Первопринципные расчеты магнитных свойств одноосного гелимагнетика

$CrNb_3S_6$

Евсин Д.В., Прудников П.В., Мамонова М.В., Борзилов В.О.

Лаборатория теоретической физики,
прикладного моделирования и параллельных вычислений,
Омский государственный университет им Ф.М. Достоевского

Введение

Киральность является одним из основных понятий, лежащих в основе симметрийных свойств природы, проявляющихся в различных масштабах [1].

Лорд Кельвин впервые ввел слово «киральность» и дал его знаменитое определение в лекциях Балтимора «Молекулярная динамика и волновая теория света» в 1884 году. Лекционные заметки, сделанные одним из слушателей, были опубликованы в 1904 году после дополнения лордом Кельвином, где он заявил: «Я называю любую геометрическую фигуру или группу точек киральной и говорю, что она имеет киральность, если ее изображение в идеальном плоском зеркале не может быть приведено в соответствие с самим собой» [2].

Термин основан на древнегреческом названии наиболее узнаваемого кирального предмета - руки. Так, левая и правая руки являются зеркальными отражениями, но не могут быть совмещены друг с другом в пространстве.

[1] Y. Togawa, Y. Kousaka, K. Inoue, J. Kishine. // J. Phys. Soc. Jpn, 2016, 85, 112001.;

[2] Kelvin, Lord W. Thomson / Baltimore Lectureson Molecular Dynamicsand the Wave Theory of Light // London: C. J. Clay and Sons, - 1904.;

Киральность в природе

С тех пор концепция киральности была повсеместно найдена в естественных науках на всех уровнях, от физики элементарных частиц, молекулярной химии и биологии до космологии. Подобные структурные образования трехмерных спиралей, включая двумерные спирали, широко распространены в различных системах. Например, в макроскопическом масштабе такие модели появляются в архитектурных винтовых лестницах, водоворотах в воде, тайфунах (ураганах) в Тихом и Атлантическом океанах и галактиках во вселенной.

Рис.: 1. Примеры киральности в природе:ракушка, тайфун, Млечный путь.

Киральность в изомерах.

Таким образом под киральностью понимается свойство объекта не совмещаться в пространстве со своим зеркальным отражением.

Подобным образом, свойством киральности обладают молекулы энантиомеры - стереоизомеры, являющиеся зеркальным отражением друг друга.

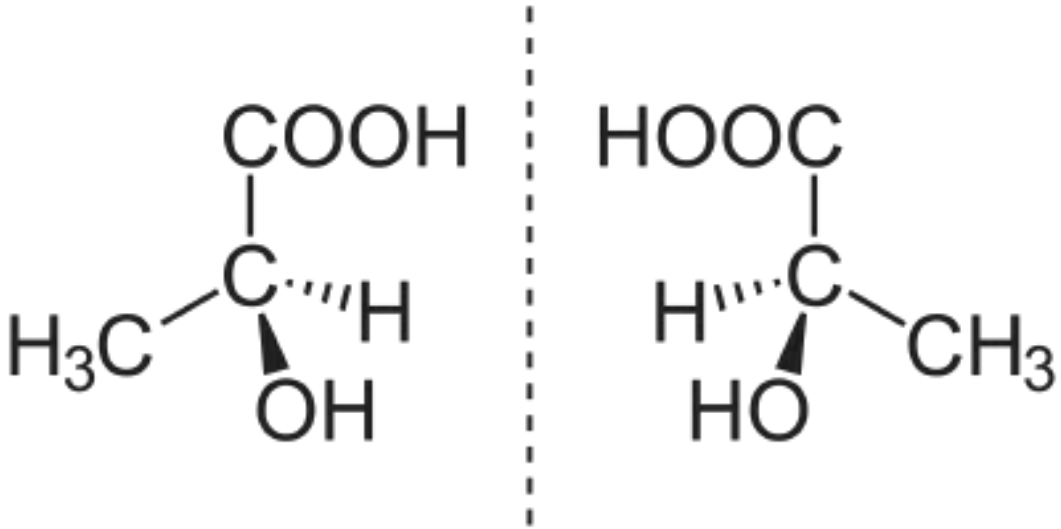


Рис.: 2. Энантиомеры молочной кислоты.

Аксиальная киральность

Одним из видов киральности является аксиальная (осевая) киральность. Она возникает относительно оси киральности, которая является осью для геликоидальной структуры.

Геликоидальность - явление, при котором магнитные моменты атомов, находящихся на определенной кристаллографической оси, образуют винтовую линию (геликоид) вокруг нее.

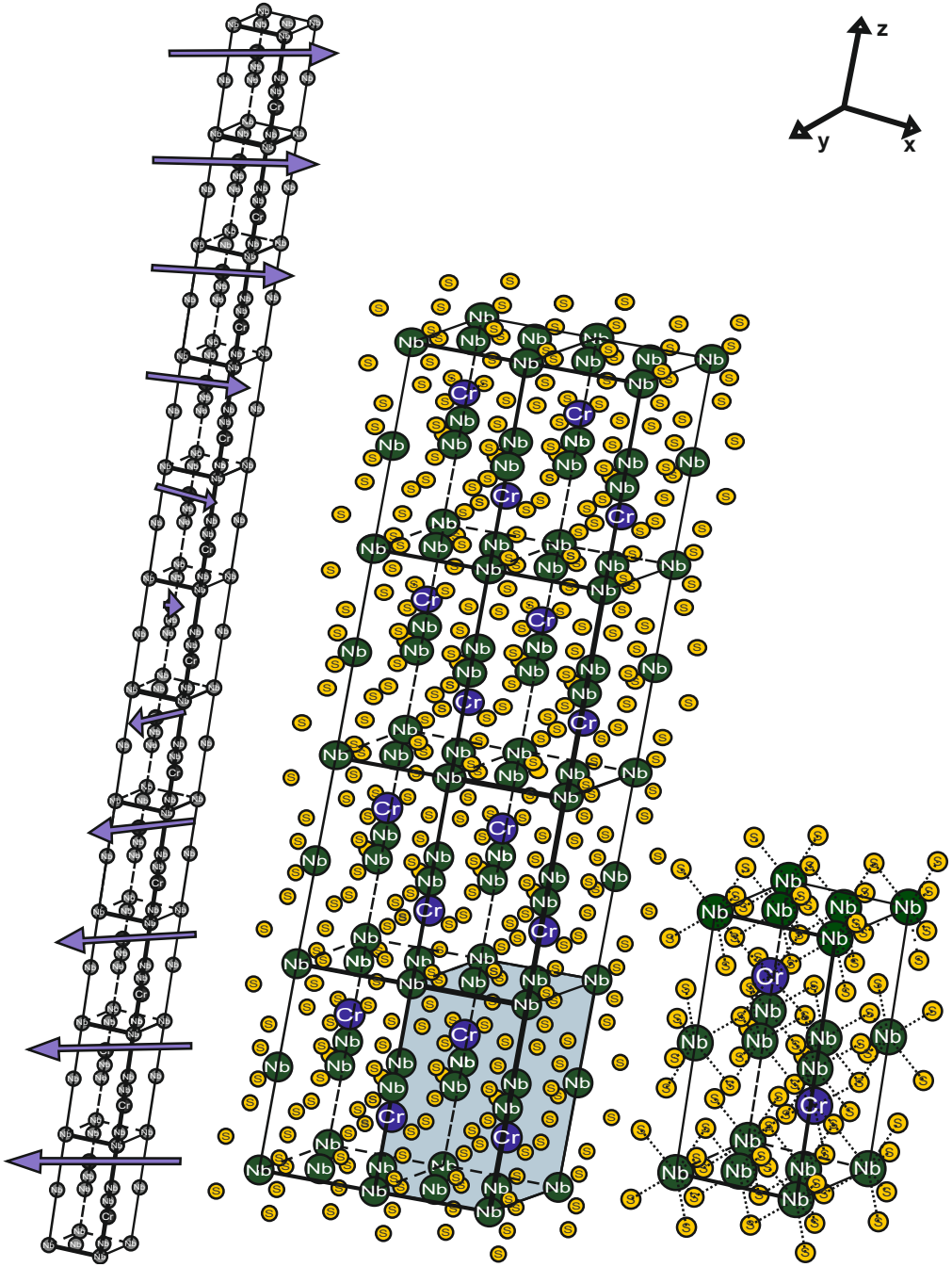


Рис.: 4. Кристаллическая структура исследуемой системы $CrNb_3S_6$.

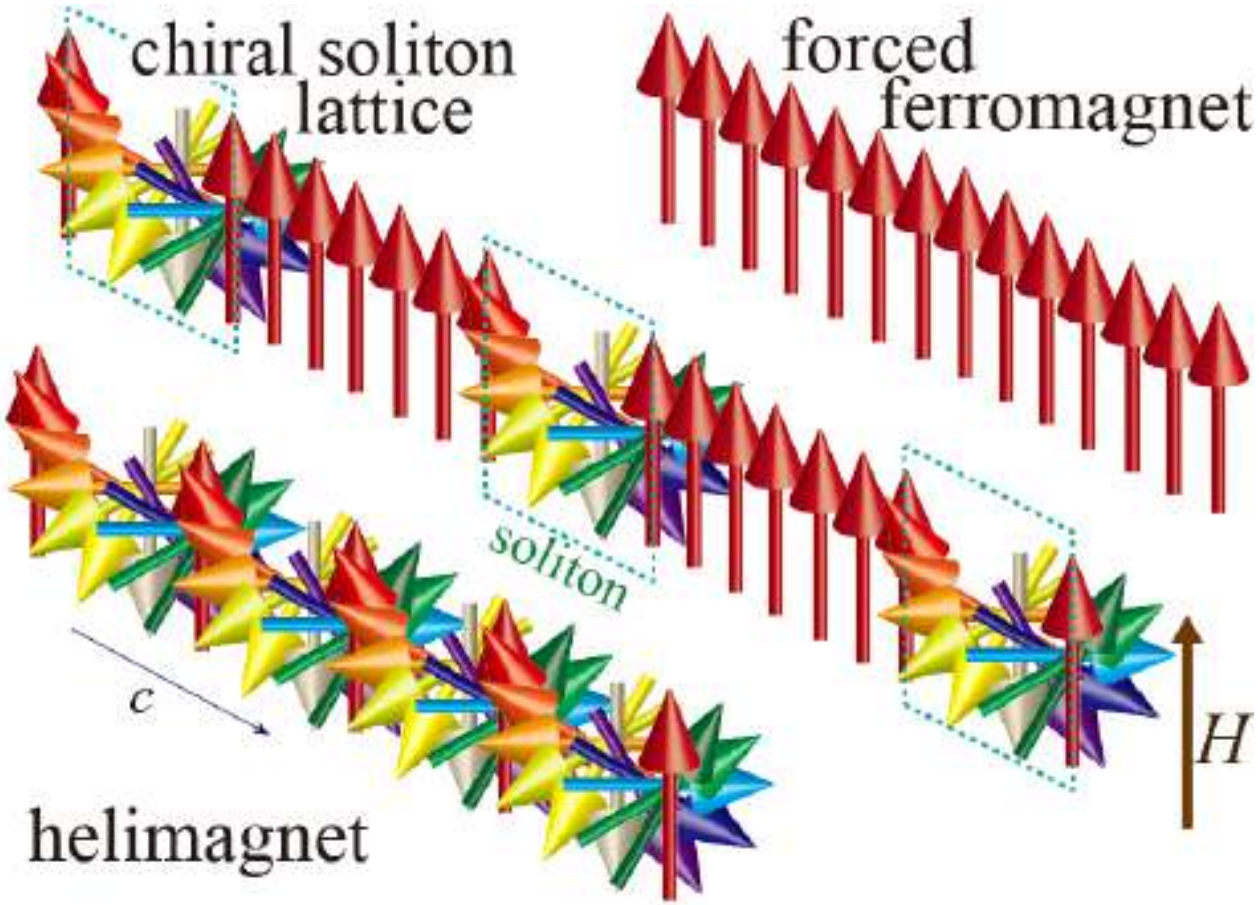


Рис.: 5. (a) - гелимагнитное состояние, (b) - киральная солитонная решётка, (c) - ферромагнитное состояние. [3]

[3] M. Mito et al., Phys. Rev. B. 97, 024408 (2018);

Заданные параметры

Кристаллическая структура исследуемой системы $CrNb_3S_6$ представлена на рис.3.
В расчетах использовалась 20-ти атомная суперъячейка с постоянной решетки a = 10.84892 а.е.; энергия обрезания - 500 эВ; вакуумный слой - 5 Å;

вектор распространения спирали q = 0,5a направлен вдоль оси z для объемного материала (bulk),
вдоль оси y для пленки (film).

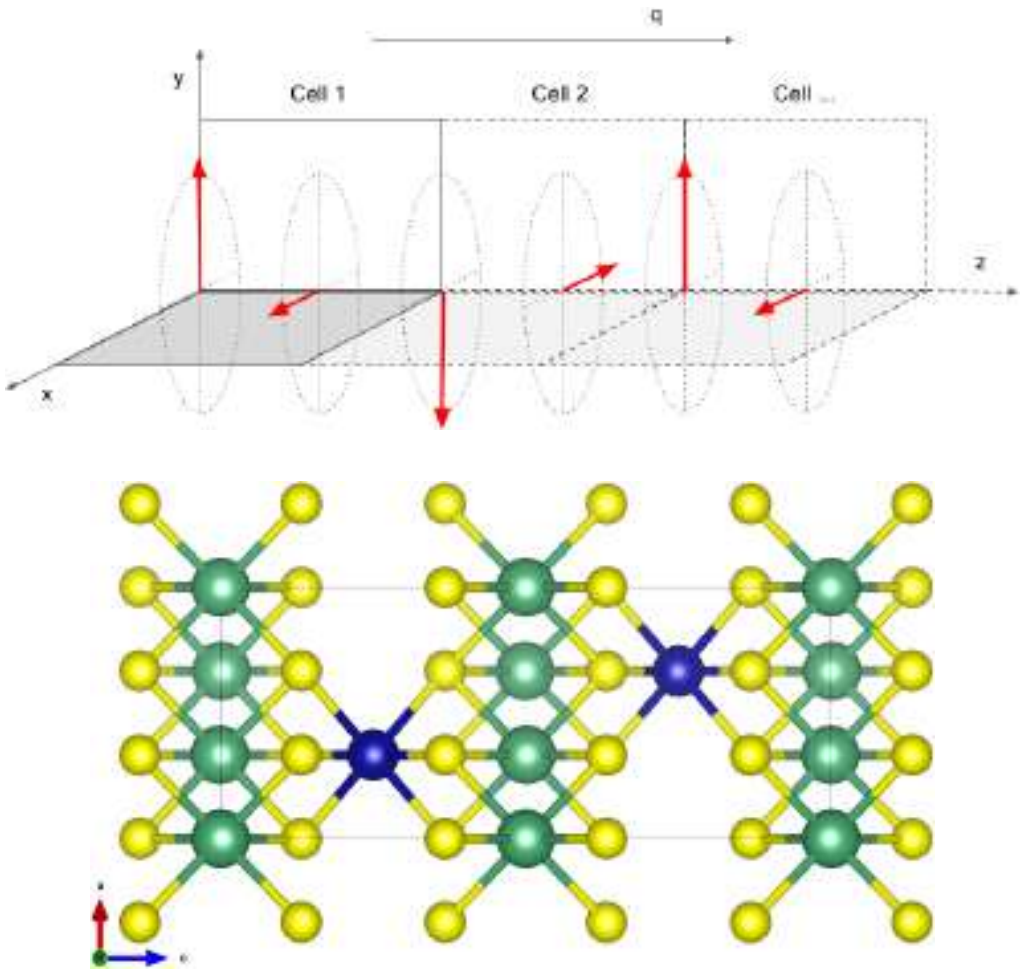


Рис.: 5. Кристаллическая структура исследуемой объёмной системы $CrNb_3S_6$.

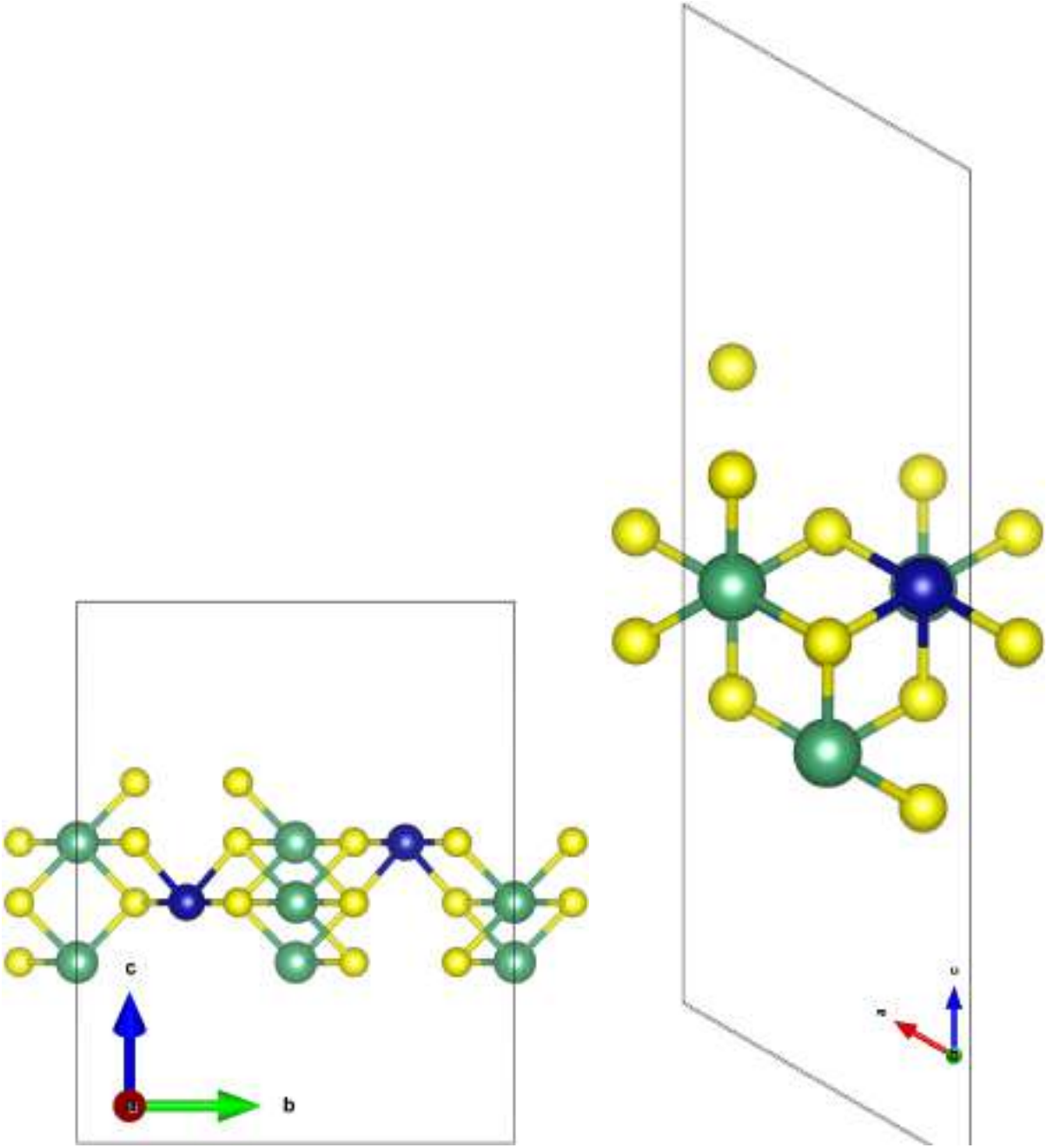


Рис.: 6. Кристаллическая структура исследуемой пленки $CrNb_3S_6$.

Полученные данные

Таблица: 1. Значения магнитных моментов (приведены в μ_B) для атомов и полной энергии системы.

	bulk			film		
	noncol 16 k-point		col 12 k-point	noncol 8 k-point		col 8 k-point
Atoms	μ_X	μ_Y	μ	μ_X	μ_Y	μ
Cr_1	1.985	-1.985	2.843	0.045	-0.039	-0.642
Cr_2	1.984	-1.984	2.844	1.866	1.861	-2.569
Total	3.860	-3.860	5.582	1.820	1.753	-2.856
E_{tot},eV	-150.92696		-150.64068	-141.307980		-140.95303

Заключение

В данной работе были вычислены магнитные моменты атомов хрома в 20-ти атомной ячейки одноосного кирального гелимагнетика коллинерным и неколлинеарным подходом в рамках первопринципного пакета VASP. Так же была вычислена полная энергия системы.

Спасибо за внимание!

Аксиальная киральность

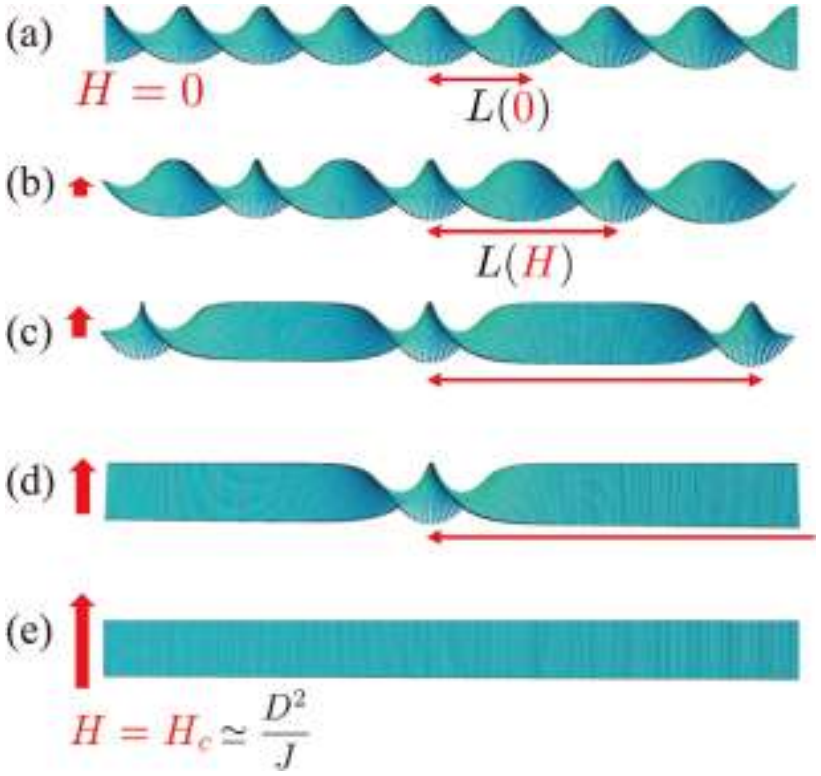


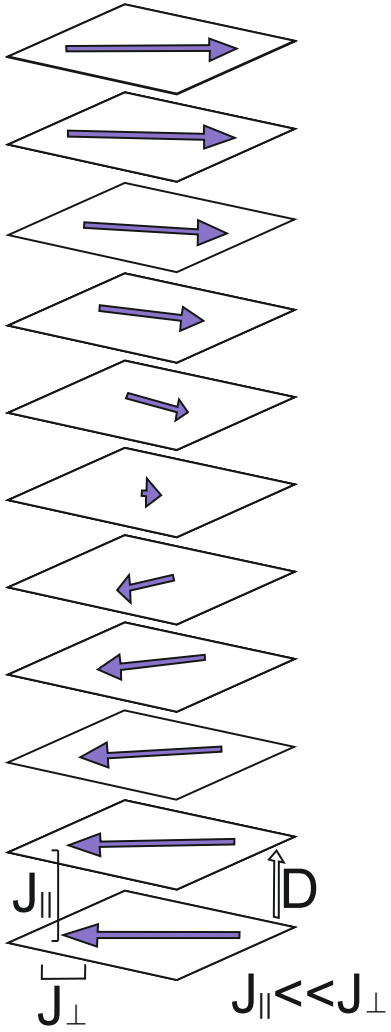
Рис.: 3. Формирование киральной солитонной решетки (КСЛ) под действием магнитного поля, перпендикулярного спиральной оси. В пределе бесконечной системы структура КСЛ может быть изображена в виде скрученной резиновой ленты. Когда магнитное поле увеличивается от (a) нуля до (e) критической напряженности поля, пространственный период КСЛ увеличивается и в конечном итоге достигает бесконечности в критическом поле.

Компьютерное моделирование

Гамильтониан одноосного кирального гелимагнетика на трехмерном кубическом кристалле [4]:

$$H = -J_{\perp}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{S}_i\left(\boldsymbol{S}_{i+x}+\boldsymbol{S}_{i+y}\right) - J_{\parallel}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_{i+z} - D\sum_{i=1}^{N}\left[\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_{i+z}\right]\boldsymbol{n}_z - H^{\perp}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{n}_x,$$

$J^{\parallel}$ = 16 K; $J^{\perp}$ = 154 K; D = 2.9 K [5];



[4] M. Shinozaki, et al., J.Phys. Soc. Jpn. 85, 074710 (2016);
[5] T. Miyadai, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 52, 1394 (1983);

Компьютерное моделирование

$$H = -J_\perp \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \left(\boldsymbol{S}_{i+x} + \boldsymbol{S}_{i+y}\right) - J_\parallel \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_{i+z} -$$

$$- D \sum_{i=1}^{N} \left[\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_{i+z}\right] \boldsymbol{n}_z - H^\perp \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{n}_x,$$

где каждый узел на кубической решетке задается безразмерным вектором $i = i_x\hat{x} + i_y\hat{y} + i_\parallel\hat{y}$, где $i_x, i_y, i_\parallel \in \mathbb{Z}$.
Базисные векторы $\hat{x}, \hat{y}$ и $\hat{z}$ соответственно обозначают единичные векторы в направлениях x, y и z.
Кубическая решетка рассматривается, как набор слоев, каждый из которых помечен $i_\parallel$. Символ $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ представляет собой классический Гейзенберговский спин с величиной S в точке i.
Через $J^\perp > 0$ обозначается ферромагнитное обменное взаимодействие между соседними спинами внутри одного слоя, $J_\parallel > 0$ ферромагнитное обменное взаимодействие между парой соседних спинов в соседних слоях, а D величина DMI.
Индексы $\parallel$ и $\perp$ - параллельные и перпендикулярные направления относительно осиz.

DMI

Киральные гелимагнитные структуры стабилизируются антисимметричным обменным взаимодействием, введенным Дзялошинским на основании соображений симметрии. [6]

А именно, антисимметричное обменное взаимодействие является источником кирального гелимагнетика. Было обнаружено, что микроскопический механизм обусловлен релятивистским спин-орбитальным взаимодействием в рамках теории возмущений по Мории, [7] которое применимо к случаю изоляции, называемого взаимодействием Дзялошинского-Мория (DMI), как общего термина независимо от исследуемая система запечатлевает асимметричную электронную структуру антисимметричного спин-спинового взаимодействия в виде $D_{ij} \cdot S_i \times S_j$ между спинами на узлах i и j.

[6] И.Е. Дзялошинский / Термодинамическая теория «слабого» ферромагнетизма антиферромагнетиков // ЖЭТФ. - 1957. - Т. 32, вып. 6. - С. 1547-1562.

[7] Moriya / Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism. // Phys. Rev. - 1960. - V. 47. - P. 91-98.

$$D_{ij} \cdot S_i \times S_j,$$

где постоянный вектор D_{ij} является вектором DM, а знак D_{ij} определяет направление наклона одного спина относительно другого. Величина $\chi_{ij} = S_i \times S_j$ называется спиновой киральностью.

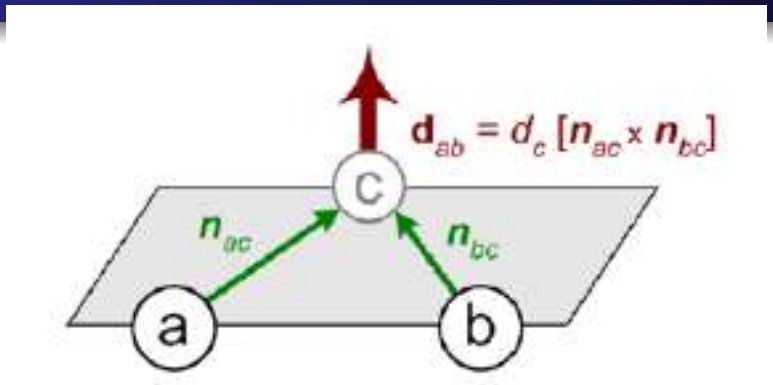


Рис.: 2. Правило определения направления вектора Дзялошинского - Мория при взаимодействии магнитных ионов a и b через диамагнитный ион

Рассмотрим двухподрешеточный антиферромагнетик. Магнитные моменты подрешеток антиферромагнетика, состоящих из ионов сорта a и b (Рис.**??**), без учета **??**, направлены противоположно друг другу. Суммарная намагниченность вещества равна нулю. При подключении взаимодействия **??** направления спинов подрешеток оказываются скошенными. Появляется намагниченность - слабый ферромагнетизм. В выводе микроскопического выражения для вектора D_{ab} первый член, будучи линейным по спину, не дает вклада в эффективный гамильтониан. Второй же по векторной структуре совпадает с оператором антисимметричного обмена. Это обстоятельство и было отмечено Мория. Согласно Мория, оператор должен быть пропорционален матричным элементам от оператора