдущем теоретическом разделе. Таким образом, сейчас мы работаем с каноническим ансамблем солитонов, держа постоянным их общее число в системе, при этом количество солитонов на одной цепочке может варьироваться. В пределе большого числа солитонов N_s этот подход эквивалентен подходу, использующему большой канонический ансамбль, так как для него флуктуация числа солитонов пропорциональна $\sim\sqrt{N_s} \ll N_s$.

Моделирование методом МК проводилось с использованием стандартного алгоритма Метрополиса с тремя типами элементарных шагов: (а) перемеще-

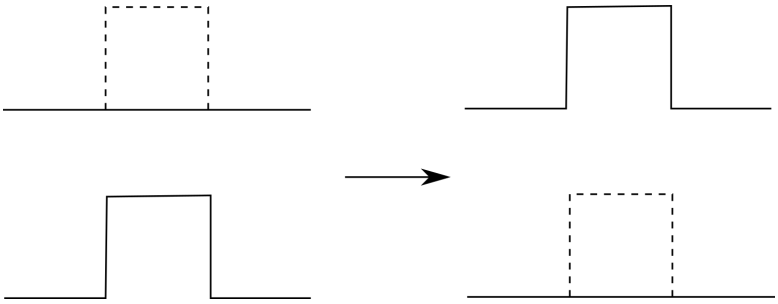
ние одиночного солитона вдоль цепочки (рис. 3.5a), (b) перемещение пары солитонов вдоль (рис. 3.5b) или (c) поперек цепочки (рис. 3.5c). Хотя движение типа (b) представляет собой сумму двух движений типа (a), тем не менее его удобно рассматривать в явном виде, поскольку оно значительно увеличивает долю принятых МК-шагов при низких температурах.



(a) Движение солитона вдоль цепочки



(b) Движение бисолитона поперек цепочки



(c) Движение бисолитона вдоль цепочки

Рис. 3.5: Три типа элементарных МК шагов (a-c). Левые панели показывают состояние системы перед совершенным шагом, правые – после него. Пунктирные линии показывают разницу между старой и новой конфигурациями.

Для случая заряженных солитонов нам необходимо учесть дальнодействующее КВ, что всегда является достаточно трудной задачей, в особенности для систем, подверженных образованию крупномасштабных структур, из-за появления локально нескомпенсированных зарядов. Поскольку нас интересует процесс образования стенок, а для бесконечной заряженной стенки электростатический потенциал растет линейно с расстоянием, то правильное наложение периодических граничных условий в случае КВ становится очень важным. Мы используем периодическую версию кулоновского гамильтониана (3.5) (для простоты при моделировании мы полагаем $a_{||} = a_{\perp}$), в котором

суммирование идет не только по всем попарным взаимодействиям внутри вычислительной сверхъячейки, но также между солитонами и их изображениями, а также между изображениями и нейтрализующим отрицательным фоном. На практике это сделано с помощью метода Лекнера [139] для случаев двумерных [140] и трехмерных [141] систем. Этот метод позволяет эффективно вычислить силу, действующую на данную частицу со стороны некоторой другой частицы и всех ее изображений, и, интегрируя силу, получить эффективный парный потенциал взаимодействия. Для ускорения работы алгоритма мы табулируем этот потенциал.

Поскольку КВ является дальнодействующим, расчет изменения энергии ΔE_C на каждом МК-шаге является очень времянезатратным. Чтобы справиться с этой проблемой, мы используем два разных подхода. Когда доля принятых МК-шагов относительно велика, мы используем первый (стандартный) подход: при каждом пробном МК-шаге мы пересчитываем кулоновскую энергию сдвинутого солитона по отношению к другим солитонам, и далее шаг принимается или отвергается. Однако при низких температурах, когда доля приятых МК-шагов становится низкой, оказывается, что этот подход неэффективен, так как большое количество вычислений изменения энергии для отклоненных шагов затрачивается впустую. Поэтому при низких температурах (когда доля принятых МК-шагов низка) мы используем другой подход [142, 143]: вместо пересчета энергии взаимодействия сдвинутого солитона с каждым солитоном в системе на каждом пробном МК-шаге (вычислительная стоимость чего есть $O(N_s \times N_{trialsteps})$), мы вводим электростатический потенциал ϕ и используем его для вычисления изменения кулоновской энергии: $\Delta E_C \simeq e(\phi(r_{new}) - \phi(r_{old}))$, вычислительная стоимость чего составляет лишь $O(N_{trialsteps})$. Однако теперь мы должны обновлять потенциал на каждом узле системы после каждого принятого МК-шага, что стоит $O(Volume \times N_{acceptedsteps})$. Это означает, что второй подход работает

лучше, когда доля принятых МК-шагов мала. Объединение этих двух подходов позволяет эффективно выполнять моделирование системы с дальнодействующими КВ как при высоких, так и при низких температурах, даже для трехмерного случая.

3.3.2 Численные результаты для 2D систем

В этом и следующем разделах мы опишем наши основные результаты данной главы: эволюцию системы с понижением температуры в разных режимах. Мы будем использовать два представления: изображать распределение солитонов и спинов. Эти изображения будут дополнены графиками температурной зависимости для интегральных величин, таких как среднее число ближайших спинов или солитонов.

Система нейтральных солитонов

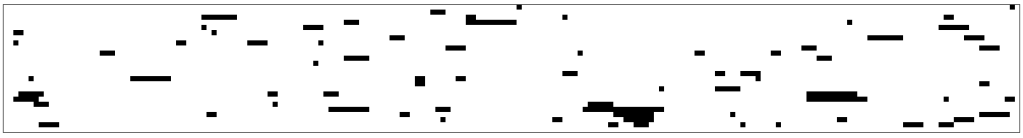
В этом разделе мы рассмотрим двумерную систему с размерами 200×25 узлов и концентрацией нейтральных солитонов $\nu = 0.03$. Как обсуждалось в разделе 3.1.2, значительно ниже температуры перехода Изинга T_1 (для рассматриваемой системы $T_1 \approx 20J_\perp$) существует характеристическая температура T_2, при которой начинают формироваться перпендикулярные стержни из бисолитонов. С уменьшением температуры их характерная длина постепенно увеличивается. Для рассматриваемых конечных систем существует также зависящая от поперечного размера образца H температура $T_F(H)$, при которой эти стержни становятся достаточно длинными, и проходят через весь образец.

Рисунок 3.6 показывает эволюцию системы при понижении температуры в представлении изинговских спинов. При $T = 28J_\perp > T_1$ наблюдается неупорядоченная изинговская фаза (рис. 3.6а). При $T = 10J_\perp < T_1$ мы наблюдаем упорядоченную изиновую фазу со связанными парами солитонов (рис.

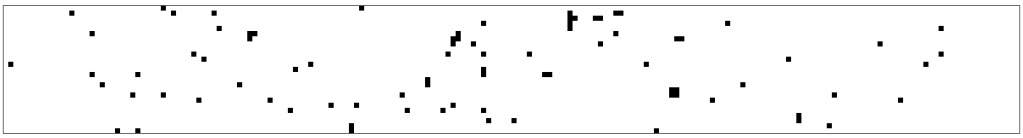
3.6b). При понижении температуры размер бисолитоных пар уменьшается (рис. 3.6c). Затем стержни из перевернутых спинов меняют преобладающую ориентацию от продольной при высоких температурах (режим слабосвязанных пар солитонов) к поперечной при более низких температурах (рис. 3.6d) – режим сильносвязанных солитонных пар, агрегирующихся в поперечном направлении. Наконец, при самых низких температурах агрегированные бисолитонные стержни пересекают весь образец и образуются домены (рис. 3.6e).



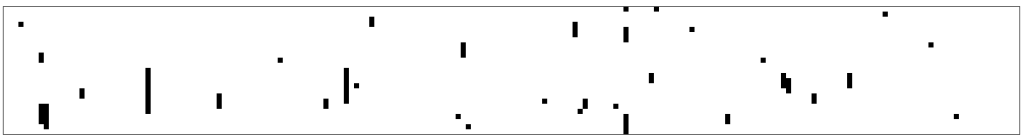
(a) $T = 28J_\perp$



(b) $T = 10J_\perp$



(c) $T = 1.5J_\perp$



(d) $T = 0.8J_\perp$



(e) $T = 0.7J_\perp$

Рис. 3.6: Нейтральные солитоны: изинговское представление двумерной системы 200×25 узлов и $\nu = 0.03$ для разных температур.

Так как при температурах, меньших температуры изинговского перехода T_1, остается только относительно небольшое количество перевернутых спи-

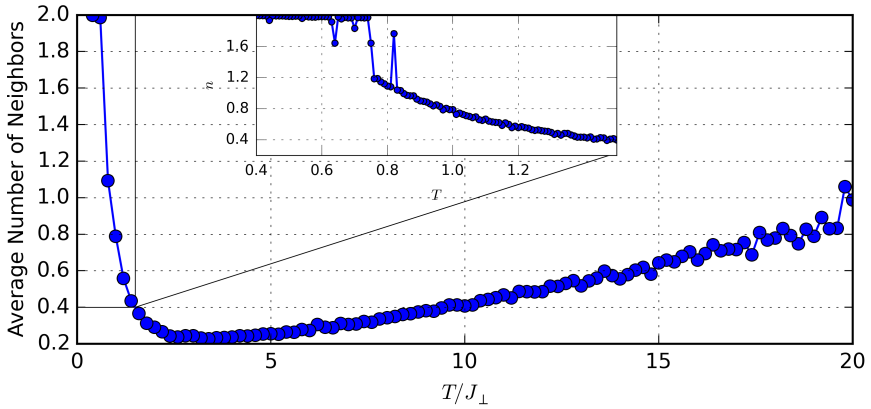


Рис. 3.7: Нейтральные солитоны: среднее число соседних перевернутых спинов для данного перевернутого спина в зависимости от температуры для системы из 200×25 узлов, при $\nu = 0.03$. На вставке показана зависимость в температурном интервале $T = 0.4J_\perp..1.5J_\perp$.

нов, вкрапленных в область с преобладающей ориентацией спинов, то удобной характеристикой степени поперечной агрегации при низких температурах является число поперечных соседних солитонов (перевернутых изинговских спинов) для данного солитона (перевернутого изинговского спина соответственно). Для фазы, в которой присутствуют доменные стенки, число соседей перевернутых спинов должно быть примерно равно 2.

На рисунке 3.7 показана температурная зависимость среднего числа поперечных соседей перевернутых изинговских спинов. Из нее видно, что при охлаждении от температуры изинговского перехода ($T_1 \approx 20J_\perp$) мы приходим сначала к некоторой характерной температуре ($T_2 \approx 2.5J_\perp$), при которой среднее число соседей начинает расти. При дальнейшем охлаждении достигается еще одна характерная температура ($T_F \approx 0.75J_\perp$), при которой среднее число соседей изменяется скачком от ~ 1.2 до ~ 2, что указывает на формирование стенки. На рисунке 3.8 показана температурная зависимость среднего числа межцепочечных соседей солитонов. Мы видим, что их количество постепенно увеличивается с понижением температуры и не проявляет никаких особенностей. Это означает, что переход при $T = T_F$ обусловлен эффектами конечного размера системы, и в бесконечном образце мы будем

наблюдать конденсацию солитонов в бесконечные стенки только при $T = 0$.

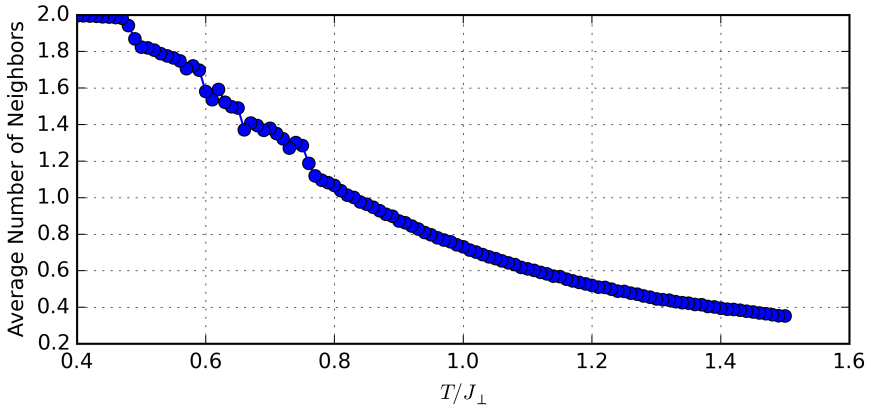


Рис. 3.8: Нейтральные солитоны: среднее число межцепочечных соседей для солитонов в зависимости от температуры в системе 200×25 узлов, при $\nu = 0.03$.

Система заряженных солитонов

Рассмотрим теперь аналогичную систему, но с заряженными солитонами. Для $V_C = 0.01 J_\perp$ (рис. 3.9), температура T_F понижается по отношению к случаю нейтральных солитонов $V_C = 0$ (рис. 3.7); теперь переход образования стенок наблюдается при более низкой $T_F' \approx 0.69 J_\perp$. С увеличением параметра кулоновского взаимодействия до $V_C = 0.03 J_\perp$ (рис. 3.9), мы видим, что температура перехода понижается еще сильнее до $T_F'' \approx 0.5 J_\perp$.

С увеличением V_C, T_F в конечном итоге уменьшается до 0. Для некоторого критического значения кулоновского параметра получаем $T_F = 0$, и в этом случае стержни растут только до некоторого максимального размера $l^* \sim J_\perp / V_C \gg 1$, меньшего чем поперечный размер системы H (см. приложение Б.2 с деталями аналитических оценок). Однако точное численное наблюдение этого критического значения V_C затруднительно, так как доля принятых шагов МК-алгоритма экспоненциально стремится к 0 при $T \to 0$.

Для больших значений параметра кулоновского взаимодействия $V_C \gtrsim 1$ поведение 2D системы качественно совпадает с поведением 3D системы, которое подробно описано в следующем разделе. Поперечные стержни сокраща-

ются до минимального размера в 1 бисолитон, затем КВ начинает конкурировать с силой конфайнмента, поэтому бисолитоны начинают удлиняться, а при достижении критического значения V_C изинговский порядок разрушается. Для наивысших значений КВ наблюдается “вигнерская жидкость” отдельных солитонов, которая была изучена для двумерных систем в [144, 145, 146].

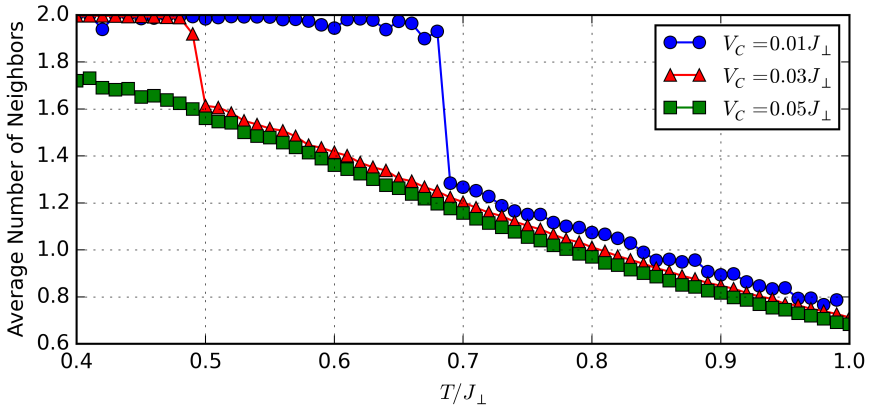


Рис. 3.9: Заряженные солитоны: зависимость среднего числа соседей перевернутых спинов от температуры для системы размером 200×25 узлов, $\nu = 0.03$ при разных значения кулоновского параметра: $V_C = 0.01J_\perp$ (кружки), $V_C = 0.03J_\perp$ (треугольники) и $V_C = 0.05J_\perp$ (квадраты).

3.3.3 Численные результаты для 3D систем

Мы переходим к главным результатам данной главы: описанию эволюции системы с понижением температуры в разных режимах для трехмерных систем. Наиболее сложным и интересным здесь является случай заряженных солитонов, но начнем мы с более простого случая нейтральных солитонов.

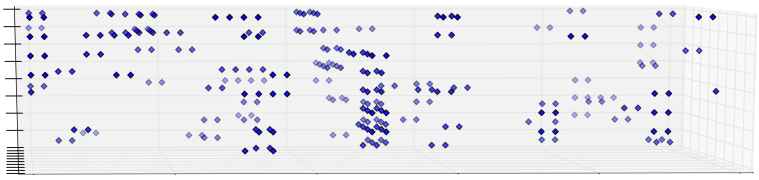
Конденсация нейтральных солитонов в стенки

В данном разделе мы исследуем систему размерами $50 \times 8 \times 8$ узлов и концентрацией нейтральных солитонов $\nu = 0.08$.

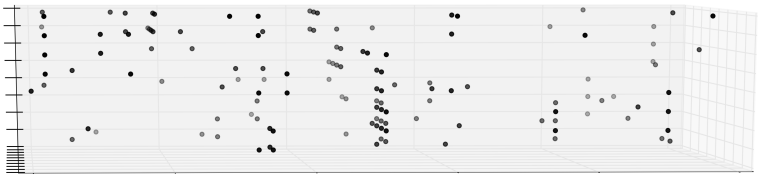
Чтобы явно продемонстрировать процесс формирования доменных стенок, мы приводим изображения для плотности солитонов (рис. 3.10a,c,e), ко-

торые и представляют непосредственный интерес, а также вспомогательные изображения перевернутых спинов эффективной модели Изинга (рис. 3.10b, d, f), дающие полезную дополнительную информацию. Здесь и ниже узлы с преобладающей ориентацией спинов оставлены незакрашенными, а узлы с перевернутыми спинами отмечены черными кружками. Границы черных областей в продольном направлении (направлении цепочек) указывают на положение кинков.

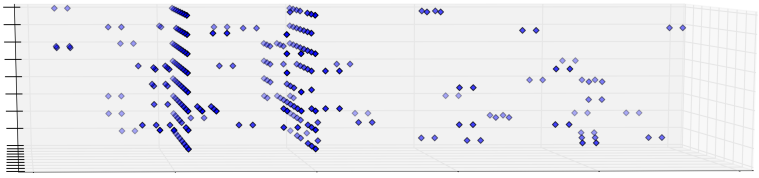
При относительно высокой температуре ($T = 2.1J_\perp > T_2$, 3.10a,b) мы наблюдаем упорядоченное состояние, с вкраплениями из бисолитонов. Когда конденсируется первая пара стенок (при $T = 2.0J_\perp \approx T_2$, рис. 3.10c,d), концентрация несконденсированных солитонов падает, а затем при понижении температуры она далее постепенно уменьшается за счет залечивания дефектов в уже существующих стенах. Затем она резко падает с образованием следующей пары стенок (при $T = 1.6J_\perp < T_2$, рис. 3.10e,f).



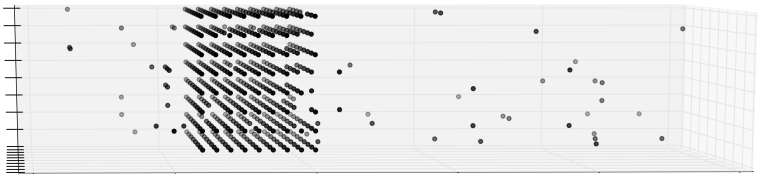
(a) Солитоны, $T = 2.1J_\perp$



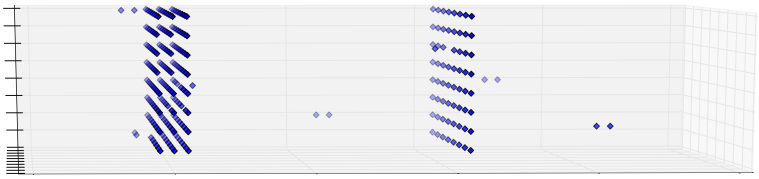
(b) Изинговские спины, $T = 2.1J_\perp$



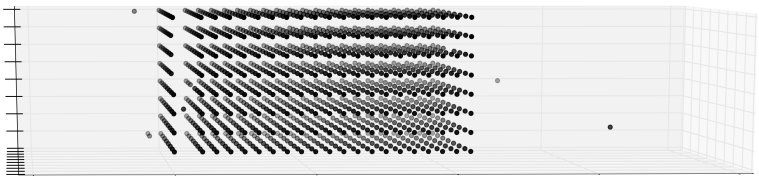
(c) Солитоны, $T = 2.0J_\perp$



(d) Изинговские спины, $T = 2.0J_\perp$



(e) Солитоны, $T = 1.6J_\perp$



(f) Изинговские спины, $T = 1.6J_\perp$

Рис. 3.10: Процесс формирования стенок $50 \times 8 \times 8$, при $\nu = 0.08$. На рис. (a), (c) и (e), кружки обозначают положения солитонов. На рис. (b), (d) и (f), кружки обозначают позиции перевернутых спинов. (a) и (b) $T = 2.1J_\perp$, нет стенок. (c) и (d) $T = 2.0J_\perp$, 2 солитонные стенки. (e) и (f) $T = 1.6J_\perp$, 4 солитонные стенки.

Тем временем исходная пара стенок раздвигается, теряя взаимную корреляцию, и между ними образуется домен из перевернутых спинов. Сравнивая распределения изинговских спинов и солитонов при разных температурах, мы видим, что число перевернутых спинов не сохраняется (что означает, что изинговская намагниченность может резко упасть ниже T_2, принимая любое значение между 0 и $1-\nu$), тогда как число солитонов сохраняется.

Интересно, что вторая пара стенок зарождается вблизи первой: здесь формирующаяся вторая пара стенок оказывается более стабильной. Это происходит потому, что для солитонов, из которых начинает формироваться вторая стенка, запрещено движение по направлению к первой, что в два раза снижает их вероятность ухода и, следовательно, способствует агрегации. Для систем меньших размеров мы можем выполнять достаточно долгое моделирование, и тогда этот переходный эффект исчезает. Однако, поскольку наши элементарные движения солитонов выбраны естественным образом, подобно динамике солитонов в реальном времени, то этот эффект коррелированного возникновения стен может иметь место и в реальных системах.

Интегрированные характеристики нейтральной системы

Полученные крупномасштабные структуры и их эволюция проявляются также в интегрированных характеристиках, которые более доступны для измерения. Мы вычислили температурные зависимости изинговской намагниченности и числа поперечных соседей. Здесь мы рассматриваем трехмерные системы размером $50 \times 8 \times 8$ и $100 \times 20 \times 20$ и концентрацией нейтральных солитонов $\nu = 0.08$.

Во-первых, рассмотрим температурную зависимость изинговской намагниченности $m(T)$, которая показана на рис. 3.11. За исключением низкотемпературной области, эта зависимость очень похожа на стандартный график для модели Изинга с температурой перехода $T_1 \approx 30 J_\perp$. Переход несколько

размывается из-за эффектов конечного размера системы.

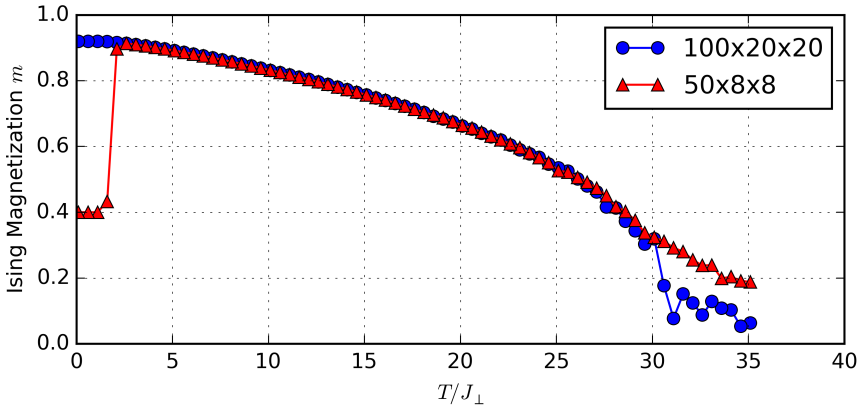


Рис. 3.11: График намагниченности m изинговских спинов в зависимости от температуры (в единицах $J_\perp$) для систем размерами $100 \times 20 \times 20$ (кружки) и $50 \times 8 \times 8$ (треугольники), при $\nu = 0.08$.

Как видно из этого графика даже такая не слишком малая фиксированная концентрация солитонов не оказывает заметного влияния на свойства системы при высоких температурах (по сравнению со стандартной моделью Изинга), в отличие от резкого эффекта, который мы видим при низких T. Фазовый переход при $T = T_2$ происходит с уменьшением размерности системы: взаимодействие между слоями обращается в нуль ($J_{||} = 0$). Поэтому с термодинамической точки зрения, намагниченность должна опускаться до 0. Ниже мы объясним, почему она может не упасть до 0 в численном моделировании.

Это отражает фазовый переход с образованием стенок при $T = T_2$: как было качественно описано в разделе 3.1.2 и явно продемонстрировано в разделе этом разделе, бисолитоны объединяются в стенки, после чего бисолитонные стенки разделяются на односолитонные, и намагниченность Изинга падает. В разных численных экспериментах m выбирает случайное значение между 0 и $1 - \nu$, когда система застывает при $T = 0$, что связано с эффектом конечной длины образца L. Для образца макроскопической длины намагниченность должна быть равна нулю: $m(0) = 0$, так как появление областей со спином, направленным вверх или вниз, является равновероятным.

Для системы больших размеров $100 \times 20 \times 20$ мы наблюдаем, что стенки присутствуют в системе только парами минимального размера толщиной в один бисолитон, и требуется большое время, чтобы стенки раздвинулись, открывая между собой домен перевернутых спинов. Типичное время моделирования оказывается не достаточным, чтобы наблюдать расщепление стенок. Это происходит потому, что для того, чтобы бисолитонная стенка разделилась, система должна пройти через энергетически невыгодное состояние: когда зарождающийся очередной слой растущего домена вырастет до диска радиуса r, энергия системы возрастает на $2\pi r \cdot 2J_\perp$. Если поперечный размер H достаточно велик, то такое высокоэнергетическое состояние не может быть достигнуто за время моделирования, и система не может перейти от одного минимума энергии к другому со сдвинутой стенкой. Поэтому для таких больших систем наблюдаются только бисолитонные стенки, и намагниченность Изинга не уменьшается скачком при низких температурах.

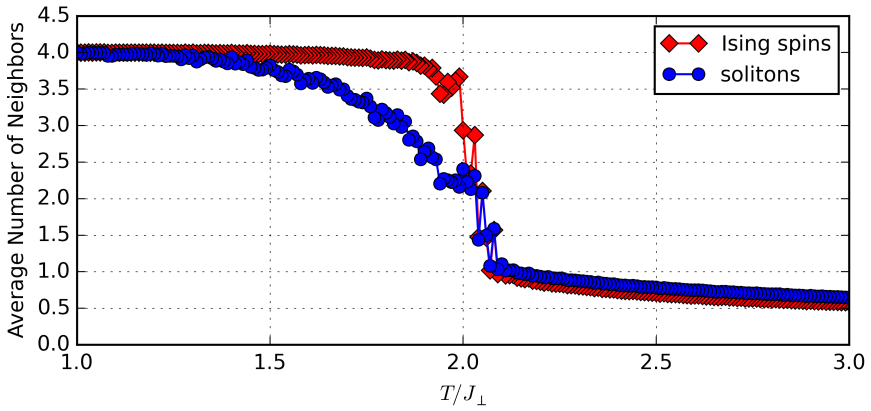


Рис. 3.12: Среднее число поперечных соседей в зависимости от температуры (в единицах $J_\perp$) для системы $50 \times 8 \times 8$ с концентрацией $\nu = 0.08$; квадратики показывают зависимость для перевернутых спинов, кружки – для солитонов.

Во-вторых, рассмотрим другую интегральную характеристику – среднее число поперечных соседей, которое описывает поперечные корреляции в системе. Особенно интересно это сделать вблизи $T = T_2$. Так как $T_2 \ll T_1$, то в окрестности T_2 остается только относительно небольшое число перевернутых

спинов, вкрапленных в основной домен преобладающего направления спинов.

Таким образом, для того, чтобы характеризовать степень агрегации, мы вычисляем для каждого перевернутого изинговского спина (для каждого солитона) число соседних с ним перевернутых спинов (солитонов соответственно) в поперечном направлении. Поскольку для фазы с доменными стенками число перевернутых спинов сопоставимо с общим числом спинов в системе, что намного больше числа перевернутых спинов в фазе без стенок (по предположению, $\nu \ll 1$), то число поперечных соседей для перевернутых спинов должно скачком возрастать примерно до четырех, когда температура опускается до $T = T_2$. Для солитонов, когда T опускается ниже T_2, значительное их количество также конденсируется в стенки, но это число сопоставимо с числом несконденсированных солитонов, поэтому скачок должен быть не таким большим, как для изинговских спинов.

Это рассуждение подтверждается рисунком 3.12, на котором показана температурная зависимость среднего числа соседей для изинговских спинов и солитонов. С понижением температуры, при $T \simeq 2.0 J_\perp$, мы видим внезапный скачок числа соседей перевернутых спинов от ~ 1 до ~ 4, что указывает на формирование доменных стенок, что явно подтверждается рисунком 3.10. Наблюдаемая температура перехода хорошо согласуется с теоретическим предсказанием (3.8), которое дает $T_2 \approx 1.98 J_\perp$. Соответствующий график для солитонов также показывает скачок среднего числа соседей, однако, не такой большой: от ~ 1 до ~ 2. При $T > T_2$ оба графика практически совпадают, так как почти все бисолитонные пары обладают минимальным размером в 1 узел.

Слабое кулоновское взаимодействие

Теперь перейдем к случаю заряженных солитонов. Мы будем рассматривать систему размерами $50 \times 8 \times 8$ с концентрацией солитонов $\nu = 0.08$.

Слабым кулоновским взаимодействием мы будем называть такое, которое не вносит качественных изменений по отношению к случаю нейтральных солитонов. Согласно оценкам, приведенным в приложении Б.2, слабым является взаимодействие с кулоновским параметром $V_C \equiv e^2/\epsilon a_\perp \lesssim J_\perp/H^2$. Например при $V_C = 0.01 J_\perp$ влияние кулоновского взаимодействия сводится лишь к понижению температуры конденсации солитонов в стенки на $\sim 10\%$ до $T_2' \sim 1.8 J_\perp$.

Промежуточное кулоновское взаимодействие

Промежуточным кулоновским взаимодействием мы будем называть такое, которое все еще достаточно мало и не влияет на локальное взаимодействие между солитонами, но уже является достаточно сильным, чтобы благодаря своему дальнодействующему характеру влиять на крупномасштабные структуры, такие как доменные стенки. Чтобы кулоновское взаимодействие было локально несущественно, то есть не мешало связыванию солитонов в бисолитоны и не разрушало корреляцию бисолитонов на соседних цепочках, необходимо, чтобы $V_C \ll J_\perp$. Чтобы кулоновское взаимодействие оказывало влияние на доменные стенки, необходимо, чтобы $V_C \gg J_\perp/H^2$ (см. приложение Б.2). Таким образом, интервал промежуточных значений кулоновского параметра есть $J_\perp/H^2 \ll V_C \ll J_\perp$.

В отличие от случаев нейтральных солитонов (рис. 3.12) и слабого кулоновского взаимодействия, для случая промежуточного кулоновского взаимодействия мы не наблюдаем резкого фазового перехода образования стенок: температурная зависимость среднего числа соседей плавно растет с понижением температуры, не испытывая скачков (рис. 3.13). Когда V_C становится больше чем $J_\perp/H^2$, мы по-прежнему наблюдаем бисолитонные стенки при ненулевой температуре, которые, однако, имеют дефекты (дырки). При $T \to 0$ эти дефекты группируются и могут разрезать стенку вдоль одного из

поперечных направлений (рис. 3.14a).

С дальнейшим увеличением V_C мы больше не наблюдаем образования плоских стенок, а только нитевидных полос, которые бесконечны вдоль одного поперечного направления (из-за периодических граничных условий) и конечны вдоль другого (рис. 3.14b).

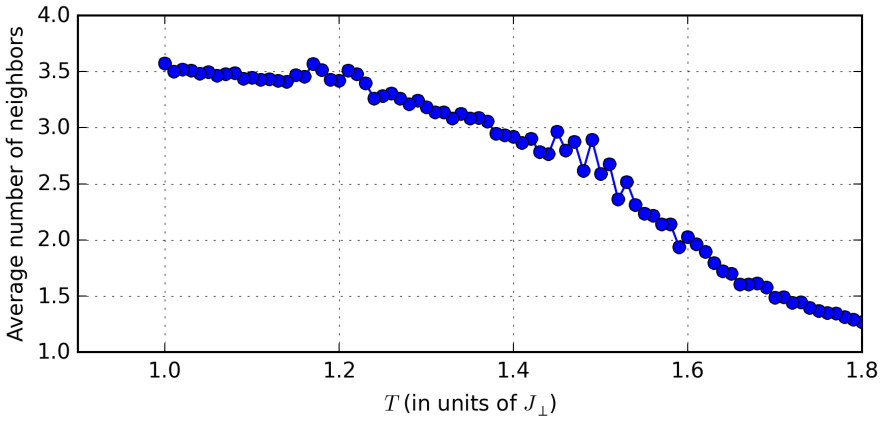
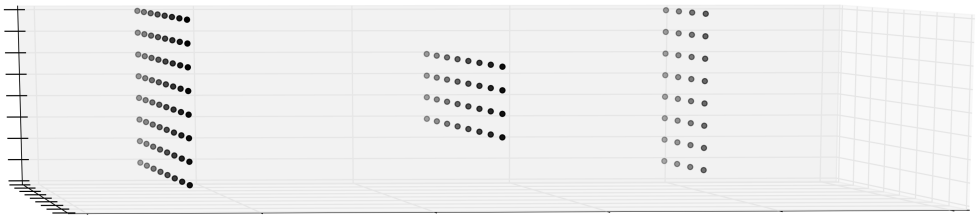


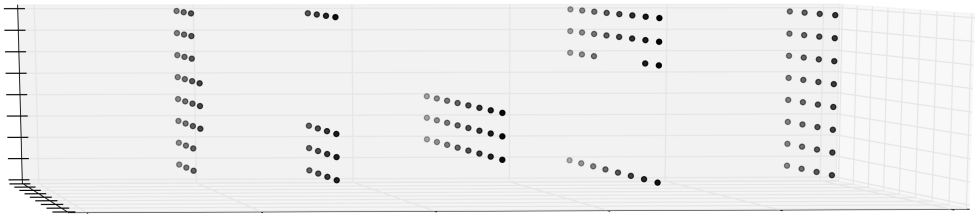
Рис. 3.13: Среднее число поперечных соседей солитонов в зависимости от температуры (в единицах $J_\perp$) для системы $50 \times 8 \times 8$ с концентрацией $\nu = 0.08$ и кулоновским параметром $V_C = 0.02 J_\perp$; аналогичная зависимость для изинговских спинов практически идентична зависимости для солитонов.

Однако ясно, что в термодинамическом пределе такие бесконечные полосы не могут образовываться при нулевой температуре, так как они, с одной стороны обладают высокой энергией межцепочечного взаимодействия, а с другой стороны не дают выигрыша в энтропийном факторе, возникающем при дроблении полос на мелкие диски.

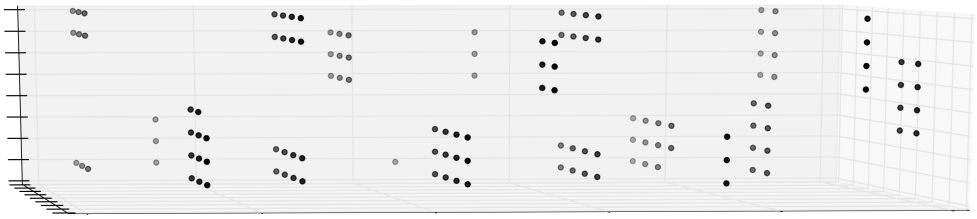
Такое дальнейшее дробление полос на диски даже в исследуемой конечной системе наблюдается при увеличении кулоновского параметра (рис.3.14c). Размеры наблюдаемых бисолитонных дисков согласуются с аналитическими оценками, представленными в Приложении Б.2, где мы оцениваем максимальный радиус дисков как $R^* \sim \sqrt{J_\perp / V_C}$. Для случая $V_C = 0.3 J_\perp$ (рис.3.14c) данная оценка дает $R^* \approx 2$; при дальнейшем увеличении кулоновского параметра средний радиус бисолитонных дисков уменьшается.



(a) $V_C = 0.02J_\perp$



(b) $V_C = 0.1J_\perp$



(c) $V_C = 0.3J_\perp$

Рис. 3.14: Распад доменных стенок при усилении кулоновского взаимодействия. Представление изинговских спинов для системы размерами $50 \times 8 \times 8$ с концентрацией $\nu = 0.08$ при $T = 0.1J_\perp$ для различных значений кулоновского параметра. Закрашенные кружки указывают положения перевернутых спинов.

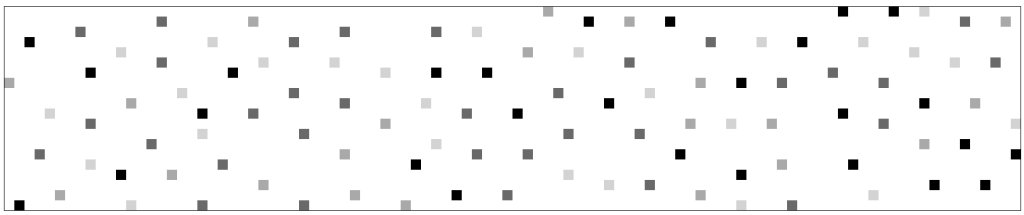
Сильное кулоновское взаимодействие

В пределе, когда радиус бисолитонных дисков уменьшается до $R^* \sim 1$ мы приходим к случаю сильного кулоновского взаимодействия, то есть такого, которое уже локально влияет на поперечную агрегацию бисолитонов, т.е. $V_C \gtrsim J_\perp$. В этом разделе мы рассматриваем систему размерами $100 \times 20 \times 20$ с концентрацией $\nu = 0.026$.

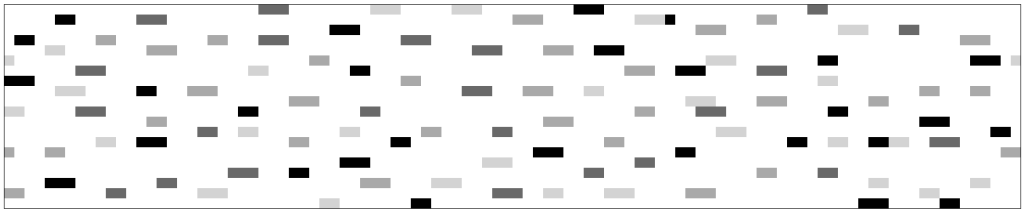
При дальнейшем увеличении V_C, бисолитоны образуют “вигнеровскую жидкость” (рис. 3.15a) (где есть ближний порядком между бисолитонами – в противоположность вигнеровскому кристаллу с дальним порядком). Известно, что распределение зарядов в основном состоянии должно образовывать

треугольную решетку в 2D случае [147] и объемноцентрированную кубическую решетку в 3D случае [148]. Однако для систем с конечной дискретизацией эффекты соизмеримости сверхрешетки и исходной решетки становятся очень важными: даже небольшая несоизмеримость разрушает дальний порядок, в то время как ближний порядок сохраняется [149].

При дальнейшем увеличении V_C кулоновская сила начинает конкурировать с локальной силой конфайнмента, и размер бисолитона начинает расти (рис. 3.15b). Пренебрегая взаимодействием между бисолитонами, мы можем оценить их размер. Бисолитон будет удлиняться до тех пор, пока кулоновская сила не будет скомпенсирована силой конфайнмента: $V_C/l_{bs}^2 \sim 8J_\perp$, откуда $l_{bs} \sim \sqrt{V_C/8J_\perp}$. Эта оценка остается верной до тех пор, пока средний размер бисолитонов намного меньше среднего расстояния между ними: $l_{bs} \ll \nu_{bs}^{-1/3}$. При $l_{bs} \sim \nu^{-1/3}$ (т.е. при $V_C \sim 8J_\perp \nu^{-2/3} \sim T_1 \nu^{1/3}$), размер бисолитонов становится сравнимым с расстоянием между ними, и становится важным их взаимодействие друг с другом. Увеличивая кулоновское взаимодействие до самых высоких значений, мы наблюдаем, что изинговский порядок разрушается с образованием “вигнеровской жидкости” отдельных солитонов, а не бисолитонов (рис. 3.16 a, b).

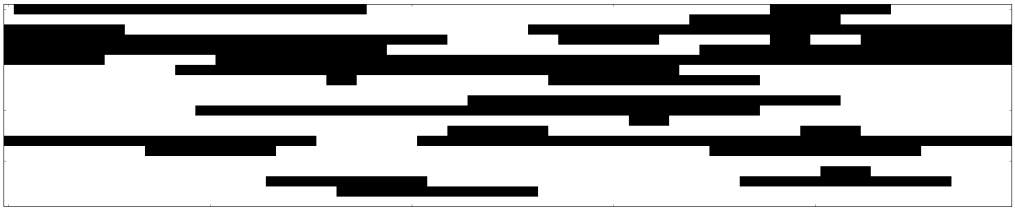


(a) $V_C = 10J_\perp$

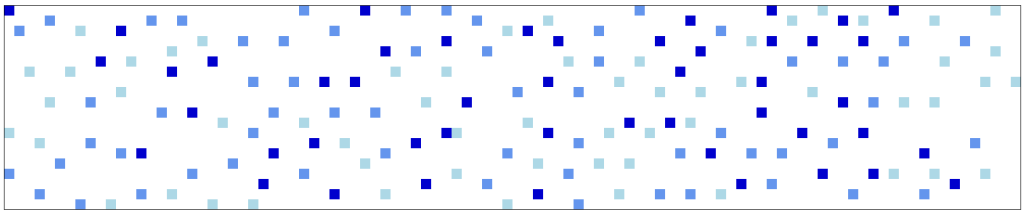


(b) $V_C = 100J_\perp$

Рис. 3.15: Представление изинговских спинов четырех соседних сечений размером 100×20 системы размером $100 \times 20 \times 20$, которые спроектированы на плоскость xy при температуре $T = 0.1J_\perp$. Перевернутые спины из четырех спроецированных сечений обозначены разными оттенками серого. При $V_C = 10J_\perp$ (a), наблюдается "жидкость" перевернутых изинговских спинов (бисолитонов минимального размера); при $V_C = 100J_\perp$ (b), размеры бисолитонов увеличиваются.



(a) Изинговские спины



(b) Солитоны

Рис. 3.16: Система размерами $100 \times 20 \times 20$ при $V_C = 1000J_\perp$, $T = 0.1J_\perp$. (a) Представление изинговских спинов сечения размером 100×20. Изинговский порядок разрушен. (b) Представление солитонов сечения размерами $100 \times 20 \times 3$, спроецированного на плоскость xy; солитоны из разных плоскостей обозначены разными оттенками. Происходит деконфайнмент солитонов с образованием "жидкости" отдельных солитонов.

3.4 Обсуждение и выводы к главе 3.

В данной главе представлен численный и качественный анализ фазовых переходов в ансамблях солитонов, которые могут быть созданы и изучены в квазиодномерных системах с коллективным электронными состояниями с помощью экспериментов по оптической или электрической накачке.

Для 3D систем с малой концентрацией нейтральных солитонов при понижении температуры наблюдаются два фазовых перехода. При первом переходе $T = T_1$ происходит упорядочение спинов в эквивалентной модели Изинга. В терминах исходных солитонов T_1 – температура, ниже которой отдельные солитоны связываются в бисолитонные пары. При дальнейшем уменьшении температуры размер пар уменьшается, достигая минимального значения в 1 узел при $T \sim J_\perp$, образуя газ бисолитонов. При дальнейшем охлаждении системы бисолитоны начинают объединяться в поперечные дисковидные образования. Наконец, при некоторой критической температуре T_2 происходит второй фазовый переход: эти диски пересекают весь образец, превращаясь в доменные стенки, а намагниченность Изинга падает до 0. Размерность системы эффективно сводится к $D = 2$.

Для 3D систем заряженных солитонов даже локально малое кулоновское взаимодействие ($V_C \ll J_\perp$) может, тем не менее, влиять на переход T_2 образования макроскопических структур. Это происходит потому, что крупномасштабная структура, такая как доменная стенка, приводит к неубывающему с расстоянием электрическому полю, энергия которого нивелирует выигрыш в энергии конфайнмента, достигаемой путем образования стенки. Для макроскопической системы без внешнего экранирования любой произвольно малый кулоновский параметр $V_C \neq 0$ разрушает стенки, допуская лишь образование дискообразных структур с максимальным размером $R^* \propto \sqrt{J_\perp / V_C}$. Однако, если экранирование присутствует и его характерная длина $l_s < R^*$, то доменные стенки по-прежнему пересекают весь образец.

При более сильном кулоновском взаимодействии, дисковидные образования распадается на отдельные бисолитоны. Когда кулоновское взаимодействие увеличивается еще больше, взаимодействие между удаленными бисолитонами становится значительным и они выстраиваются в состояние “вигнеровской жидкости”. Кроме того, бисолитоны начинают удлиняться, а когда их размер становится сравнимым с расстоянием между ними, то изинговский порядок разрушается и наблюдается “вигнеровская жидкость” отдельных солитонов.

Нейтральные 2D системы ведут себя качественно аналогично 3D случаю при высоких и промежуточных температурах, изинговский переход при T_1 все еще наблюдается. Однако важным отличием является то, что в двумерном случае T_2 является температурой кроссовера: растущие стержни не пересекают весь образец для макроскопической системы. Однако для конечных образцов все же существует некоторая характерная температура формирования доменной стенки T_F. Для заряженной 2D-системы T_F уменьшается с увеличением кулоновского взаимодействия и, когда она достигает значения $T_F = 0$, то наблюдаются только стержни конечной поперечной длины $l^* \propto J_\perp/V_C$ даже при $T = 0$.

Представленные результаты моделирования Монте-Карло для нейтральных солитонов согласуются с более ранними предсказаниями [129] (как для 2D, так и для 3D случаев). Однако результаты для заряженных солитонов не полностью согласуются с предыдущей работой [130], выполненной только для 2D случая. В работе [130] наблюдалось, что с ростом V_C при $T = 0$ доменные стенки не разрушаются кулоновским взаимодействием, а вместо этого становятся шероховатыми. Такое различие в результатах, предположительно, является следствием того, что в работе [130] для ансамбля солитонов предполагалось, что их число сохраняется в каждой цепочке, а не только во всей системе. Мы сумели не только преодолеть это ограничение, но и исполь-

зуя более эффективный алгоритм, промоделировать трехмерные системы, даже для случая заряженных частиц. Наш подход соответствует физическому условию релаксации солитонной системы после быстрой оптической накачки или воздействия сильного электрического поля: только бисолитоны могут перепрыгивать между цепочками. Фактически, туннелирование совершают пары электронов, при этом параметр порядка подстраивается под них.

Для экспериментов по оптической накачке газа солитонов мы предсказываем, что при эволюции к равновесному состоянию в системе произойдет два фазовых перехода: конфайнмент солитонов в пары при более высокой температуре T_1 и их агрегация в доменные стенки с образованием полосатой фазы при более низкой температуре T_2.

Представленная теоретическая картина должна найти свою экспериментальную реализацию. Обсуждение некоторых экспериментальных методов было приведено в разделе 1.3. С помощью экспериментов по оптической накачке и зондированию можно отслеживать эволюцию системы солитонов через связанные с ними особенности спектра, что уже было эффективно использовано в проводящих полимерах [124, 126]. Развитие данного метода, состоящее в использовании ультракоротких (фемтосекундных) импульсов для оптической накачки и зондирования, помогло исследовать солитоны в контексте нейтрально-ионных переходов [57, 58, 150, 151]. Состояние ансамбля солитонов, в частности агрегирование в регулярные полосы, можно проследить с помощью методов дифракции со временным разрешением. В последние несколько лет временное разрешение дифракции электронов и рентгеновских лучей было перенесено в субпикосекундную шкалу (см. [152, 153, 154] и ссылки в них), что делает их очень многообещающими в изучении индуцированных фазовых переходов, сопровождающихся агрегацией в сверхструктуры.

Глава 4

Моделирование сетей и глобул заряженных доменных стенок, создаваемых оптической или электрической накачкой в $1T-TaS_2$

В предыдущих главах мы рассмотрели случаи непрерывного вырождения симметрии на примере вихрей в XY модели с магнитоэлектрическим взаимодействием, а также двухкратного дискретного вырождения симметрии на примере квазиодномерных проводников с соизмеремой ВЗП. В данной главе мы рассмотрим, в некотором смысле, промежуточный случай между указанными двумя: когда система обладает дискретным вырождением, но его кратность намного больше единицы, в нашем примере дисульфида тантала она будет равна 13.

Как было указано в разделе 1.4, переход из основного состояния моттовского изолятора к метастабильному скрытому проводящему состоянию в $1T-TaS_2$ осуществляется путем создания локальных глобул или сетей заряженных доменных стенок, обеспечивающих фрагментацию электронного кристалла в мозаику доменов, каждый из которых находится в одном из многократно вырожденных основных состояний. Физически это происходит из-за того, что с помощью внешних импульсов, возбуждаются электроны нижней

хаббардовской зоны, образуя вакансии ("поляронные дырки"), которые агрегируются в доменные стенки. Однако, на первый взгляд, заряженные вакансии должны отталкиваться друг от друга и сами образовывать вигнеровский кристалл.

Возникает вопрос: почему и каким образом отталкивающиеся вакансии объединяются в сеть доменных стенок? В этом разделе мы отвечаем на этот и связанные с ним вопросы с помощью моделирования сверхрешетки поляронов на двумерной треугольной основной решетке всех атомов Ta, рассматривая их как классический заряженный решеточный газ с экранированным отталкивающим кулоновским взаимодействием. Внешний импульс, создающий "пустоты" в электронном кристалле, моделируется путем введения небольшой случайной концентрации вакансий, уменьшающей концентрацию частиц ν ниже равновесного значения $\nu_0 = 1/13$. Последующая эволюция системы, в том числе прохождение через термодинамический фазовый переход первого рода, изучена с помощью метода Монте-Карло. Эта минималистическая модель уже способна зафиксировать формирование доменных стенок в тесном визуальном сходстве с экспериментальными наблюдениями, а также качественно объяснить данный эффект как результат фрагментации заряда. Результаты, представленные в данном разделе, основаны в работе [155].

4.1 Модель

Мы моделируем систему поляронов, как решеточный газ заряженных частиц на треугольной решетке. Каждая частица представляет собой локализованный электрон с зарядом $-e$, который компенсируется статическим однородным положительным фоном.

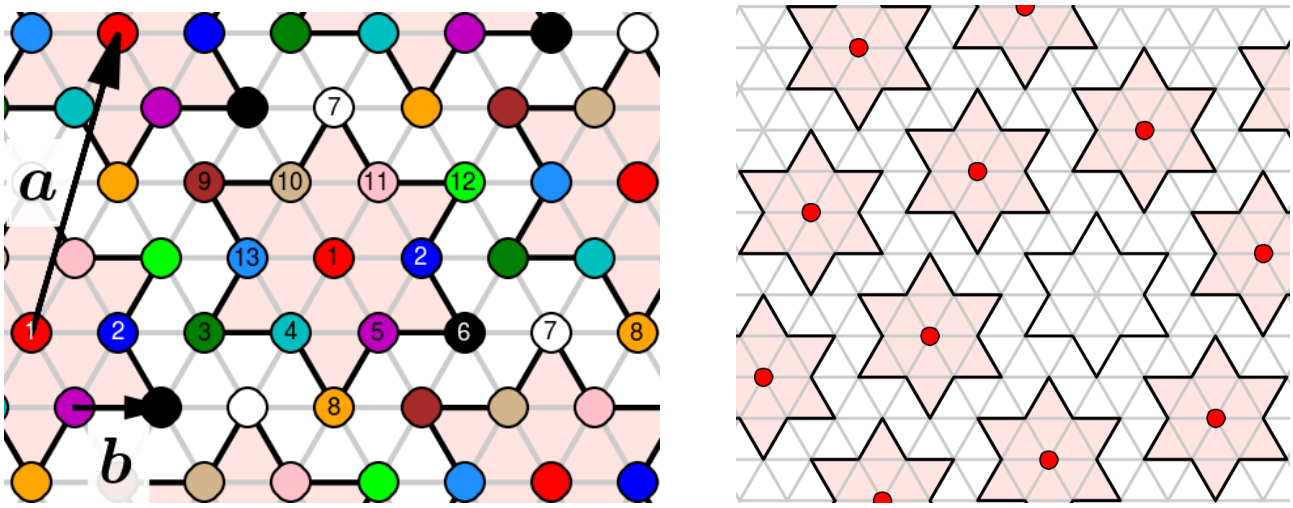
Внешний импульс моделируется малой концентрацией случайно посеянных вакансий, уменьшающих концентрацию частиц ниже равновесной: $\nu = \nu_0 - \delta\nu$. Взаимодействие поляронов, расположенных на узлах i, j, описывает-

ся эффективным гамильтонианом $H = \sum_{i,j} U_{ij} n_i n_j$ с отталкивающими взаимодействиями U_{ij}. Здесь суммирование ведется по всем парам узлов $i \neq j$; $n_i = 1$ (или 0), когда частица присутствует (или отсутствует) на узле i и в качестве U_{ij} выбран экранированный кулоновский потенциал

$$U_{ij} = \frac{U_0 a}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \exp\left(-\frac{r-a}{l_s}\right), \tag{4.1}$$

где $U_0 = e^2 \exp(-a/l_s)/a$ – кулоновская энергия взаимодействия соседних частиц в упорядоченном состоянии вигнеровского кристалла с расстоянием $a = \sqrt{13}b$ между ними (b – постоянная исходной треугольной решетки, рис. 4.1а), l_s – длина экранирования.

4.2 Сверхрешетка и ее заряженные дефекты.



(a) (b)

Рис. 4.1: (а) Исходная треугольная решетка (с периодом b) всех атомов Та и схема раскраски, показывающая ее 13 подрешеток; в основном состоянии занята только одна подрешетка (с периодом сверхрешетки a). (b) Решетка с концентрацией поляронов $\nu = 1/13$ при наличии одной вакансии. Занятые узлы отмечены красными кружками, и окружены заполненными “звездами Давида”, периметры которых проходят через ближайших соседей занятых узлов.

В основном состоянии частицы, взаимодействующие кулоновским образом на треугольной решетке, упорядочатся также в треугольную сверхрешетку,

которая является плотноупакованной и наиболее энергетически выгодной в 2D [147] (для более экзотических потенциалов бывают исключения [156]). Поскольку концентрация частиц составляет 1/13, то основное состояние системы 13-кратно вырождено по отношению к сдвигам (рис. 4.1a). Из-за дополнительной зеркальной симметрии основное состояние получается 26-кратным вырожденным. Но так как в одном образце две зеркально-симметричные фазы не сосуществуют как в эксперименте [157], так и при моделировании для достаточно медленных скоростей охлаждения (из-за высокой энергии соответствующей доменной стенки), то далее мы рассматриваем только один сектор основных состояний по отношению к зеркальной симметрии.

Простейший дефект решетки представляет собой вакансию (void) или "поляронную дырку" (рис. 4.1b), которая образуется, когда электрон из нижней хаббардовской зоны возбуждается в зону проводимости или вовсе покидает систему. Одиночная вакансия имеет относительный заряд $+e$ (из-за фонового нейтрализующего заряда) и кулоновскую энергию порядка

$$E_{void} \simeq e^2/a. \tag{4.2}$$

В то время как вакансия в "электронном кристалле" является проявлением общего понятия вакансий в кристаллах, в нашем случае могут присутствовать также топологически нетривиальные дефекты – доменные стенки, разделяющие области с различными 13-кратно вырожденными основными состояниями (рис. 4.2). Сечение доменной стенки напоминает "несоизмеримость" (discommensuration), известную в системах с ВЗП [158], а также кинк (солитон), ансамбли которых были исследованы в предыдущей главе.

Экспериментально, дефекты поляронной решетки могут быть введены с помощью внешних импульсов, легирования примесями или полевого эффекта. Например, лазер или СТМ-импульс могут возбуждать моттовские электроны, находящиеся в центрах кластеров звезд Давида, создавая ансамбль вакансий. Поскольку вакансии являются заряженными объектами, то на пер-

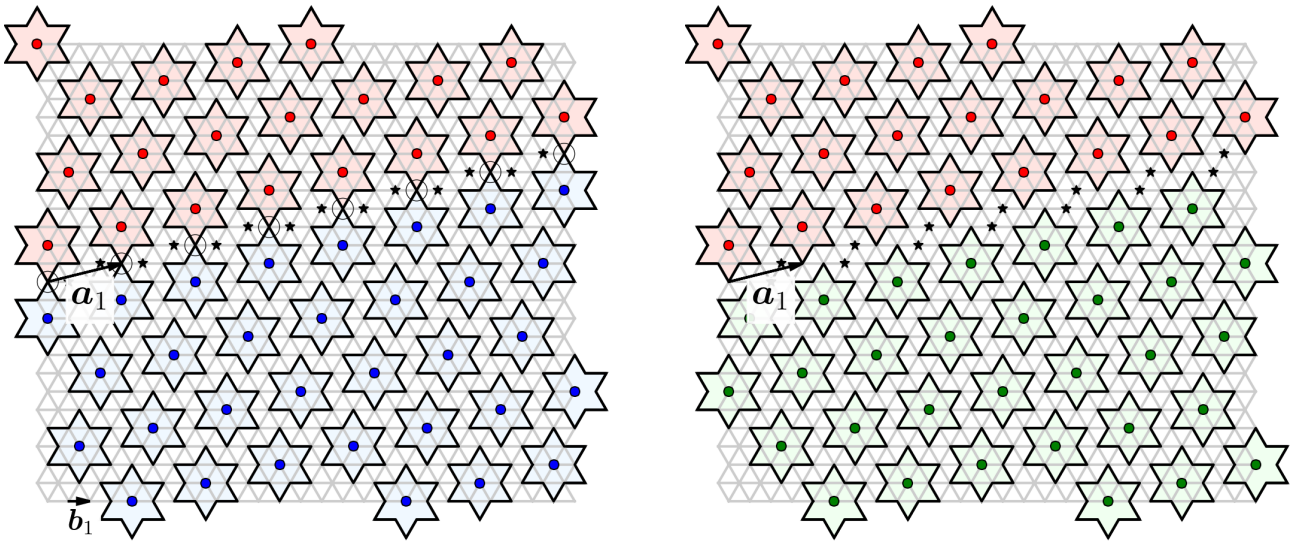
вый взгляд они должны отталкиваться друг от друга и сами формировать вигнеровский кристалл. Но наше моделирование, согласующееся с экспериментом, показывает, что вакансии скорее притягиваются друг к другу на малых расстояниях, а их ансамбль неустойчив по отношению к образованию сети доменных стенок. Качественно эта неустойчивость может быть объяснена из следующих соображений. Сравним энергии изолированной вакансии и отрезка доменной стенки, обладающего тем же зарядом. Минимальный заряд доменной стенки, приходящийся на вектор трансляции $\mathbf{a}_1$ равен $+e/13$ (рис. 4.2 (a)), и энергию отрезка стенки, несущего заряд $+e$, можно оценить как кулоновскую энергию равномерно заряженной линии:

$$E_{wall} \simeq 13 \times \frac{(e/13)^2}{a} \ln(l_s/a), \tag{4.3}$$

При умеренных длинах экранирования l_s эта энергия меньше, чем собственная энергия вакансии (4.2), что делает энергетически выгодным распад вакансий на дробно-заряженные доменные стенки. Локальные эффекты, выходящие за рамки нашей модели, также могут делать благоприятным образование доменных стенок с другими зарядами: для простейшей доменной стенки с зарядом $+e/13$ существуют аномальные узлы, где звезды Давида пересекаются (рис. 4.2a), что повышает энергию такой стенки и может сделать более выгодными двойные доменные стенки с зарядом $+2e/13$ (рис. 4.2b).

4.3 Фазовый переход порядок-беспорядок: теория среднего поля.

В этом разделе мы представим анализ на основе теории среднего поля для фазового перехода порядок-беспорядок для недопированной системы (с концентрацией частиц $\nu = 1/13$). Поскольку взаимодействия имеют дальнодействующий характер, и многие частицы оказывают влияние на данную, мы ожидаем, что теория среднего поля должна быть хорошим приближением.



(a) $q = +e/13$ (b) $q = +2e/13$

Рис. 4.2: Положительно заряженные доменные стенки с зарядами на один вектор трансляции $\mathbf{a}$ равными: (a) $+e/13$; (b) $+2e/13$. Вся последовательность доменных стенок может быть получена путем сдвига синей области на рис. (a) на вектор $\mathbf{b}_1$. На рис. (a) обведены кружками узлы, которые являются общими для звезд Давида по разные стороны от стенки. Черными звездочки обозначены узлы, не принадлежащие ни одной звезде.

При $T = 0$ наблюдается совершенно упорядоченное состояние, где все частицы занимают одну и ту же подрешетку (одну из 13 эквивалентных подрешеток, порождаемых трансляциями, не считая зеркальной симметрии, как обсуждается в разделе 4.2). С повышением температуры, при некотором ее критическом значении $T = T_c$ порядок скачком разрушается.

Чтобы определить T_c, рассмотрим упрощенную версию модели. Разделим всю систему на плотно упакованные звезды Давида и позволим каждой частице занимать только один из 13 узлов своей звезды Давида (рис. 4.3). Это упрощение приведет к небольшой переоценке для T_c. Энергия Δ_1 (“щель”) возбуждения частицы из ее низкоэнергетического положения в центре звезды Давида в первую координационную сферу – в несколько раз меньше аналогичной энергии возбуждения во вторую координационную сферу Δ_2 (например, для промоделированного случая, описанного далее в разд. 4.4, где $l_s = 4.5b$, легко численно точно найти, что $\Delta_1 \approx 0.442U_0$, $\Delta_2 \approx 1.993U_0$).

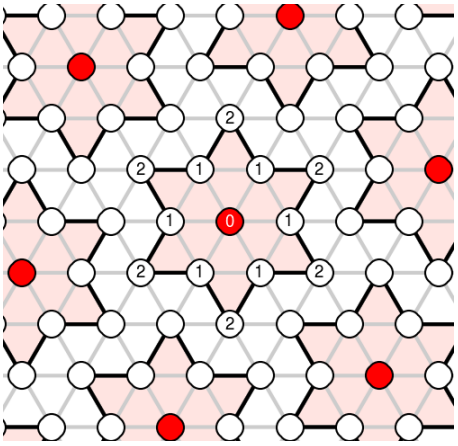


Рис. 4.3: Одно из основных состояний системы, где частицы (красные круги) занимают одну и ту же подрешетку. Для данной частицы ("0") показаны ее 1-я и 2-я координационные сферы.

Таким образом, разумным первым приближением является учет только 1-ой координационной сферы, и мы приходим к более простой модели, где каждая частица может находиться только в одном из 7 возможными состояний.

Рассмотрим частицу в среднем поле других частиц. Пусть s_0, s_1 – числа заполнения 0-й и 1-й координационных сфер соответственно. Для частицы, находящейся в основном состоянии, имеем $s_0 = 1$, $s_1 = 0$; если частица находится в возбужденном состоянии, то $s_0 = 0$, $s_1 = 1$. Введем параметр порядка

$$m = \frac{7}{6}\langle s_0 - \frac{1}{7}\rangle. \tag{4.4}$$

В упорядоченной фазе имеем $m = 1$, в неупорядоченной фазе $m = 0$. Так как в среднем только те частицы, которые занимают данную подрешетку (доля которых составляет m), стремятся удержать рассматриваемую частицу на той же подрешетке, то мы используем следующую "температурно-зависимую щель", учитывающую уменьшение количество частиц на данной подрешетке с повышением температуры: $\Delta(T) = \Delta_1 \cdot m(T)$. Одночастичный гамиольтониан в приближении среднего поля $H = s_1\Delta_1 m(T)$, дает статсумму: $Z(T) = 1 + 6e^{-\Delta_1 m/T}$. Из условия самосогласования (4.4), получим

$m = \left(1 - \frac{7}{6}e^{-\Delta_1 m/T}\right)/Z$ или

$$m = \frac{1 - e^{-m\Delta_1/T}}{1 + 6e^{-m\Delta_1/T}}. \tag{4.5}$$

Разлагая правую часть (4.5) в первом порядке по m, получим $m = m\Delta_1/7T + o(m)$, что приводит к критической температуре

$$T_c = \frac{\Delta_1}{7}. \tag{4.6}$$

В следующем разделе мы сравним полученное теоретическое значение (4.6) с результатами численного моделирования, а также обсудим наиболее интересный случай допированных систем, проливающий свет на свойства "скрытого состояния" в $1T - \mathrm{TaS}_2$.

4.4 Численное моделирование.

В этом разделе мы опишем результаты численного моделирования классического решеточного газа с потенциалом взаимодействия (4.1), проделанного с помощью алгоритма Метрополиса метода Монте-Карло. Мы выполняли медленное охлаждение от температуры $T = 0.07U_0$, которая находится выше температуры фазового перехода порядок-беспорядок, до низкой температуры $T = 0.01U_0$ с шагом $\Delta T = -0.0002U_0$, достигая либо основного состояния, либо очень близкого к нему по энергии метастабильного состоянии. Ниже мы, во-первых, рассмотрим недопированные системы (где концентрация частиц ν точно равна $\nu_0 = 1/13$), а затем системы, допированные вакансиями (в этом случае $\nu = \nu_0 - \delta\nu \equiv \nu_0(1 - \nu_{voids})$, где $\nu_{voids} = \delta\nu/\nu_0$ – концентрация вакансий).

4.4.1 Недопированная система.

В качестве эталонного мы выбрали образец с размерами 91×104 с суммарным числом частиц $N_p = 728$, что соответствует концентрации $\nu_0 = 1/13$.

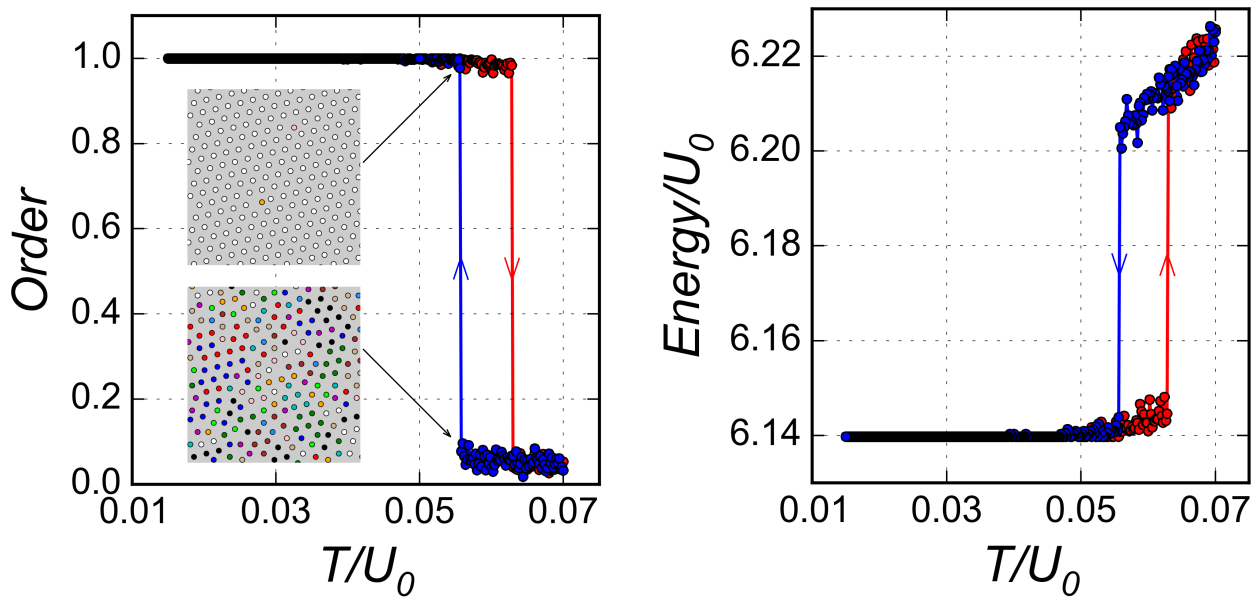
При охлаждении, фазовый переход упорядочения происходит при температуре $T_c \approx 0.056U_0$, ниже которой формируется треугольная сверхрешетка. Температурные зависимости параметра порядка $M = \sqrt{\sum(m_i - 1/13)^2/13 \cdot 12}$, где m_i – доля частиц лежащих на i-ой подрешетке (рис. 4.4a) и среднего значения энергии приходящейся на одну частицу (рис. 4.4b) указывают на то, что это фазовый переход первого рода. Вставки на рис. 4.4a показывают разупорядоченное состояние при T чуть выше T_c, и только две смещенные частицы в упорядоченном состоянии при T чуть ниже T_c.

При нагреве фазовый переход порядок-беспорядок происходит при $T \approx 0.063U_0$. Для параметра экранирования $l_s = 4.5b$, имеем $\Delta_1 \approx 0.442U_0$, и с помощью теоретической формулы (4.6), получаем $T_c \approx 0.0631U_0$, что с очень хорошей точностью (в пределах 0.5%) совпадает с результатом численного моделирования в случае нагревания. Отметим, что канонически, температура фазового перехода определяется как раз, как температура разрушения порядка при нагревании.

С ростом l_s температурный гистерезис и тенденция к переохлаждению становятся более выраженными. Переохлаждение или даже замерзание в стеклянное состояние известно для электронных систем с замороженным беспорядком или кулоновскими фрустрациями [159]; однако в настоящей модели эти оба фактора отсутствуют – эффект, по-видимому, обусловлен только дальнодействующим кулоновским взаимодействием и ограничениями, накладываемыми решеткой.

4.4.2 Допированная система.

Мы моделируем эффект допинга (инжектирования заряда) путем уменьшения количества частиц по отношению к недопированному ($\nu = 1/13$) и изучаем последующую эволюцию системы. Из анализа интегрированных характе-



(a) (b)

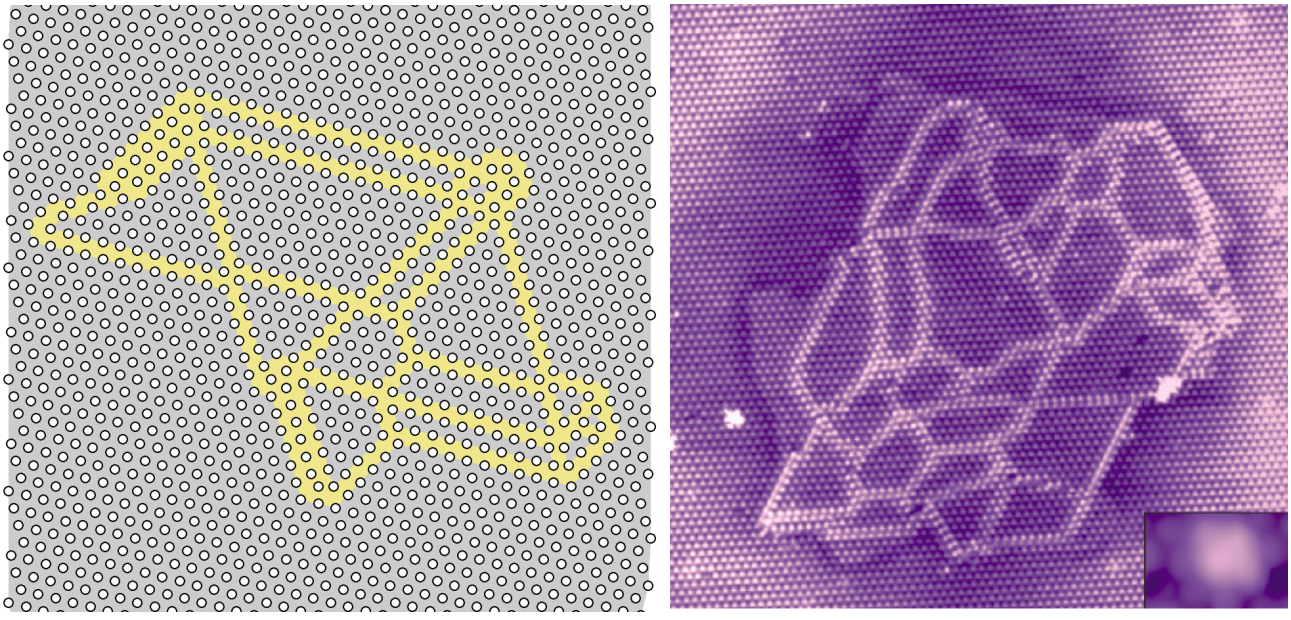
Рис. 4.4: Температурные зависимости интегральных характеристик для недопированной системы. (a) Параметр порядка, характеризующий, насколько частицы предпочитают одну из подрешеток; на вставках изображены конфигурации системы чуть выше и чуть ниже фазового перехода; (b) средняя энергия системы в расчете на одну частицу. Синие символы соответствуют охлаждению, а красные – нагреванию системы.

ристик, подобных тем, что изображены на рис. 4.4, по прежнему наблюдается переход порядок-беспорядок, но при более низкой температуре. Тем не менее, как будет показано ниже, формируется новое основное “мозаичное” состояние с сетью доменных стенок.

Рисунок 4.5a показывает низкотемпературную конфигурацию системы размерами 130×156, где $N_p = 1544$ частиц были расположены на решетке случайным образом (соответствующая концентрация вакансий $\nu_{voids} \approx 1.0\%$), а затем система медленно охлаждалась от $T = 0.07U_0 > T_c$ до $T = 0.01U_0 \ll T_c$. Несмотря на случайное начальное распределение частиц по образцу, в конце концов, вакансии объединяются в одну глобулу, погруженную в связное “кристаллическое” состояние. Сравним результаты нашего моделирования, представленные на рис. 4.5a с экспериментальными результатами на рис. 4.5b [80]. Аналогичные структуры наблюдались также в других эксперимен-

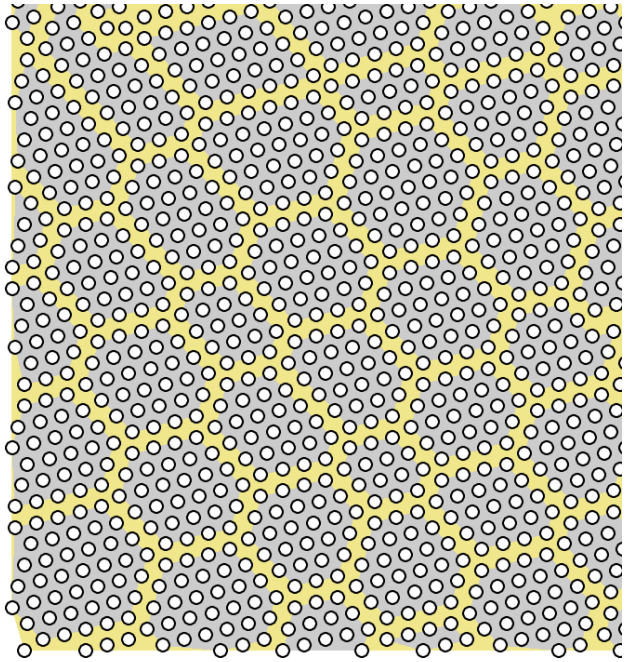
тальных работах [78], [81].

При увеличении допинга размер глобулы растает, и при достижении некоторой пороговой концентрации, когда глобула дорастает до размеров порядка размера образца, появляется разветвленная сеть доменных стенок, которая делит систему на мозаику областей случайной формы (рис. 4.6 (a), (c)). Сравнение моделирования с экспериментом по инжектированию заряда импульсами СТМ показано между панелями (a) и (b) на рис. 4.5 между панелями (a) и (b), (c) и (d) на рис. 4.6. Эти рисунки демонстрируют значительное сходство нашего моделирования с результатами нескольких экспериментов, использующих либо оптическое переключение в скрытое состояние [77], либо СТМ-импульсы напряжения [80, 81]. Обратим внимание, что аналогичные структуры “нерегулярной сети сот” были предсказаны для неизмеримой фазы криптона на графите с $\nu_0 \approx 1/3$ и взаимодействием ближайших соседей [160], но с меньшими топологическими ограничениями в нашем случае.

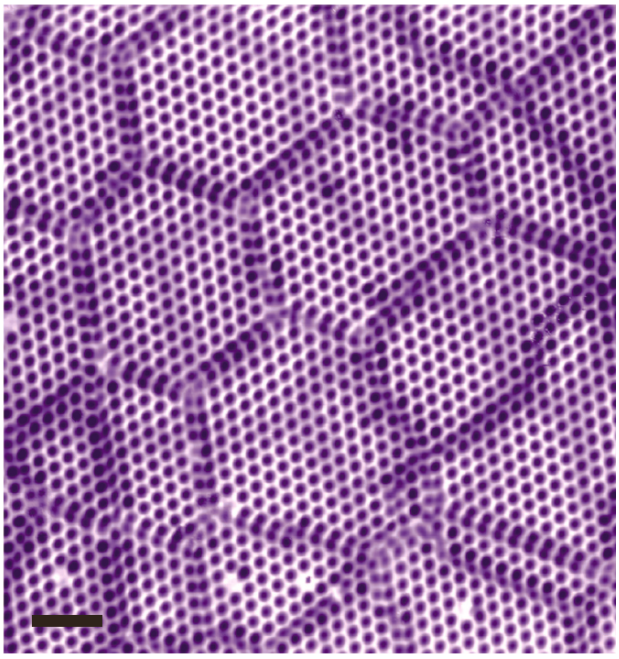


(a) (b)

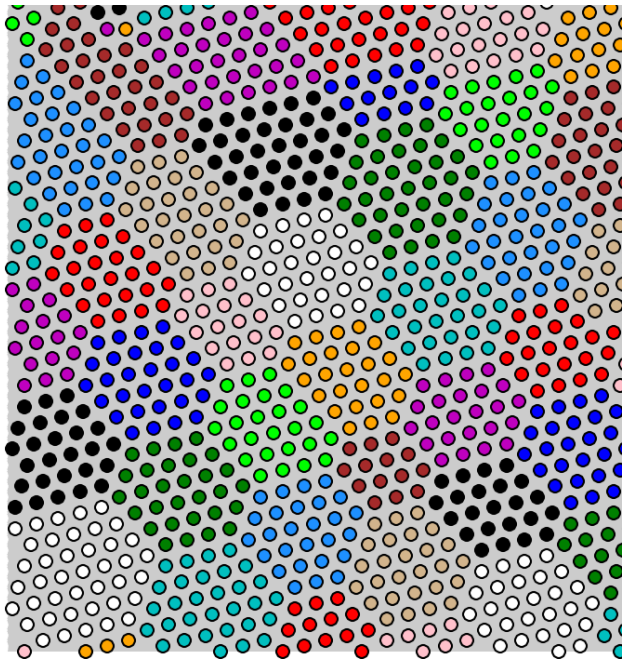
Рис. 4.5: Структура глобулы. (a) Численное моделирование для $\nu_{voids} \approx 1.0\%$, при $T = 0.01U_0$; (b) из экспериментальной работы [80].



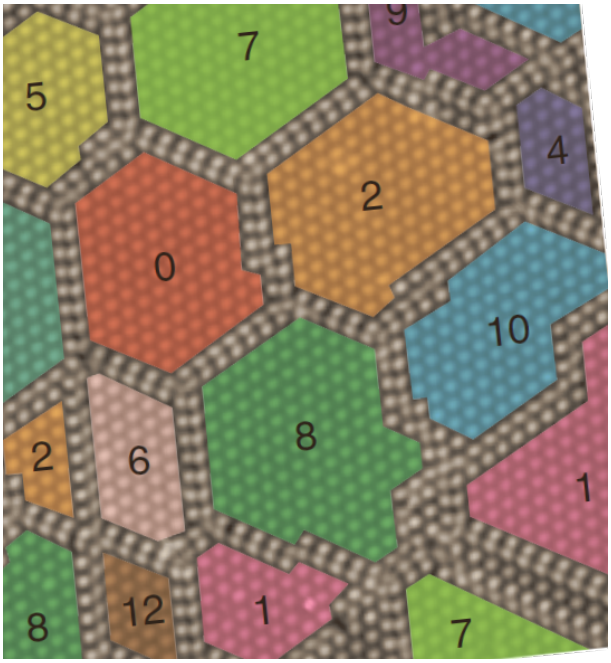
(a) $\nu_{voids} \approx 1.9\%$ – доменные стенки



(b)



(c) $\nu_{voids} \approx 1.9\%$ – домены



(d)

Рис. 4.6: Моделирование для случая большего допинга (a, c) в сравнении с экспериментом (b, d). Рис. (a, c) показывают настоящее моделирование с концентрацией вакансий $\nu_{voids} = 1.9\%$ при низкой температуре $T = 0.01U_0$, схема раскраски для доменов указана на рис. 4.1. Рис. (b, d) адаптированы из [80], числа на рис. (d) показывают соответствующую схему раскраски для доменов.

4.5 Обсуждение и выводы к главе 4.

Наше моделирование явным образом демонстрирует следующее нетривиальное явление: эффективное притяжение вакансий является результатом чисто отталкивательных кулоновских взаимодействий. Слияние одиночных вакансий начинается уже при их небольшой концентрации. Для нескольких вакансий мы наблюдаем постепенное слияние точечных дефектов в глобулу доменных стенок. С увеличением концентрации вакансий мы наблюдаем все более разветвленную сеть доменных стенок.

Это можно понять, заметив, что образование стенок – это не просто склеивание вакансий, а их дробление. Доменная стенка имеет дробный ($q = \nu_0 e$) заряд, приходящийся на вектор трансляции сверхструктуры, что уменьшает ее кулоновскую энергию по сравнению с целочисленно заряженной одиночной вакансией. Будучи заряженными объектами, доменные стенки отталкиваются друг от друга, из-за того, что они являются топологическими объектами, они не могут быть еще более фрагментированы и могут заканчиваться только в точках тройного ветвления, образуя глобулы внутри слоя. Отталкивание между стенками на соседних слоях не встречает ограничений, откуда получаем экспериментально наблюдаемое чередование рисунков стенок в соседних слоях [77, 80, 81].

Данный случай 13-кратного вырождения является усложненной версией фазового перехода с образованием заряженных доменных стенок в системе с 2-кратным вырождением основного состояния, описанного в данной главе. Также как и для случая больших концентраций кинков в полиацителене, где температуры T_1 и T_2 могу слиться в одну температуру перехода – в дисульфиде тантала мы также наблюдаем один фазовый переход из неупорядоченной фазы сразу в частично упорядоченную фазу доменных стенок.

Заключение

Основные результаты

1. a) Построена аналитическая теория, описывающая физические свойства мультивихревых магнитных структур, создаваемых неоднородным внешним электрическим полем в тонких пленках магнитоэлектрических материалов с магнитной симметрией типа “легкая плоскость”.

Найден критический потенциал приложенного внешнего поля, необходимый для создания первой вихрь-антивихревой пары. В непрерывном приближении найдены: плотность распределения вихрей по образцу, число пар вихрь-антивихрь, в зависимости от заряда иглы кантилевера, а также полная энергия основного состояния системы. С помощью метода случайного энергетического ландшафта для “стеклоподобных” систем установлен степенной характер температурной зависимости электрической поляризуемости системы магнитных вихрей при низких температурах.

b) Проведено обширное численное моделирование, подтверждающее аналитические результаты. С использованием алгоритма имитации отжига (методом Монте-Карло) получены характерные низкотемпературные конфигурации системы. Продемонстрировано образование “магнитного атома”, ядро которого состоит из вихрей, выстроенных в структуру с ближним порядком, которое окружено антивихрями, образующими внешние концентрические круговые “оболочки”. Численно найдены зависимость числа вихревых пар от заряда кантилевера, критический заряд и температурная зависимость поляризуемости. Полученные результаты согласуются с предсказаниями аналитической теории.

2. Проведен аналитический и численный анализ фазовых переходов в ансамблях амплитудных солитонов (кинков) волны зарядовой плотности в квазиодномерной системе с двукратным вырождением основного состояния. Впервые численно проанализирован трехмерный случай нейтральных кинков, а также впервые проведен аналитический и численный анализ для трехмерного случая заряженных солитонов.

Для систем с малой концентрацией нейтральных солитонов при понижении температуры наблюдаются два фазовых перехода. При первом переходе $T = T_1$ происходит упорядочение спинов в эквивалентной модели Изинга. В терминах исходных солитонов T_1 – температура, ниже которой отдельные солитоны связываются в бисолитонные пары. При дальнейшем уменьшении температуры размер пар уменьшается, достигая минимального значения в 1 узел и образуя газ бисолитонов. При дальнейшем охлаждении системы бисолитоны начинают объединяться в поперечные дисковидные образования. Наконец, при некоторой критической температуре T_2 происходит второй фазовый переход: эти диски пересекают весь образец, превращаясь в доменные стенки, а намагниченность Изинга падает до 0. Размерность системы эффективно сводится к $D = 2$.

Для ансамблей заряженных солитонов даже локально слабое кулоновское взаимодействие может влиять на переход T_2 образования доменных стенок. Это происходит потому, что крупномасштабные структуры, такие как доменные стенки, приводит к неубывающему с расстоянием электрическому полю, энергия которого нивелирует выигрыш в энергии конфайнмента, достигаемой путем образования стенки. Для макроскопической системы без внешнего экранирования, сколь угодно малое кулоновское взаимодействие разрушает стенки, допуская лишь образование дискообразных структур бисолитонов конечных размеров. Однако, если экранирование присутствует, то доменные

стенки по-прежнему могут пересекать весь образец.

При более сильном кулоновском взаимодействии дисковидные образования распадаются на отдельные бисолитоны. Когда кулоновское взаимодействие увеличивается еще больше, взаимодействие между удаленными в пространстве бисолитонами становится значительным и они выстраиваются в состояние “вигнеровской жидкости” – аналога вигнеровского кристалла, в котором существует лишь ближний порядок. Кроме того, бисолитоны начинают удлиняться, а когда их размер становится сравнимым с расстоянием между ними, то изинговский порядок разрушается и наблюдается “вигнеровская жидкость” отдельных солитонов.

Я хочу поблагодарить своего научного руководителя Сергея Ивановича Мухина за то, что он помог мне сделать мои первые шаги в теоретической физике и многому меня научил, за сложные и интересные задачи, за многолетнюю поддержку во всех учебно-научных и других вопросах, за веру в мои силы.

Мне очень приятно поблагодарить Сергея Александровича Бразовского и Наталью Николаеву Кирову за профессиональные советы, сотрудничество и доброе отношение. Я рад, что знаком с этой уникальной семьей физиков-теоретиков и очень хороших людей.

Я признателен Д.И. Хомскому, Ярославу Герасименко, Николаю Андрееву за полезные обсуждения, а также М. Мостовому за полезную переписку.

Я благодарен директору ИНМиН МИСиС С.Д. Калошкину за то, что в 2008 году он нашел мне замечательного научного руководителя С.И. Мухина, определив мою траекторию на долгие годы вперед.

Я благодарен всему коллективу кафедры теоретической физики и квантовых технологий МИСиС за помощь, поддержку и ценные советы, в особенности Ярославу Родионову, Марии Клюевой, Максиму Теленкову, Павлу Григорьеву, Борису Хейфецу и Тимуру Галимзянову.

Спасибо Венере Насретдиновой за ценные советы, касающиеся диссертации.

Хочу выразить благодарность Фонду Династия за долгосрочную поддержку, и лично Дмитрию Борисовичу Зимину, Дарье Болотинской, Марии Колесниковой. Я верю, что большое дело, которое делал Фонд для российской науки, не пропадет бесследно.

Наконец, я хочу выразить свою глубокую благодарность свей семье: родителям Ольге Валерьевне и Игорю Васильевичу за те многолетние усилия, которые они в меня вложили, любовь и поддержку; тете Татьяне Валерьевне за помощь и поддержку; и конечно, своей жене Анастасии за домашнее тепло. Эта диссертация и всё то, чего я добиваюсь – только благодаря вам.

Приложения

A Приложения к главе 2

A.1 Энергия вихря в параллельном электрическом поле

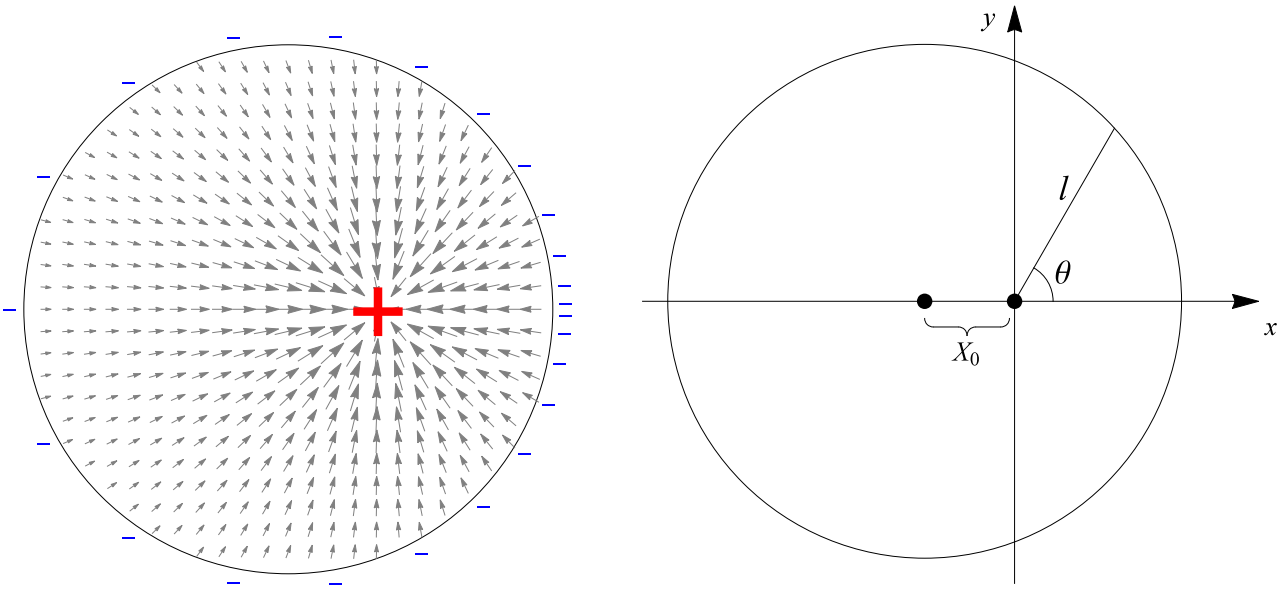
В этом приложении мы вычислим энергию заряженного вихря в однородном электрическом поле, параллельном плоскости пленки. Как объяснялось в основном тексте главы 2, ядро магнитного вихря приобретает электрический заряд (2.11) из-за магнитоэлектрической связи (2.5). Поскольку образец электрически нейтрален, его граница приобретает отрицательный заряд той же величины, который также необходимо принимать во внимание (см. рис. A.1a). Этот краевой заряд эффективно экранирует заряд вихря, изменяя его энергию в электрическом поле.

Пусть наш образец представляет собой диск с радиусом R, который содержит один вихрь с топологическим зарядом n, расположенный на расстоянии X_0 от центра диска. Выберем систему координат, как показано на рис. A.1b, и электрическое поле $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$.

Из (2.8) электрическая поляризация одиночного вихря (1.13) может быть выражена как

$$\mathbf{P} = \gamma\chi_e M_0^2 \begin{pmatrix} -\partial_y\phi \\ \partial_x\phi \end{pmatrix} = -\frac{k\gamma\chi_e M_0^2}{r} \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

Поскольку мы вычисляем линейный отклик, член $\chi_e\mathbf{E}$ был опущен из (2.8). Таким образом, электрическая энергия магнитного вихря равна $W_{me} =$



(a) Распределение поляризации для одиночного вихря.

(b) Система координат.

Рис. А.1: (а) Распределение электрической поляризации для одного вихря. Ядро вихря заряжено положительно; край образца отрицательно заряжен. (б) Система координат. Ядро вихря расположено в начале координат; центр диска находится в $(-X_0, 0)$.

$-h \int \mathbf{PE}\, d^2r$ или

$$W_{me} = kh\gamma\chi_e M_0^2 \int_0^{2\pi} d\theta (E_x \cos\theta + E_y \sin\theta) l(\theta). \tag{A.2}$$

Так как $l(\theta) = \sqrt{R^2 - X_0^2 \sin^2\theta} - X_0 \cos\theta$ – четная функция θ, то нечетный член $E_y \sin\theta$ исчезает, отсюда

$$W_{me} = -\pi kh\gamma\chi_e M_0^2 E_x X_0. \tag{A.3}$$

Используя (2.11), получим $W_{me} = -\frac{1}{2} q_e E_x X_0$ или для произвольного смещения центра вихря относительно центра диска ($\mathbf{r} = (X_0, Y_0)$):

$$W_{me} = -\frac{1}{2} q_e \mathbf{Er}, \tag{A.4}$$

Таким образом, для круговой геометрии полная энергия образца с одиночным вихрем составляет ровно половину электростатической энергии, учитывающей только заряженный центр вихря. Такое эффективное экранирование

является следствием краевого заряда, и его точное значение зависит от геометрии образца. Отметим также, что поскольку поляризация (A.1) является линейной по фазовому углу намагниченности ϕ, то для конфигурации вихрь-антивихрь результат (A.4) остается в сила, где $\mathbf{r}$ теперь обозначает вектор, соединяющий центр антивихря и вихря.

A.2 Термоактивированные вихревые пары

В этом приложении мы находим вклад в поляризуемость, даваемый от термактивированными дипольных парами при $T < T_{BKT}$. Поскольку химический потенциал пары достаточно велик, концентрация пар низка, и мы можем использовать приближение невзаимодействующих пар. Поэтому мы можем найти поляризуемость одной пары, а затем умножить ее на число пар, и получить поляризуемость ансамбля BA пар.

Во-первых, найдем поляризуемость одной BA пары, представляющей собой электрический диполь. Энергия дипольной пары представляет собой сумму энергии магнитного взаимодействия вихря и антивихря (2.18) и магнито-электрической энергии (A.4), полученной в Приложении A.1:

$$W = 2q_m^2 \ln(r/a) - q_e E x/2 \tag{A.5}$$

Здесь $\mathbf{r} = (x, y)$ – вектор, соединяющий центры антивихря и вихря; электрическое поле выбрано параллельным оси x. Статсумма для такого диполя

$$Z(E) = \frac{S}{a^2} \int \frac{d^2 r}{a^2} \exp\left(-\beta(2q_m^2 \ln(r/a) + q_e E x/2)\right)$$

где $S = \pi R^2$ – площадь системы, которая появляется из-за интегрирования по центру масс диполя. В нулевом электрическом поле получим

$$Z(0) \equiv Z_0 = \frac{S}{a^2} \frac{\pi}{\beta q_m^2 - 1}$$

Средний дипольный момент пары

$$p(E) = \frac{S}{Z(E) a^2} \int \frac{d^2 r}{a^2} \frac{q_e}{2} x \exp\left(\beta(-2q_m^2 \ln(r/a) + q_e E x/2)\right)$$

Формально этот интеграл расходится при больших r. Для его вычисления, применим подход аналогичный использованному в работе [21]. Так как мы вычисляем линейный отклик (то есть берем предел $E \to 0$), то расходимость по r обрезается на радиусе образца R. Поэтому, если сначала взять производную $dp(E)/dE$, а затем положить $E = 0$, то мы получим корректный результат. Следовательно, поляризуемость одной пары

$$\alpha_1 = \left.\frac{\partial p}{\partial E}\right|_{E=0} = \frac{\beta q_e^2 S}{4 Z_0 a^2} \int \frac{d^2 r}{a^2} x^2 \exp\left(-2\beta q_m^2 \ln(r/a)\right),$$

интегрируя которую, получим

$$\alpha_1 = \frac{\beta q_e^2 a^2}{8} \frac{\beta q_m^2 - 1}{\beta q_m^2 - 2}. \tag{A.6}$$

Во-вторых, оценим концентрацию ВА пар. Поскольку слабое поле не влияет на их концентрацию, сделаем оценку для $E = 0$. Более того, из-за того, что химический потенциал пары довольно большой по отношению к T_{BKT} ($\mu \simeq -\pi q_m^2$, $T_{BKT} \simeq q_m^2/2$, [21]), концентрация ВА пар всегда мала. Вычислим большую статсумму системы невзаимодействующих ВА пар:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_n \exp(\beta\mu n) \sum_{\substack{\text{different} \\ \text{config}}} \exp\left(-\beta(W(\mathbf{r}_1) + ... + W(\mathbf{r}_n))\right) = \\
&= \sum_n \frac{1}{n!} \left(\exp(\beta\mu) \frac{S}{a^2} \int \frac{d^2 r}{a^2} \exp\left(-\beta W(\mathbf{r})\right) \right)^n = \\
&= \exp(e^{\beta\mu} Z_0).
\end{aligned}$$

Таким образом, число термоактивированных пар равно

$$N_{pairs} = \frac{T}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \mu} = e^{\beta\mu} Z = \frac{\pi S e^{\beta\mu}}{(\beta q_m^2 - 1) a^2} \tag{A.7}$$

Наконец, используя (A.6) и (A.7), найдем поляризуемость образца, с учетом всех дипольных пар:

$$\alpha_{thermal} = N_{pairs} \alpha_1 = \frac{\pi^2 R^2 \beta q_e^2 e^{\beta\mu}}{4(\beta q_m^2 - 2)} \tag{A.8}$$

Отсюда можно вывести электрическую восприимчивость $\chi_e = \alpha_{thermal}/S$, и мы видим, что она согласуется с восприимчивостью Костерлица-Таулесса [21]

с той разницей, что теперь мы имеем электрический заряд $q_e/2$ вместо q_m в числителе. Это естественно, поскольку отклик на электрическое поле зависит от величины электрического заряда q_e, тогда как сила взаимодействия вихрей определяется "магнитным зарядом" q_m.

Таким образом, при низких температурах $T \to 0$, $\alpha_{thermal}$ обращается в нуль экспоненциальным образом, тогда как вклад индуцированных вихрей расходится как $\alpha_{induced} \sim 1/T^{1-\eta}$; поэтому $\alpha_{induced}$ доминирует над $\alpha_{thermal}$. Напротив, вблизи T_{BKT}, $\alpha_{thermal}$ расходится и доминирует над $\alpha_{induced}$.

Б Приложения к главе 3

Б.1 Аналитические результаты для нейтральной системы

2D система

Рассмотрим высокотемпературный режим $T \gtrsim T_1$. Используя точное выражение для концентрации солитонов при критической температуре [129]

$$\nu(T_1, J_\perp) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \cosh \frac{2J_\perp}{T_1} \arctan \frac{1}{\sinh 2J_\perp/T_1},$$

для случая $\nu \ll 1$, мы получаем

$$T_1 \approx \frac{2J_\perp}{\pi\nu}. \tag{Б.1}$$

Теперь рассмотрим низкотемпературный режим $T \ll J_\perp$. В этом пределе все бисолитонные пары уменьшаются до минимального размера в один перевернутый спин, поэтому намагниченность становится равной $m = 1-2\nu_{bs} = 1-\nu$. Используя точное выражение для намагниченности в двумерной модели Изинга (1.9) мы находим, что

$$J_{||}(T, \nu) = \frac{T}{2} \operatorname{arcsinh} \frac{1}{\sinh(2J_\perp/T)\sqrt{1-(1-\nu)^8}} \approx \frac{T \exp(-2J_\perp/T)}{2\sqrt{2\nu}}. \tag{Б.2}$$

Кроссовер из состояния газа бикинков в состояние растущих поперечных стержней происходит, когда $J_{||}(T, \nu)$ становится порядка $J_\perp$. Тогда из (Б.2),

для случая $\nu \ll 1$, мы получаем с логарифмической точностью

$$T_2 \approx \frac{4J_\perp}{\ln(1/\nu)}. \tag{Б.3}$$

3D система

Чтобы оценить зависимость $J_{||}(T,\nu)$ при низких температурах $T \ll J_\perp$, мы используем приближение, в котором взаимодействия в поперечных плоскостях рассматриваются точно, а слабое взаимодействие между плоскостями учитывается с помощью теории среднего поля.

В этом приближении энергия внутрицепочечного взаимодействия, приходящаяся на один спин $S_{n,\alpha}$, равна

$$-\frac{1}{2}J_{||}S_{n,\alpha}(S_{n+1,\alpha}+S_{n-1,\alpha}) \approx -J_{||}S_{n,\alpha}m \equiv -HS_{n,\alpha}, \tag{Б.4}$$

где H – эффективное магнитное поле. Поэтому намагниченность для трехмерного случая можно получить как намагниченность двумерной модели Изинга в слабом эффективном магнитном поле:

$$m(T) \approx m_{2D}(T) + \chi(T)H, \tag{Б.5}$$

где $\chi(T)$ – магнитная восприимчивость двумерной модели Изинга. Используя (1.9) и (Б.5), мы получаем

$$m(T) \approx \left(1-(\sinh 2J_\perp/T)^{-4}\right)^{1/8}(1+\chi(T)J_{||}). \tag{Б.6}$$

Теперь свяжем намагниченность m с концентрацией солитонов. Поскольку все слои намагничены в одном направлении, введем отклонения от средней намагниченности $\delta S_{n,\alpha} = S_{n,\alpha} - m$, так что $\langle S_{n,\alpha}S_{n+1,\alpha}\rangle = m^2 + \langle \delta S_{n,\alpha}\delta S_{n+1,\alpha}\rangle$.

При $T \to T_2$ имеем $J_{||} \to 0$ и $\langle \delta S_{n,\alpha}\delta S_{n+1,\alpha}\rangle \to 0$, поэтому мы можем разложить последнее выражение по степеням $J_{||}$:

$$\langle \delta S_{n,\alpha}\delta S_{n+1,\alpha}\rangle = \alpha(T,J_\perp)J_{||} + O(J_{||}^2). \tag{Б.7}$$

Используя (3.2), (Б.6), (Б.7) получим:

$$J_{||}(T, J_\perp, \nu) = \frac{1 - 2\nu - \left(1 - \sinh^{-4} \frac{2J_\perp}{T}\right)^{1/4}}{2\chi(T, J_\perp)\left(1 - \sinh^{-4} \frac{2J_\perp}{T}\right)^{1/4} - \alpha(T, J_\perp)}. \qquad (Б.8)$$

Из условия $J_{||}(T_2, J_\perp, \nu) = 0$ можно перевывести результат работы [129]:

$$T_2 = \frac{2J_\perp}{\operatorname{arcsinh}\left([1 - (1 - 2\nu)^4]^{-1/4}\right)} \approx \frac{8J_\perp}{\ln 2/\nu}. \qquad (Б.9)$$

Чтобы оценить зависимость $J_{||}(T, J_\perp, \nu)$, предположим, что знаменатель выражения (Б.8) не имеет специальной малости. Таким образом, с точностью до множителя порядка 1, мы можем пренебречь α в (Б.8).

Для $\chi(T, J_\perp)$ воспользуемся результатами работ [161, 162], где было продемонстрировано что χ можно разложить в быстро сходящийся ряд

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \frac{m^2}{T} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{\chi}^{(2n)}(T), \\ \hat{\chi}^{(2)} &= \frac{(1 + k_<^2)E(k_<) - (1 - k_<^2)K(k_<)}{3\pi(1 - k_<)(1 - k_<^2)^{3/4}}. \end{aligned} \qquad (Б.10)$$

Здесь E и K – полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно, $k_< = (\sinh 2J_{||}/T \sinh 2J_\perp/T)^{-1}$. При $T \ll J_\perp$, $k_< \approx \exp(-4J_\perp/T) \ll 1$, поэтому $\hat{\chi}^{(2)} \approx \frac{1}{4}k_<^2$, и χ можно оценить как:

$$\chi(T, J_\perp) \propto \frac{m^2 \exp(-8J_\perp/T)}{4T} \propto \frac{\exp(-8J_\perp/T)}{4T}. \qquad (Б.11)$$

Раскладывая (Б.8) в окрестности $T = T_2$ и используя (Б.11), получаем желаемую оценку:

$$J_{||}(T, J_\perp, \nu) \propto \frac{64J_\perp \exp(-8J_\perp/T_2)}{T_2}(T - T_2) \propto 4\nu \ln\frac{2}{\nu} \cdot (T - T_2). \qquad (Б.12)$$

Мы видим, что зависимость от $J_\perp$ содержится только в T_2 и что наклон прямой зависит только от ν.

Б.2 Аналитические результаты для заряженной системы

В данном приложении представлены аналитические и качественные результаты влияния кулоновского взаимодействия. Мы рассмотри наиболее интерес-

ный случай, “умеренного” (промежуточного) кулоновского взаимодействия, то есть такого которое локально является слабым, но может влиять на крупномасштабные структуры из-за своего дальнодействующего характера; количественное описание этого случая дано ниже.

2D система

Начнем с двумерного случая. Следуя нашему моделированию и известным точным результатам для нейтральной системы [129], предположим, что основными “строительными” элементами все еще являются прямые поперечные стержни неразделенных бикинков. Длины стержней l мы будем считать безразмерными; физический масштаб равен $a_\perp$.

Кулоновская энергия стержня бикинков равна

$$\frac{4e^2}{\epsilon a_\perp^2}\int\int\frac{dydy'}{|y-y'|}\exp\left(-\frac{|y-y'|}{l_s a_\perp}\right)\approx 4V_C l\ln\min\{l,l_s\}$$

где $V_C=e^2/\epsilon a_\perp$ – параметр кулоновского взаимодействия, $l_s a_\perp$ – длина экранирования, определяющаяся самими солитонами, остаточными электронами зоны проводимости или внешними носителями; она становится важной при $l>l_s$. Здесь мы рассмотрим случай промежуточной силы кулоновского взаимодействия, когда локально оно является слабым, т.е. $V_C\ll J_\perp$, но становится значимым для крупномасштабных структур, что происходит в случае, если $V_C\ln l^*/J_\perp$ не мало, т.е. $V_C\gtrsim V_{inter}=J_\perp/\ln l^*$ (l^* – характерная длина стержней).

Из-за равновесия между стержнями по отношению к обмену строительными единицами - бикинками - химические потенциалы μ_l стержней длины l связаны как $\mu_l=2l\mu^*$; здесь мы включаем в определение химического потенциала неразделенной бисолитонной пары $2\mu^*$ не только энергию отдельных солитонов $2E_s$, но также и энергию их кулоновского взаимодействия друг с другом $e^2/\epsilon a_{||}$, так что $\mu^*=\mu_s-E_s-e^2/2\epsilon a_{||}$.

Функция распределения стержней по длинам

$$n(l) = \exp(-4\beta J_\perp + 2\beta\mu^* l - 4\beta V_C l \ln(\min\{l, l_s\}))$$

Зависимость $\mu^*(\nu)$ должна быть определена из условия самосогласования

$$\begin{aligned}\nu &= 2\sum_l n(l) l = \\ &= 2\exp(-4\beta J_\perp)\sum_l l \exp(\beta(2\mu^* l - 4V_C l \ln(\min\{l, l_s\})))\end{aligned} \qquad \text{(Б.13)}$$

При приближении к режиму формирования полос, сумма определяется большими l, и суммирование по l можно заменить интегрированием.

Во-первых, рассмотрим случай неэкранированного кулоновского взаимодействия, когда характерная длина стержня $l^* \ll l_s$. В этом случае

$$\nu \exp(4\beta J_\perp) = 2\int dl\ l \exp(\beta(2\mu^* l - 4V_C l \ln l)) \qquad \text{(Б.14)}$$

Показатель экспоненты $S(l) = \beta(2\mu^* l - 4V_C l \ln(l))$ в (Б.14) быстро убывает при увеличении l и интеграл сходится благодаря члену V_C при любых, даже положительных μ^*. Для отрицательных μ^* показатель экспоненты быстро убывает при всех l, поэтому соответствующая сумма (Б.13) определяется первым слагаемым $n(1) = \exp(\beta(-4J_\perp + 2\mu^*)))$ и $\nu \approx n(1)$. С понижением температуры, μ^* возрастает, но при достижении нулевого значения, никаких качественных изменений не происходит (в отличие от случая нейтральных систем). Наконец, когда μ^* становится положительным, функция $S(l)$ становится возрастающей при $1 < l < l^*$ где положение её максимума, определяемого из $dS/dl = 0$, есть $l^* \approx C\exp(\mu^*/2V_C)$. Вычислим интеграл (Б.14) в седловом приближении:

$$\begin{aligned}\nu \exp(4\beta J_\perp) &\approx 2\left(\frac{2\pi}{|d^2S/dl^2|}\right)^{1/2} l^* \exp(S(l^*)) \propto \\ &\propto \left(\frac{T}{V_C}\right)^{1/2} l^{*3/2} \exp\left(-4J_\perp/T\right) \exp\left(\tilde{C}V_C l^*/T\right)\end{aligned}$$

Пренебрегая предэкспоненциальными числовыми коэффициентами, можно найти обратную функцию $l^*(\nu)$ и определить лидирующий вклад в зависимость $\mu^*(\nu)$ при $T \to 0$:

$$\tilde{C} l^* \approx \frac{J_\perp}{V_C} + \frac{T}{8V_C} \ln\left(\frac{\nu^2 V_C^4}{T J_\perp^3}\right), \; \mu = 2V_C \ln \frac{J_\perp}{V}$$

Отсюда получим значение насыщения длины стержней $l^*(T \to 0) \simeq J_\perp / V_C$ – оно конечно, но велико, в силу нашего определения промежуточного кулоновского взаимодействия. Химический потенциал насыщается при положительном значении, в отличие от нейтральных систем, как в размерности $D = 2$, так и в $D = 3$. Если мы сейчас попытаемся найти $V_{inter} = J_\perp / \ln l^*$, мы получим уравнение $\ln(\tilde{C} \cdot J_\perp / V_{inter}) = J_\perp / V_{inter}$, которое обладает только решениями $J_\perp / V_{inter} \sim 1$. Это означает, что в 2D системах в отсутствии экранирования не существует режима слабого кулоновского взаимодействия во всей области температур: сколь угодно малое значение кулоновского параметра V_C качественно меняет зависимость средней длины стержней от температуры при $T \to 0$ (от $l \to \infty$ в случае $V_C = 0$, к $l \to l^*$ в случае $V_C \neq 0$).

Во-вторых, рассмотрим случай, когда экранирование играет роль, то есть $l_s < l^*$. Тогда $\ln l$ насыщается до $\ln l_s$ и кулоновское взаимодействие приводит лишь к сдвигу химического потенциала $\mu^* \Rightarrow \tilde{\mu} = \mu^* - 2V_C \ln l_s$. Тогда из (3.3), (Б.2) и (Б.13) мы получаем

$$\begin{aligned} \nu &\approx \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{4J_\perp}{T}\right) \left(\frac{T}{\tilde{\mu}}\right)^2, \; \tilde{\mu} \approx -\frac{T}{\sqrt{2\nu}} \exp\left(-\frac{2J_\perp}{T}\right) < 0, \\ l^* &\approx \frac{T}{2|\tilde{\mu}|} \approx \sqrt{\frac{\nu}{2}} \exp\left(\frac{2J_\perp}{T}\right) > l_s, \end{aligned} \qquad \text{(Б.15)}$$

что совпадает с соответствующим пределом точного результата работы [129] при замене $\mu \Rightarrow \tilde{\mu}$. Обращение этого соотношения дает химический потенциал отдельных бисолитонов $\mu^*(\nu, T)$, определяемый балансом с резервуаром растущих стержней. При $T \to 0$ он насыщается до значения $\mu^* \to 2V_C \ln l_s$, но l^* продолжает экспоненциально расти в зависимости от $1/T$. В этом случае,

режим промежуточного кулоновского взаимодействия определяется длиной экранирования l_s: $J_{perp} \gg V \gtrsim V_{inter} = J_\perp / \ln l_s$.

В отсутствие внешних носителей, длину экранирования можно определить самосогласованным образом, рассматривая вклад бисолитонов и их стержней. Мы сделаем это, полагая, что трехмерное пространство составлено из слоев взаимодействующих только за счет кулоновского взаимодействия заряженных солитонов (отметим, что численное моделирование 2D систем проведено для другого случая – одного двухмерного слоя, погруженного в трехмерное пространство, с экранированием внешними носителями). По определению, размерная длина экранирования $a_\perp l_s$ дается производной трехмерной плотности зарядка $e\nu/(a_{||}a_\perp^2)$ по химическому потенциалу $d\nu/d\mu$. Используя (Б.15), получим $d\nu/d\mu \approx 4\nu l^*/T$, откуда определим l_s

$$\frac{1}{l_s^2} = \frac{4\pi(2e)^2}{\epsilon a_{||}a_\perp^2}\frac{d\nu/2}{d\mu} \approx 32\pi\nu\frac{V_C}{T}\frac{l^*}{a_{||}a_\perp} \ ,$$

$$\frac{(l^* a_\perp)^2}{l_s^2} \approx 32\pi\nu\frac{V_C}{T}\frac{a_\perp}{a_{||}}l^{*3}$$

Мы видим, что неэкранированный режим $l^* < l_s$ может быть осуществлен только для очень малых ν и при этом не слишком низких температурах. Наиболее распространенный случай будет описываться соотношениями (Б.15), имитирующими нейтральную систему, но со увеличенным химическим потенциалом и соответствующим сильным увеличением концентрации несконденсированных бикинков.

3D система

Рассмотрим теперь трехмерный случай. Предположим, что основными элементами являются плоские би-диски (“линзы”) неразделенных бисолитонов радиусов R (в безразмерных единицах; физический масштаб равен $a_\perp$).

Кулоновская энергия диска равна

$$\frac{4e^2}{\epsilon a_\perp^4}\int\int\frac{d^2r d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{a_\perp l_s}\right) \approx 4\pi V_3 R^2 \min\{R, l_s\},$$

где $V_3 = CV_C = Ce^2/\epsilon a_\perp$ и $C = 16/3$ при $R \ll l_s$ или $C = 2\pi$ при $R \gg l_s$. Длина экранирования l_s начинает играть роль при $R > l_s$. Предположение о промежуточной силе кулоновского взаимодействия (то есть такого, которое является локально слабым, но подавляет образование поперечных доменных стенок) в трехмерном случае превращается в $J_\perp \gg V_3 \gg J_\perp/(H \min\{H, l_s\})$ (для образца с поперечным сечением размерами $H \times H$).

Равновесное соотношение между парциальными химическими потенциалами такое же как и прежде: $\mu_R = 2\pi R^2 \mu$. Тогда функция распределения дисков по размерам:

$$n(R) = \exp(\beta(-4\pi R J_\perp + 2\pi R^2 \mu - 4\pi V_3 R^2 \min\{R, l_s\}), \qquad \text{(Б.16)}$$

где первый член – межцепочечная энергия конфацнмента, потерянная по периметру диска. Однако в трехмерном случае появляются новые элементы, это доменные стенки с химическим потенциалом $\mu_{wall} = \mu H^2$. Зависимость $\mu(\nu)$ определяется из условия самосогласования:

$$\begin{aligned}\nu &= 2\sum_R \pi R^2 n(l) + H^2 n_{wall} = \\ &= 2\pi \sum_R R^2 \exp(4\pi\beta(R^2\mu/2 - J_\perp R - V_3 R^2 \min\{R, l_s\}))+ \\ &+ H^2 \exp(\beta\mu H^2 - \beta V_3 H^2 \min\{l_s, H\}). \qquad \text{(Б.17)}\end{aligned}$$

Даже в случае $V_3 = 0$, стенки не дают вклада в сумму (Б.17) если $\mu < 0$. Однако, при понижении температуры, $|\mu|$ должен также уменьшаться, чтобы система могла вместить все солитоны. Когда μ достигает значения $\mu \propto -T/H^2 \approx 0$, конденсируется первая стенка, и затем значение μ остается равным нулю аналогично конденсации Бозе-Эйнштейна, но в реальном пространстве, а не в обратном.

1. Сначала рассмотрим случай неэкранированного кулоновского взаимодействия $l_s > H$. В этом случае сумма (Б.17) сходится благодаря двум членам в показателе экспоненты: $J_\perp R$ который присутствует и для нейтрального слу-

чая, а также члену V_3R^3, появляющемуся из-за кулоновского взаимодействия. Если $\beta J_\perp \gg 1$ либо $\beta V_3 \gg 1$, то при высоких температурах основной вклад в сумму вносят минимальные диски с $R \propto 1$. Напомним, что рассматриваемый случай умеренного кулоновского взаимодействия подразумевает, что оно не существенно на минимальных расстояниях, то есть $J_\perp \gg V_3$, поэтому из двух приведенных выше неравенств достаточно только первого. В этом случае

$$\nu \approx n(1) \approx \exp(2\beta\mu - 8\beta J_\perp),$$

и оценка для температуры начала поперечной агрегации $T_2 \propto J_\perp / \ln(1/\nu)$, полученная для нейтрального случая, сохраняется и здесь.

Однако, когда избыточные солитоны конденсируется в первые стенки, для них R достигает поперечного размера образца H. Тогда в случае слабого кулоновского взаимодействия $V_3 \ll J_\perp/H^2$, оно не вносит никаких качественных изменений по сравнению с нейтральным случаем $V_3 = 0$. В этом случае T_2 лишь незначительно уменьшается на величину порядка $\Delta T_2 \propto V_3 H^2 / \ln(1/\nu)$.

В случае же умеренного кулоновского взаимодействия: $J_\perp \gg V_3 \gg J_\perp/H^2$ стенки не могут образоваться. Мы можем оценить максимальный размер дисков аналогично 2D-случаю. При уменьшении температуры, химический потенциал $\mu < 0$ растет, и при достижении значения $\mu = 0$ он продолжает расти. Это означает, что сумма (Б.17) теперь определяется большими значениями R и суммирование может быть аппроксимировано интегрированием по R,

$$\nu = 2\pi \int dR\ R^2 \exp(4\pi\beta(R^2\mu/2 - J_\perp R - V_3 R^3)). \qquad \text{(Б.18)}$$

Показатель экспоненты $S(R) = 4\pi\beta(R^2\mu/2 - J_\perp R - V_3R^3)$ в (Б.18) убывает еще быстрее при больших R, по сравнению с двумерным случаем, и интеграл сходится. Зависимость $S(R)$ имеет локальные экстремумы в точках $R_\pm = (\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 12V_3J_\perp})/V_3$ (рис. Б.1). При некотором критическом значении $\mu \geq \mu_{cr} = 4\sqrt{V_3 J_\perp}$ значение в локальном максимуме становится

положительным: $S(R_+) \geq 0$, что означает, что становится энергетически выгодным возникновение в системе больших дисков с характерными радиусами $R^* = R_+(\mu_{cr}) = \sqrt{J/V_3} \gg 1$. Чтобы найти соответствующее критическое значение $\nu_{cr}(T) = \nu(\mu_{cr}, T)$ мы используем седловое приближение для интеграла по R (основной вклад в него дает область только область $R \sim R^*$)

$$\nu_{cr}(T) \approx 2\pi R^{*2} \left(\frac{2\pi}{|d^2S/dR^2|} \right)^{1/2} e^{S(R^*)} \approx \pi T^{1/2} J^{3/4} V_3^{-5/4}.$$

При $T \to 0$, $\nu_{cr}(T)$ убывает и достигает фиксированной концентрации солитонов ν, при $T \approx \nu^2 V_3 (V_3/J)^{3/2}$, когда и начинают появляться большие диски.

2. Теперь рассмотрим случай экранированного кулоновского взаимодействия $l_s < H$. При $R^* < l_s < H$, эффект экранирования практически незаметен, так как оно не может повлиять даже на самые большие диски с размерами $\sim R^*$, но экранирование может повлиять на взаимодействие меду дисками. Однако при $l_s < R^*$, экранирование становится эффективным, так как теперь диски, дорастающие до размеров $\sim R^*$, не испытывают препятствий к росту со стороны кулоновского взаимодействия, поэтому они прорастают в доменные стенки. Член, связанный со стенками, появляется в сумме (Б.17), когда химический потенциал достигает значения $\mu \approx V_3 l_s$. Поэтому, как и в двумерном случае, при $l_s < R^*$ экранирование является эффективным и качественно результаты аналогичны нейтральному случаю, только со сдвинутым эффективным химическим потенциалом солитонов $\tilde{\mu} = \mu - V_3 l_s$, .

Подытоживая данное приложение отметим, что слабое кулоновское взаимодействие $V_3 \ll J_\perp/H^2$ лишь незначительно сдвигает химический потенциал солитонов и немного уменьшает температуру перехода T_2, не препятствуя образованию стенок.

Для промежуточного кулоновского взаимодействия $J_\perp/H^2 \ll V_3 \ll J_\perp$ в зависимости от длины экранирования l_s наблюдаются разные режимы. При $l_s < R^*$ экранирование является эффективным, и поэтому кулоновское взаи-

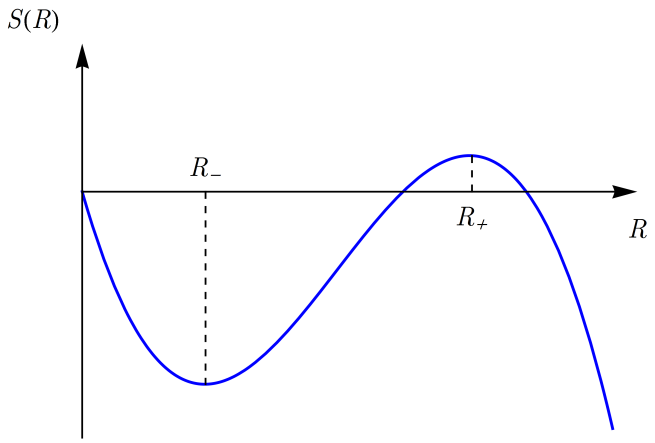


Рис. Б.1: Функция $S(R)$ и ее два локальных экстремума $R_{\pm}$.

модействие не может воспрепятствовать росту поперечных доменных стенок и приводит только к сдвигу эффективного химического потенциала солитонов и температуры T_2. С качественной точки зрения этот случай, а также случай слабого кулоновского взаимодействия, похожи на случай нейтральных солитонов.

При $l_s > R^*$ кулоновское взаимодействие эффективно не экранировано, поэтому оно не дает образоваться поперечным стенкам. Образуются только бисолитонные диски с максимальным размером $R^* \approx \sqrt{J_\perp/V_3} \gg 1$.

Публикации автора по теме диссертации

Из списка ВАК:

1. P.I. Karpov, S.I. Mukhin, Polarizability of electrically induced magnetic vortex plasma, *Phys. Rev. B* **95**, 195136 (2017).

2. P. Karpov, S. Brazovskii, Phase transitions in ensembles of solitons induced by an optical pumping or a strong electric field, *Phys. Rev. B* **94**, 125108 (2016).

Труды конференций:

1. Карпов П. И. Диэлектрическая восприимчивость мультиферроиков с магнитными вихрями. Всероссийский молодежный конкурс научно-исследовательских работ по фундаментальной и прикладной физике-2012. Сборник трудов. Часть 1. НИИ радиоэлектроники и лазерной техники, Москва (2012), с. 144-146.

2. Petr Karpov, Sergei Mukhin, Dielectric susceptibility of magnetoelectric thin films with vortex-antivortex dipole pairs. International Conference "Interaction of superconductivity and magnetism", ПКЦ Альтекс, Москва (2015), с. 30-31.

3. Карпов П.И., Бразовский С.А. Фазовые переходы в ансамблях солитонов, индуцированные оптической накачкой или сильным электрическим полем. В книге: Современные проблемы физики и технологий тезисы докладов V Международной молодежной научной школы-конференции. НИЯУ МИФИ, РФФИ, ФИАН им. Лебедева, Москва (2016), с. 206-208.

4. Karpov P.I., Mukhin S.I., Polarizability of electrically induced magnetic vortex “atoms”, Moscow International Symposium on Magnetism, Book of Abstracts, Moscow State University, Moscow (2017), p. 371.

5. Petr Karpov and Serguei Brazovskii, Modeling of formation and evolution of domain walls' globes and networks in $1T - TaS_2$, International Research School and Workshop on Electronic Crystals, ECRYS-2017, Cargese (2017), p. 95.

Работы, находящиеся в печати и препринты:

1. P.I. Karpov, S.I. Mukhin, Polarizability of electrically induced magnetic vortex “atoms”, *EPJ Web of Conf.*, принята к печати (2017).

2. P.I. Karpov, S.I. Brazovskii, Modeling of networks and globules of charged domain walls observed in pump and pulse induced states, arXiv:1709.01912 (2017).

Литература

[1] Photoinduced Phase Transitions, edited by K. Nasu (World Scientific, Singapore, 2004).

[2] Proceedins of the 4th International Conference on Photoinduced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, T. Luty and A. Lewanowicz Eds., Acta Physica Polonica A, **121** (2012).

[3] C.H. Ahn *et al*, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1185 (2006).

[4] Electronic States and Phases Induced by Electric or Optical Impacts, S. Brazovskii and N. Kirova ed., Eur. Phys. J. Special Topics **222**, #5, (2013)

[5] Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 19 (1937).

[6] Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **20**, 1064, (1950).

[7] Y. Nambu, *Phys. Rev.* **117** 648 (1960).

[8] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg (1962), *Phys. Rev.* **127** 965 (1962).

[9] N.D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966).

[10] D.R. Nelson, *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press (2002).

[11] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press (1995).

[12] E. Ising, *Zs. Physik* **31**, 253 (1925).

[13] S.G. Brush, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883 (1967).

[14] А.Ю. Захаров, *Решеточные модели статистической физики*: Учеб.–метод. пособие / НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, (2006), 74 с.

[15] R.E. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **32**, 477 (1936).

[16] C. Domb in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb and M.S. Green (eds.), vol. III, Academic, New York (1974).

[17] H.A. Kramers and G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).

[18] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65** 117 (1944).

[19] B.M. McCoy, T.T. Wu, *The two-dimensional Ising model*, Harvard University Press (1973).

[20] В.Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970).

[21] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *J.Phys.C* **6**, 1181 (1973).

[22] I.E. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP* **10**, 628 (1959).

[23] D.N. Astrov, *Sov. Phys. JETP* **11**, 708 (1960).

[24] H. Schmid, *Ferroelectrics* **162**, 317 (1994).

[25] D.I. Khomskii, *Coupled electricity and magnetism in solids: multiferroics and beyond*, chapter in "Multiferroic Materials: Properties, Techniques, and Applications", ed. J. Wang (CRC Press, 2016), p.1; arXiv:1510.05174.

[26] M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Meier, and M. Trassin, *Nature Reviews Materials* **1**, 16046 (2016).

[27] Y. Tokura, S. Seki, and N. Nagaosa, *Rep. Prog. Phys.* **77**, 076501 (2014).

[28] A.P. Pyatakov, A.K. Zvezdin, *Phys.Usp.* **55**, 557?581 (2012).

[29] N.A. Spaldin, S.-W. Cheong, and R. Ramesh, *Physics Today* **63**, 38 (2010).

[30] D.I. Khomskii, *Physics* **2**, 20 (2009).

[31] I. Dzyaloshinskii, *EPL* **83**, 67001 (2008).

[32] A.S. Logginov, G.A. Meshkov, A.V. Nikolaev, E.P. Nikolaeva, A.P. Pyatakov, and A.K. Zvezdin, *Appl. Phys. Lett* **93**, 182510 (2008).

[33] A.P. Pyatakov, D.A. Sechin, A.S. Sergeev, A.V. Nikolaev, E.P. Nikolaeva, A.S. Logginov, and A.K. Zvezdin, *EPL* **93**, 17001 (2011).

[34] J. Seidel, *Topological Structures in Multiferroics Domain Walls, Vortices, and Skyrmions*, chapter in "Multiferroic Materials: Properties, Techniques, and Applications", ed. J. Wang (CRC Press, 2016), p.315.

[35] S.S.P. Parkin, M. Hayashi, L. Thomas, *Science* **320**, 190 (2008).

[36] A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, *Nat. Nanotechnol* **8**, 152 (2013).

[37] S. Seki, X.Z. Yu, S. Ishiwata, Y. Tokura, *Science* **336** 198 (2012).

[38] P.-J. Hsu, A. Kubetzka, A. Finco, N. Romming, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, *Nat. Nanotechnol.* **12**, 123 (2017).

[39] K.T. Delaney, M. Mostovoy, and N.A. Spaldin, *Phys.Rev.Lett.* **102**, 157203 (2009).

[40] A.P. Pyatakov, G.A. Meshkov, A.K. Zvezdin, *JMMM.* **324**, 3551 (2012).

[41] T. Choi, Y. Horibe, H.T. Yi, Y.J. Choi, W. Wu, and S.-W. Cheong, *Nature Mater.* **9**, 253 (2010).

[42] M. Mostovoy, *Nature Mater.* **9**, 188 (2010).

[43] S. Artyukhin, K.T. Delaney, N.A. Spaldin, M. Mostovoy, *Nature Mater.* **13**, 42 (2014).

[44] D. Meier, *J. Phys.: Condens. Matter.* **27**, 463003 (2015).

[45] M.V. Mostovoy,*Phys. Rev. Lett.* **96**, 067601 (2006).

[46] А.М. Кадомцева, А.К. Звездин, Ю.Ф. Попов, А.П. Пятаков, Г.П. Воробьев, *Письма в ЖЭТФ* **79** 705 (2004).

[47] H. Katsura, N. Nagaosa, and A.V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett* **95**, 057205 (2005).

[48] А.С. Логгинов, Г.А. Мешков, А.В. Николаев, А.П. Пятаков, *Письма в ЖЭТФ*, **86**, 124 (2007).

[49] A.P. Pyatakov, G.A. Meshkov, A.S. Logginov, *Moscow University Physics Bulletin* **65**, 329-331 (2010).

[50] S. Brazovskii and N. Kirova, "Electron Selflocalization and Superstructures in Quasi One-dimensional Dielectrics"in *Sov. Sci. Reviews*, **v. A5** edited by I.M. Khalatnikov, Harwood Ac.Publ., NY, p. 99, (1984).

[51] Yu Lu, *Solitons and Polarons in Conducting Polymers*, World Scientific Publ. Co.,NY, (1988).

[52] S. Brazovskii, J. of Superconductivity and Novel Magnetism, **20**, 489 (2007); **cond-mat**/0709.2296v1.

[53] S. Brazovskii, "Microscopic solitons in correlated electronic systems: theory versus experiment." Advances in Theoretical Physics: Landau Memorial Conference, AIP Conference Proceedings **1134**, 74 (2009).

[54] S. Brazovskii, Solid State Sciences **10**, 1786 (2008); **cond-mat**/0801.3202

[55] A.J. Heeger et al., *Rev. Mod. Phys.* **60**, 781 (1988).

[56] M. Horvatic, Y. Fagot-Revurat, C. Berthier, G. Dhalenne, and A. Revcolevschi, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 420 (1999).

[57] F. Kagawa, S. Horiuchi, H. Matsui, R. Kumai, Y. Onose, T. Hasegawa, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 227602 (2010).

[58] H. Okamoto, in Molecular Electronic and Related Materials–Control and Probe with Light, p. 59, Transworld Research Network (2010).

[59] S. Brazovskii, in Physics of Organic Superconductors and Conductors, edited by A.G. Lebed, Springer Series in Materials Sciences, **110**, NY, (2008), pp. 313-356; **cond-mat**/0606009.

[60] S. Brazovskii, Ch. Brun, Zhao-Zhong Wang, and P. Monceau, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 096801 (2012).

[61] Yu.I. Latyshev, P. Monceau, S. Brazovskii, A.P. Orlov, T. Fournier, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 266402 (2005).

[62] J.H. Miller Jr., A.I. Wijesinghe, Z. Tang, and A.M. Guloy, Phys. Rev. B **87**, 115127 (2013).

[63] A. Choi et al., Synthetic Metals **160**, 1349 (2010).

[64] N. Kirova, S. Brazovskii, A. Choi, and Y. W. Park, Physica B: Condensed Matter **407**, 1939 (2012).

[65] A.I. Buzdin and V.V. Tugushev, *Sov. Phys.: JETP* **58**, 428 (1983).

[66] K. Machida and H. Nakanishi, *Phys. Rev. B* **30**, 122 (1984).

[67] W.P. Su, S. Kivelson and J.R. Schrieffer, Physics in One Dimension, ed. J. Bernasconi and T. Schneider p. 201 (Berlin: Springer, 1981).

[68] S.A. Brazovskij and N.N. Kirova, *Chem. Scr.* **17**, 171 (1981).

[69] T.-H. Kim and H.W. Yeom, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 246802 (2015).

[70] S. Cheon, T.-H. Kim, S.-H. Lee, and H.W. Yeom, *Science* **350**, 182 (2015).

[71] T.-H. Kim, S. Cheon and H.W. Yeom, *Nat. Physics* **13**, 444 (2017).

[72] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O.V. Yazyev, and A. Kis, *Nat. Rev. Mater.* **2**, 17033 (2017).

[73] K. Rossnagel, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 213001 (2011).

[74] L. Stojchevska *et al*, *Science* **344**, 177-180 (2014).

[75] B. Sipos, A.F. Kusmartseva, A. Akrap, H. Berger, L. Forro, and E. Tutis, *Nature Mater.* **7**, 960 (2008).

[76] E. Tosatti, P. Fazekas, *Journal de Physique* **37**, C4-165 (1976).

[77] Y. A. Gerasimenko, I. Vaskivskyi, and D. Mihailovic, arXiv:1704.08149 (2017).

[78] I. Vaskivskyi *et al*, *Nat. Commun.* **7**, 11442 (2016).

[79] M. Yoshida, *et al. Scientific Reports* **4**, 7302 (2014).

[80] L. Ma *et al*, *Nat. Commun.* **7**, 10956 (2016).

[81] D. Cho *et al*, *Nat. Commun.* **7**, 10453 (2016).

[82] D. Svetin, I. Vaskivskyi, S. Brazovskii, and D. Mihailovic, *Scientific Reports* **7**, 46048 (2016).

[83] T. Taniyama, *J. Phys.: Condens. Matter.* **27**, 504001 (2015).

[84] F. Matsukura, Y. Tokura, and H. Ohno, *Nature Nanotech.* **10**, 209 (2015).

[85] A. Melzer, M. Klindworth, and A. Piel, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 115002 (2001).

[86] A. Melzer, A. Schella, J. Schablinski, D. Block, and A. Piel, *Phys.Rev.Lett.* **108**, 225001 (2012).

[87] I. Pomeranchuk, Y. Smorodinsky, *J. Phys.* **9**, 97 (1945).

[88] Y.B. Zelddovich, V.S. Popov, *Sov. Phys. Usp.* **14**, 673 (1972).

[89] J. Mao, Y. Jiang, D. Moldovan, G. Li, K. Watanabe, T. Taniguchi, M.R. Masir, F.M. Peeters, and E.Y. Andrei, *Nat. Phys.* **12**, 545 (2016)

[90] P.I. Karpov and S.I. Mukhin, *Phys. Rev. B* **95** 195136 (2017).

[91] L.D. Landau, E.M. Lifshits, L.P. Pitaevskii *Electrodynamics of Continuous Media.* Course of Theoretical Physics, 2nd ed., Vol. 8 (Butterworth-Heinemann, Oxford 1984).

[92] T. Yanagisawa, *J. Phys.: Conf. Ser.* **428** 012040 (2013).

[93] D. Wales, *Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses*, Cambridge University Press (2003).

[94] M. Mezard, G. Parisi, A. Zee, *Nucl. Phys. B* **559**, 689 (1999).

[95] A. Amir, Y. Oreg, and Y. Imry, *Phys. Rev. Lett* **105**, 070601 (2010).

[96] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).

[97] P.N. Strenski, S. Kirkpatrick, *Algorithmica* **6**, 346 (1991).

[98] V.M. Bedanov and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **49**, 2667 (1994).

[99] A. Radzvilavicius and E. Anisimovas, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 385301 (2011).

[100] X. Zhao, C. Jinb, C. Wanga, H. Dub, J. Zangd, M. Tianb, R. Chea, and Y. Zhang, *PNAS* **133**, 4918 (2016).

[101] V.A. Schweigert and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995).

[102] D. Lebeugle, D. Colson, A. Forget, M. Viret, A. M. Bataille, and A. Gukasov, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 227602 (2008).

[103] D. Lebeugle, D. Colson, A. Forget, and M. Viret, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 022907 (2007).

[104] J.B. Neaton, C. Ederer, U.V. Waghmare, N.A. Spaldin, and K.M. Rabe, *Phys. Rev. B* **71**, 014113 (2005).

[105] I. Sosnowska, T. Peterlin-Neumaier, and E. Steichele, *J. Phys. C* **15**, 4835 (1982).

[106] J. Lu, A. Gunther, F. Schrettle, F. Mayr, S. Krohns, P. Lunkenheimer, A. Pimenov, V.D. Travkin, A.A. Mukhin, and A. Loidl, *Eur. Phys. J. B* **75**, 451 (2010).

[107] O. Delaire, M. B. Stone, J. Ma, A. Huq, D. Gout, C. Brown, K. F. Wang,3 and Z. F. Ren, *Phys. Rev. B* **85**, 064405 (2012). Обратим внимание, что в указанной статье используется соглашение $S = 5/2$ для атомов Fe, тогда как мы следуем соглашению $S = 1$, при котором легче сравнивать между собой разные материалы. Поэтому обменная константа в настоящей работе равна $J = 1.6\,\mathrm{meV} \times (5/2)^2 = 10\,\mathrm{meV}$. Как в процитированной работе, так и в данной, каждая ссвязь подсчитывается только один раз.

[108] D. Sando et. al., *Nature Materials* **12**, 641 (2013).

[109] T. Kimura, *Annu. Rev. Mater. Res.* **37**, 387 (2007).

[110] M. Kenzelmann, A.B. Harris, S. Jonas, C. Broholm, J. Schefer, S.B. Kim, C.L. Zhang, S.-W. Cheong, O.P. Vajk, and J.W. Lynn, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 087206 (2005).

[111] T. Kimura, T. Goto, H. Shintani, K. Ishizaka, T. Arima and Y. Tokura, *Nature* **426** 55 (2003).

[112] H. J. Xiang, Su-Huai Wei, M.-H. Whangbo, and Juarez L. F. Da Silva,*Phys. Rev. Lett.* **101**, 037209 (2008).

[113] M. Mochizuki, N. Furukawa, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 177206 (2010).

[114] A. I. Milstein and O. P. Sushkov, *Phys. Rev. B* **91**, 094417 (2015).

[115] N. S. Fedorova, C. Ederer, N. A. Spaldin, and A. Scaramucci *Phys. Rev. B* **91**, 165122 (2015).

[116] R. H. Heffner, J. E. Sonier, D. E. MacLaughlin, G. J. Nieuwenhuys, G. M. Luke, Y. J. Uemura, W. Ratcliff, S-W. Cheong, and G. Balakrishnan, *Phys. Rev. B* **63**, 094408 (2001).

[117] M. Caminale, R. Moroni, P. Torelli, W. C. Lin, M. Canepa, L. Mattera, and F. Bisio, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 037201 (2014).

[118] X.Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J.H. Park, J.H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Nature* **465** 901 (2010).

[119] W. Ratcliff, J.W. Lynn, V. Kiryukhin, P. Jain, and M.R. Fitzsimmons, *npj Quantum Materials* **1** 16003 (2016).

[120] D. Erts, A. Lohmus, R. Lohmus, H. Olin, *Appl. Phys. A* **72** 71 (2001).

[121] T. Nakayama et. al., *Adv. Mater.* **24** 1675 (2012).

[122] P. Hapala, M. Ondracek, O. Stetsovych, M. Svec, and P. Jelinek, *Simultaneous nc-AFM/STM Measurements with Atomic Resolution*, chapter in "Noncontact Atomic Force Microscopy", ed. S. Morita, F.J. Giessibl, E. Meyer, R. Wiesendanger (Springer, 2015), Vol.3, p.29.

[123] Y. Onose, Y. Okamura, S. Seki, S. Ishiwata, and Y. Tokura, *Phys.Rev.Lett.* **109** 037603 (2012).

[124] O. J. Korovyanko, I.I. Gontia, Z.V. Vardeny, T. Masuda, and K. Yoshino, *Phys. Rev. B* **67**, 035114 (2003).

[125] S. Brazovskii and N. Kirova, *JETP Letters* **33**, 4 (1981).

[126] I. Gontia, S.V. Frolov, M. Liess, E. Ehrenfreund, Z.V. Vardeny, K. Tada, H. Kajii, R. Hidayat, A. Fujii, K. Yoshino, et al., *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 4058 (1999).

[127] P. Karpov and S. Brazovskii, Phase transitions in ensembles of solitons induced by an optical pumping or a strong electric field. *Phys. Rev. B* **94**, 125108 (2016).

[128] N. Kirova and S. Brazovskii, *Int. J. of Synthetic Metals*, **216**, 11 (2016); arXiv:1512.04282.

[129] T. Bohr, S. Brazovskii, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **16**, 1189 (1983).

[130] S. Teber, B. P. Stojkovic, S. Brazovskii, and A.R. Bishop, *J. Phys.: Condens. Matter.* **13**, 4015 (2001).

[131] S. Teber, *J. Phys.: Condens. Matter.* **14**, 7811 (2002).

[132] A.M. Tsvelik. Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics. Cambridge University Press (2003).

[133] C.B. Muratov, *Phys. Rev. E* **66**, 066108 (2002).

[134] T. Mertelj, V.V. Kabanov, and D. Mihailovic, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 147003 (2005).

[135] J. Miranda, V.V. Kabanov, *Physica C* **468**, 358 (2008).

[136] K. Zhang and P. Charbonneau, *Phys. Rev. B* **83**, 214303 (2011).

[137] T. Graim, D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **24**, 5156 (1981).

[138] D. Hone, P. A. Montano, T. Tonegawa, Y. Imry, *Phys.Rev. B* **12**, 5141 (1975).

[139] J. Lekner, *Physica A* **176**, 485 (1991).

[140] N. Gronbech-Jensen, G. Hummer and K.M. Beardmore, *Mol. Phys.* **92**, 941 (1997).

[141] J. Lekner, *Mol. Simul.* **20**, 357 (1998).

[142] G.S. Grest, *Phys. Rev. B* **39**, 9267 (1989).

[143] J.-R. Lee and S. Teitel, *Phys. Rev. B* **46**, 3247 (1992).

[144] S.J. Lee, J.-R. Lee, and B. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 025701 (2001).

[145] S.J. Lee, B. Kim, and J. Lee, *Physica A* **315**, 314 (2002).

[146] L. Rademaker, Y. Pramudya, J. Zaanen, and V. Dobrosavljevic, *Phys. Rev. E* **88**, 032121 (2013).

[147] L. Bonsall and A.A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).

[148] N.D. Drummond, Z. Radnai, J.R. Trail, M.D. Towler, and R.J. Needs, *Phys. Rev. B* **69**, 085116 (2004).

[149] S. Aubry, *Journal de Physique* **44**, 147 (1983).

[150] H. Uemura and H. Okamoto, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 258302 (2010).

[151] T. Miyamoto, H. Uemura, and H. Okamoto, *JPSJ* **81**, 073703 (2012).

[152] T. Huber, S.O. Mariager, A. Ferrer, H. Schäfer, J.A. Johnson, S. Grübel, A. Lübcke, L. Huber, T. Kubacka, C. Dornes, C. Laulhe, S. Ravy, G. Ingold, P. Beaud, J. Demsar, and S.L. Johnson *Phys. Rev. Lett.* **113**, 026401 (2014).

[153] M. Gulde, S. Schweda, G. Storeck, M. Maiti, H.K. Yu, A.M. Wodtke, S. Schafer, C. Ropers, *Science* **345**, 200 (2014).

[154] K. Haupt, M. Eichberger, N. Erasmus, A. Rohwer, J. Demsar, K. Rossnagel, H. Schwoerer, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 016402 (2016).

[155] P. Karpov and S. Brazovskii, arXiv:1709.01912 (2017).

[156] E. A. Jagla, *Journ. Chem. Phys.* **110**, 451-456 (1999).

[157] H. Shiba and K. Nakanishi, in "Structural Phase Transitions in Layered Transition Metal Compounds", ed. K. Motizuki (D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1986).

[158] W.L. McMillan, *Phys. Rev. B* **14**, 1496-1502 (1976).

[159] S. Mahmoudian, L. Rademaker, A. Ralko, S. Fratini, and V. Dobrosavljevic, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 025701 (2015).

[160] J. Villain, *Surface Science* **97**, 219-242 (1980).

[161] B.G. Nickel, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 3889 (1999).

[162] B.G. Nickel, *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 1693 (2000).