



VII Всероссийская научная молодёжная школа-конференция:
«Химия под знаком СИГМА: исследования, инновации, технологии»

Квантовохимические расчёты функциональных свойств
киральных гелимагнитных структур

Евсин Д.В.¹, Прудников П.В.^{2,1}, Мамонова М.В.¹, Борзилов В.О.¹

¹ Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск

² Центр новых химических технологий ИК СО РАН, г. Омск



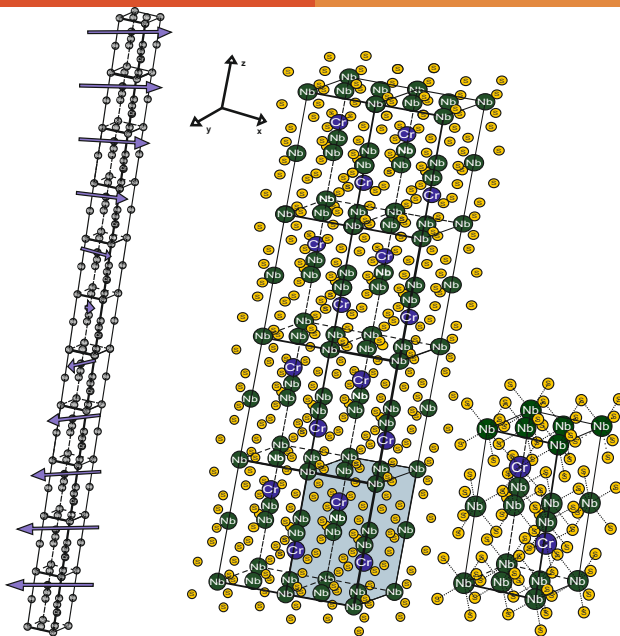


Рис. 1. Кристаллическая структура одноосного кирального гелимагнетика CrNb_3S_6 .

Плавнение солитонной решетки в CrNb_3S_6

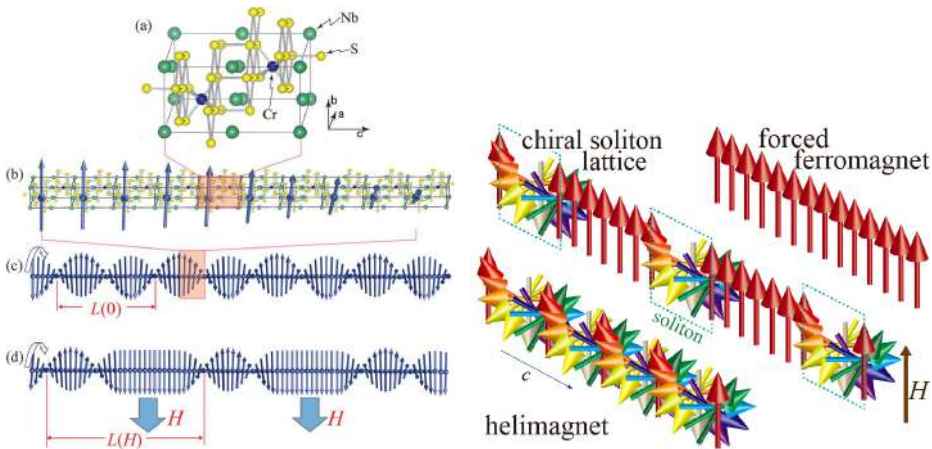


Рис. 2. Плавнение КСР во внешнем магнитном поле в CrNb_3S_6 [3,4].

³Y. Togawa et al., Phys. Rev. Lett. 108, 107202 (2012);

⁴M. Mito et al., Phys. Rev. B. 97, 024408 (2018);

Плавление солитонной решетки в CrNb_3S_6

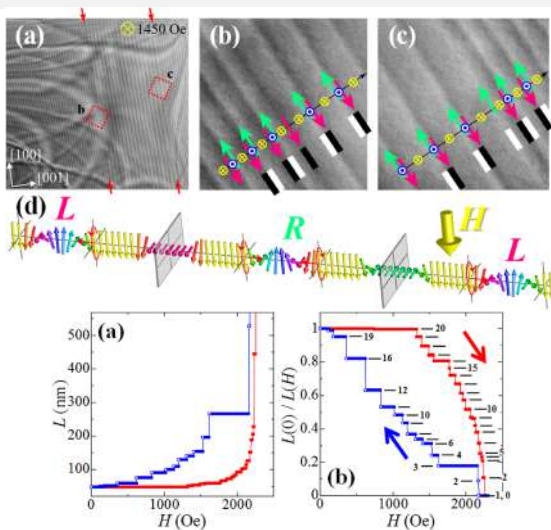


Рис. 3. Дискретность плавления КСР во внешнем магнитном поле в CrNb_3S_6 [6].

Плавление солитонной решетки в тонком слое CrNb_3S_6

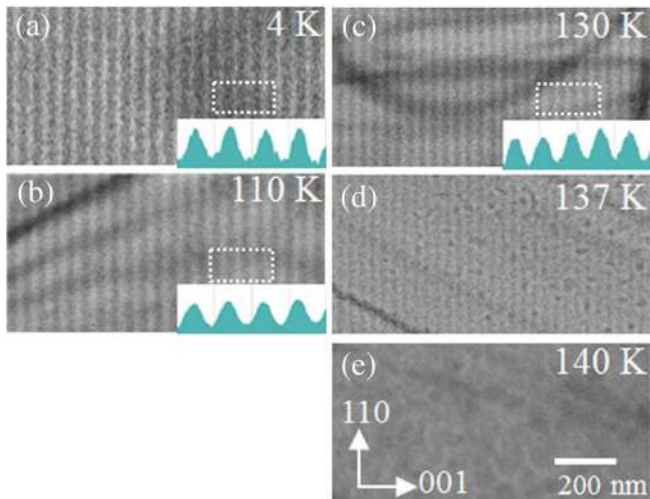


Рис. 4. Плавление КСР в тонком слое CrNb_3S_6 во внешнем магнитном поле [8].

⁸Y. Togawa et al., Phys. Rev. Lett. 122, 017204 (2019);

Для одноосного кирального гелимагнетика $CrNb_3S_6$ первопринципным методами:

- получить гелимагнитное упорядочение в системе;
- рассмотреть объёмную суперъячейку и ячейку плёнки;
- провести исследование сходимости по параметрам моделирования;
- исследовать поведение намагниченности в системе в зависимости от количества элементарных ячеек, входящих в суперъячейку.

Включение спин-орбитальной связи (SOC) в обычном вычислении DFT добавляет дополнительный член $H_{soc}^{\alpha\beta} \propto \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ к гамильтониану, который связывает оператор спина Паули $\vec{\sigma}$ с оператором углового момента $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ [9]. В качестве релятивистской поправки SOC действует в непосредственной близости от ядер, так что предполагается, что вклады H_{soc} за пределами проекционно-присоединенных волн (PAW) незначительны. Таким образом, VASP вычисляет матричные элементы H_{soc} только для одноцентровых вкладов всех электронов

$$E_{soc}^{ij} = \delta_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} \delta_{l_i l_j} \sum_{n\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \langle \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\alpha} | \tilde{p}_i \rangle \langle \phi_i | H_{soc}^{\alpha\beta} | \phi_j \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \quad (1)$$

где $\phi_i(\mathbf{r}) = R_i(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) Y_{l_i m_i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ – парциальные волны атома с центром в $\mathbf{R}_i$, $\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\alpha}$ – спинорная компонента α псевдоорбитали с индексом полосы пропускания n и вектором Блоха $\mathbf{k}$, а $f_{n\mathbf{k}}$ и $w_{\mathbf{k}}$ являются весами Ферми- и k - точек, соответственно.

⁹S. Steiner, S. Khmelevskiy, M. Marsman, G. Kresse, Phys. Rev. B — 2016. V. 93, 224 — P425.

Spin spirals in VASP

Для моделирования спиновых спиралей используется обобщённое условие Блоха:

$$\begin{bmatrix} \Psi_k^\uparrow(r) \\ \Psi_k^\downarrow(r) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-iq \cdot R/2} & 0 \\ 0 & e^{+iq \cdot R/2} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_k^\uparrow(r - R) \\ \Psi_k^\downarrow(r - R) \end{bmatrix} \quad (2)$$

т. е. от одной элементарной ячейки к другой спиноры вверх и вниз получают дополнительный фазовый множитель $e^{-iq \cdot R/2}$ и $e^{+iq \cdot R/2}$, соответственно, где R – вектор кристаллической решётки,

q – так называемый вектор распространения спиновой спирали.

Вектор распространения спиновой спирали обычно выбирается лежащим в пределах первой зоны Бриллюэна решётки обратного пространства.

Приведенное выше обобщённое условие Блоха приводит к следующему поведению плотности намагниченности:

$$m(r + R) = \begin{pmatrix} m_x(r)\cos(q \cdot R) - m_y(r)\sin(q \cdot R) \\ m_x(r)\sin(q \cdot R) + m_y(r)\cos(q \cdot R) \\ m_z(r) \end{pmatrix} \quad (3)$$

Spin spirals in VASP

Обобщенное условие Блоха переопределяет блоховские функции следующим образом:

$$\Psi_k^\uparrow(r) = \sum_G^N C_{kG}^\uparrow e^{i(k+G-q/2)\cdot r} \quad (4)$$

$$\Psi_k^\downarrow(r) = \sum_G^N C_{kG}^\downarrow e^{i(k+G+q/2)\cdot r} \quad (5)$$

Это лишь минимально изменяет гамильтониан:

$$\begin{pmatrix} H^{\uparrow\uparrow} & V_{xc}^{\uparrow\downarrow} \\ V_{xc}^{\downarrow\uparrow} & H^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} H^{\uparrow\uparrow} & V_{xc}^{\uparrow\downarrow} e^{-iq\cdot r} \\ V_{xc}^{\downarrow\uparrow} e^{+iq\cdot r} & H^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где $H^{\uparrow\uparrow}$ и $H^{\downarrow\downarrow}$ кинетическая энергия компоненты плоской волны изменяется на:

$$H^{\uparrow\uparrow} : |k+G|^2 \rightarrow |k+G-q/2|^2 \quad (7)$$

$$H^{\uparrow\uparrow} : |k+G|^2 \rightarrow |k+G+q/2|^2 \quad (8)$$

Распространение спиновой спирали

Вектор распространения спиновой спирали $q = (0, 0, 1/n)$, где n это количество атомов Cr в суперъячейке, и направлен вдоль оси c .

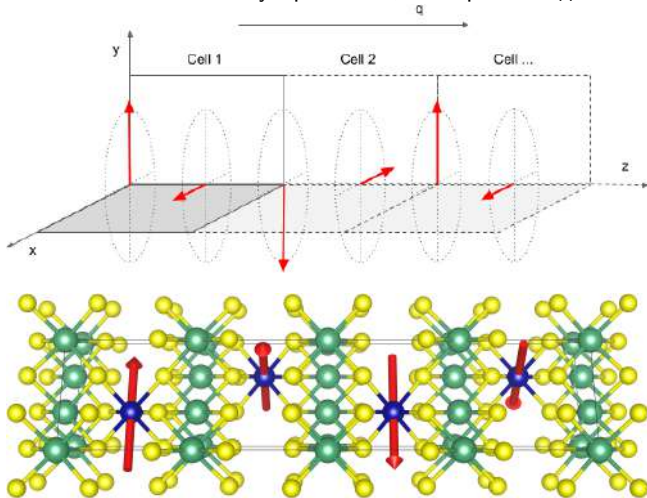


Рис. 5. Ориентация вектора распространения спиновой спирали в системе.

Одиная суперъячейка $Cr_2Nb_6S_{12}$

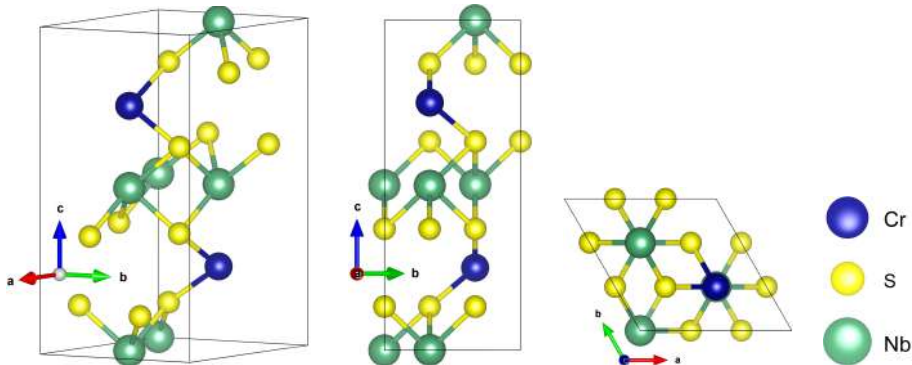


Рис. 6. Структура одинарной суперъячейки $Cr_2Nb_6S_{12}$

(1) – изометрическое представление, (2) – проекция на плоскость cy , (3) – проекция на плоскость ab .

Кристаллографические оси a и c соответствуют координатным осям x и z , ось b имеет x и y составляющие.

$CrNb_3S_6$ относится к $P6_322$ группе симметрии, постоянная решётки $c = 12.101\text{\AA}$ [10].

¹⁰N. J. Ghimire ... et al., Phys. Rev. B — 2013. V. 87, 104 — P403.

Параметры сходимости

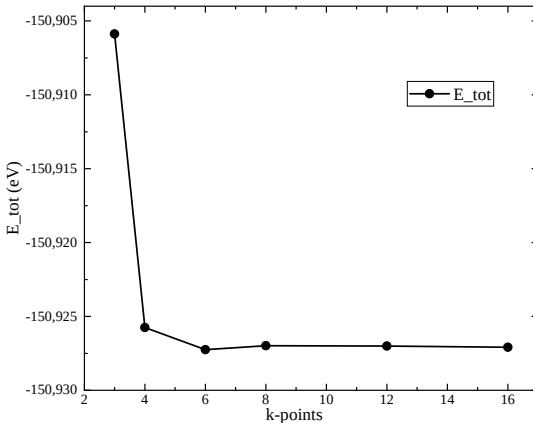


Рис. 7. Сходимость полной энергии системы по к-точкам.

В дальнейших расчётах количество к-точек принималось равным $4 \times 4 \times 4$ для объёмной структуры и $1 \times 4 \times 4$ для плёнки, энергия обрезания - 500 эВ; для плёнки вакуумный слой принимался равным – $5 \text{ \AA}$.

Одинарная объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

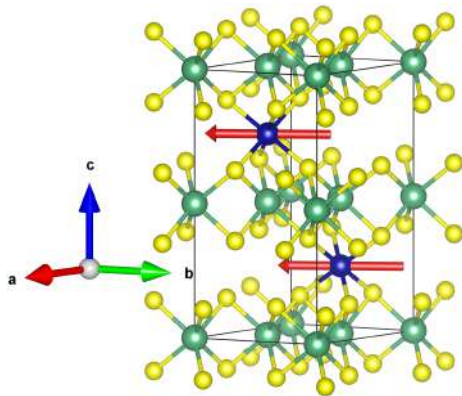
$$Cr_2 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

Полученные значения намагниченности:

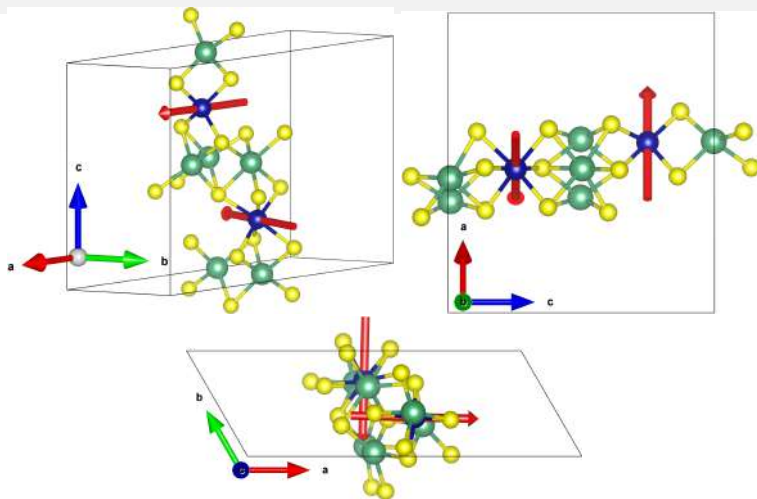
$$Cr_1 - \mu_X = 1.981\mu_B, \mu_Y = -1.981\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.981\mu_B;$$

$$E_{tot} = -150.92575 \text{ eV}$$



Одиная ячейка плёнки



Заданные:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

Полученные после расчета:

$$Cr_1 - \mu_X = -0.072\mu_B, \mu_Y = -3.003\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.018\mu_B, \mu_Y = -0.077\mu_B;$$

$$E_{tot} = -142.71310 \text{ eV}$$

Двойная вдоль c объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

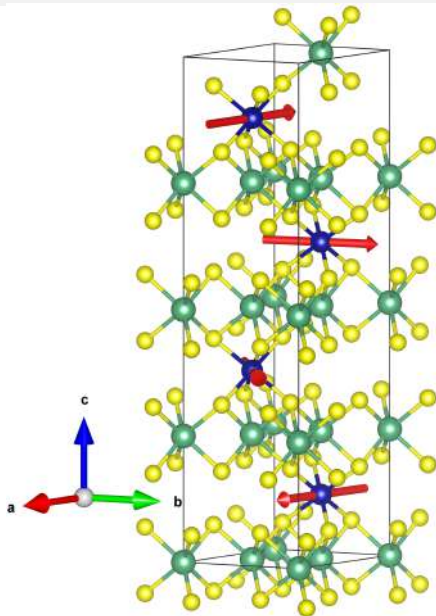
$$Cr_1 - \mu_X = 2.705\mu_B, \mu_Y = -0.589\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 1.832\mu_B, \mu_Y = 2.115\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = -1.833\mu_B, \mu_Y = 2.114\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -2.706\mu_B, \mu_Y = -0.589\mu_B.$$

$$E_{tot} = -301.83661 \text{ eV}$$



Двойная вдоль c ячейка плёнки

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

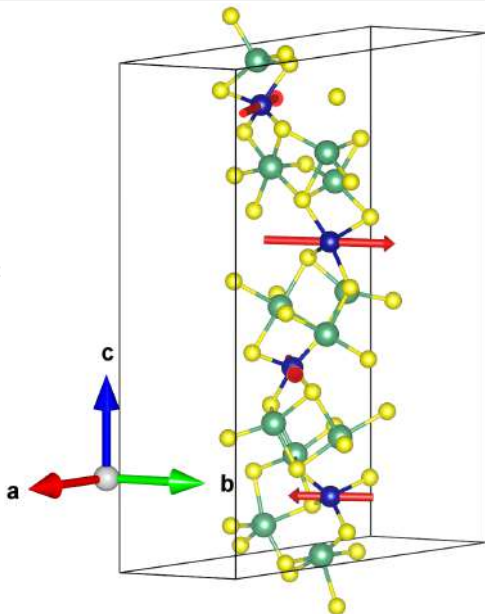
$$Cr_1 - \mu_X = 1.343\mu_B, \mu_Y = -1.497\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = -1.918\mu_B, \mu_Y = 2.460\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 1.566\mu_B, \mu_Y = 2.011\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -2.228\mu_B, \mu_Y = -1.240\mu_B.$$

$$E_{tot} = -285.47803 \text{ eV}$$



Двойная вдоль a объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

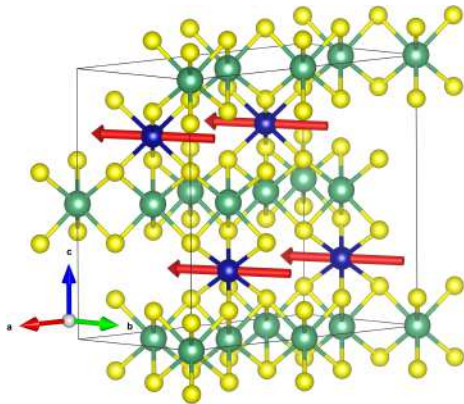
$$Cr_1 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.982\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.982\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.982\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.982\mu_B.$$

$$E_{tot} = -301.85300 \text{ eV}$$



Двойная вдоль a ячейка плёнки

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

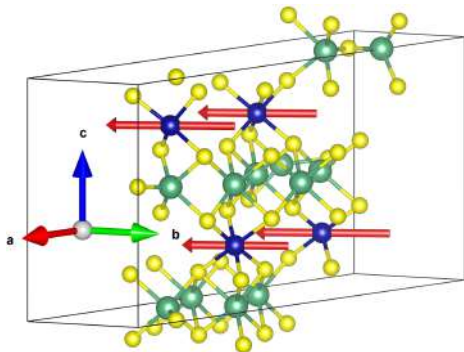
$$Cr_1 - \mu_X = 2.375\mu_B, \mu_Y = -2.343\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 1.858\mu_B, \mu_Y = -1.852\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 2.090\mu_B, \mu_Y = -2.066\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 2.260\mu_B, \mu_Y = -2.229\mu_B.$$

$$E_{tot} = -301.83661 \text{ eV}$$



Двойная вдоль a и c объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_5 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 2.788\mu_B, \mu_Y = 0.220\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = -1.572\mu_B, \mu_Y = 2.329\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 2.787\mu_B, \mu_Y = 0.221\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -1.572\mu_B, \mu_Y = 2.329\mu_B;$$

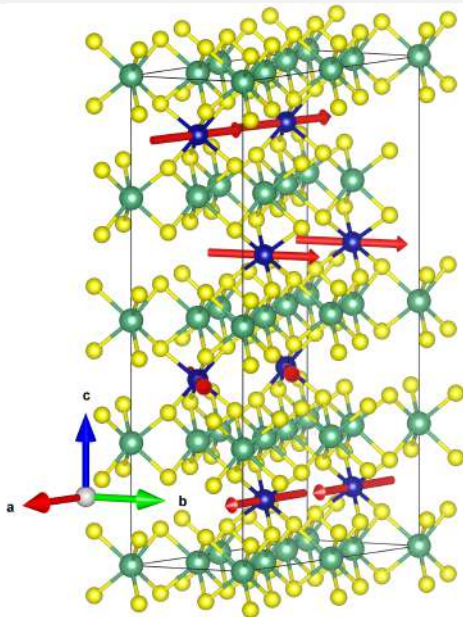
$$Cr_5 - \mu_X = 1.572\mu_B, \mu_Y = 2.329\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = -2.787\mu_B, \mu_Y = 0.220\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = 1.572\mu_B, \mu_Y = 2.329\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = -2.787\mu_B, \mu_Y = 0.220\mu_B.$$

$$E_{tot} = -603.67982 \text{ eV}$$



Четырёхкратная вдоль *c* объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_5 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 2.791\mu_B, \mu_Y = -0.047\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 0.679\mu_B, \mu_Y = 0.679\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 2.535\mu_B, \mu_Y = -1.192\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -2.264\mu_B, \mu_Y = -2.264\mu_B;$$

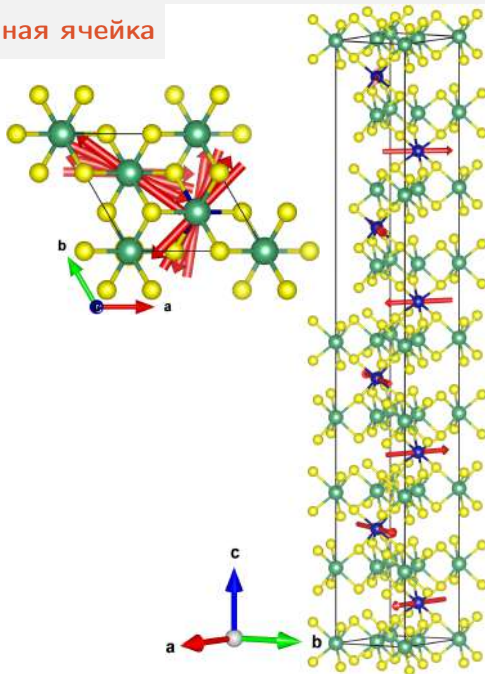
$$Cr_5 - \mu_X = 0.433\mu_B, \mu_Y = 2.769\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = -0.951\mu_B, \mu_Y = -2.635\mu_B;$$

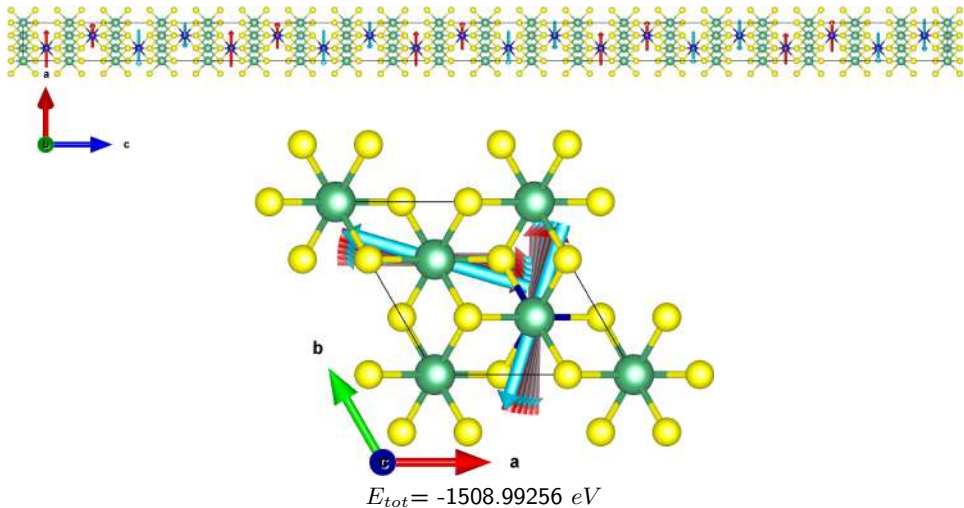
$$Cr_7 - \mu_X = 1.438\mu_B, \mu_Y = 2.403\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = -1.942\mu_B, \mu_Y = -2.004\mu_B.$$

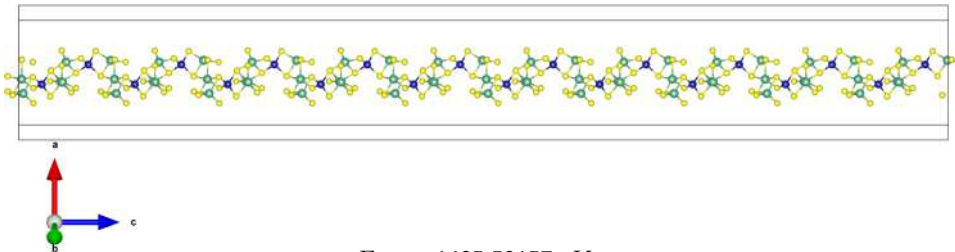
$$E_{tot} = -603.67982 \text{ eV}$$



Десятикратная вдоль c объёмная ячейка



Десятикратная вдоль c ячейка немагнитной плёнки



$$E_{tot} = -1405.50157 \text{ eV}$$

Значения намагниченности атомов Cr , полная энергия системы и расчётное время.

	quantity of cels				1				2								4				8				10			
	quantity of cels for abc-axis				1				2c				2a				2c 2a				4c				10c			
	type of struct				bulk		film		bulk (8kpt)		film		bulk		film		bulk		film		bulk		film		bulk		film	
	E tot (eV)				-150.92575		-142.71310		-301.83661		-285.47803		-301.85301		-289.43249		-603.67982		-578.86549		-603.67982		(calculating)		-1508.99256			
	component of magn				x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
Number Cr atoms	1	1.981	-1.981	-0.072	-3.003	2.791	-0.027	1.343	-1.497	-1.982	-1.982	2.375	-2.343	2.788	0.220	3.320	0.229	2.791	-0.047			2.809	-0.021			2.809	-0.021	
	2	1.982	-1.981	3.018	-0.077	-1.572	2.327	-1.918	2.460	-1.982	-1.982	1.858	-1.852	-1.572	2.329	-1.906	2.748	0.679	0.679			-2.813	0.111					
	3							1.566	2.011	-1.982	-1.982	2.090	-2.066	2.787	0.221	2.151	1.512	2.535	-1.192			2.808	-0.199					
	4							-2.228	-1.240	-1.982	-1.982	2.260	-2.229	-1.572	2.329	-1.700	1.997	-2.264	-2.264			-2.800	0.289					
	5													1.572	2.329	1.713	2.377	0.433	2.769			2.790	-0.376					
	6													-2.787	0.220	-2.816	0.836	-0.951	-2.635			-2.777	0.462					
	7													1.572	2.329	1.967	2.500	1.438	2.403			2.762	-0.547					
	8													-2.787	0.220	-3.150	0.456	-1.942	-2.004			-2.744	0.634					
	9																					2.723	-0.720					
	10																					-2.700	0.799					
	11																					0.076	2.814					
	12																					-0.157	-2.810					
	13																					0.246	2.804					
	14																					-0.333	-2.795					
	15																					0.419	2.784					
	16																					-0.504	-2.770					
	17																					0.590	2.753					
	18																					-0.678	-2.733					
	19																					0.763	2.711					
	20																					-0.848	-2.678					
	calc time (hrs)				2.34		87.2		30.9		27.5		3.17		29.2		39.94		135.22		52.4		> 110		297.3		710 months?	
	cores				4 epyc_7302		4 epyc_7302		24 epyc_7302		20 POWER8		24 epyc_7302		8 epyc_7302		24 epyc_7302		16 epyc_7302		16 epyc_7302		80 POWER8		16 epyc_7302		16 epyc_7302	

- В данной работе было проведено моделирование одноосного кирального гелимагнетика в рамках первопринципного пакета VASP.
- Выявлено гелимагнитное состояние в объемной и плёночной структуре.
- Был проведен расчет для структуры размером 12 нм.
- Были вычислены магнитные моменты атомов хрома в различных ячейках неколлинеарным подходом, а так же полные энергии систем.

Спасибо за внимание!

Ресурсоёмкость относительно k-points

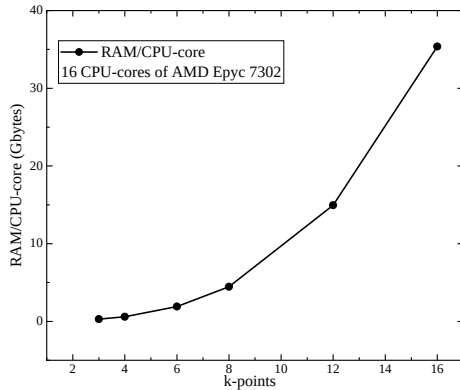
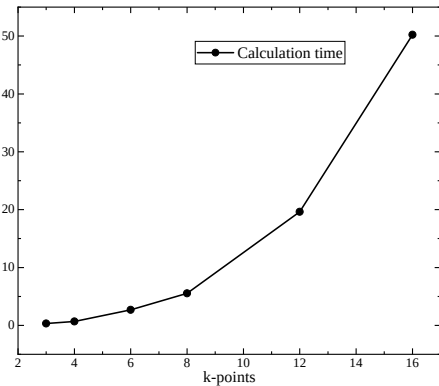


Рис. 8. Время и оперативная память на один MPI-поток, затраченные на расчёт одинарной объёмной ячейки CrNb_3S_6 .

Плавление солитонной решетки CrNb_3S_6

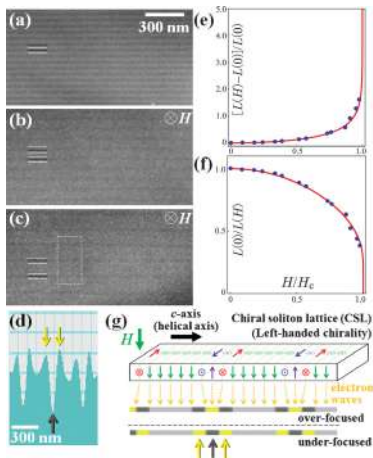


Рис. 9. Плавление КСР во внешнем магнитном поле в CrNb_3S_6 [12].

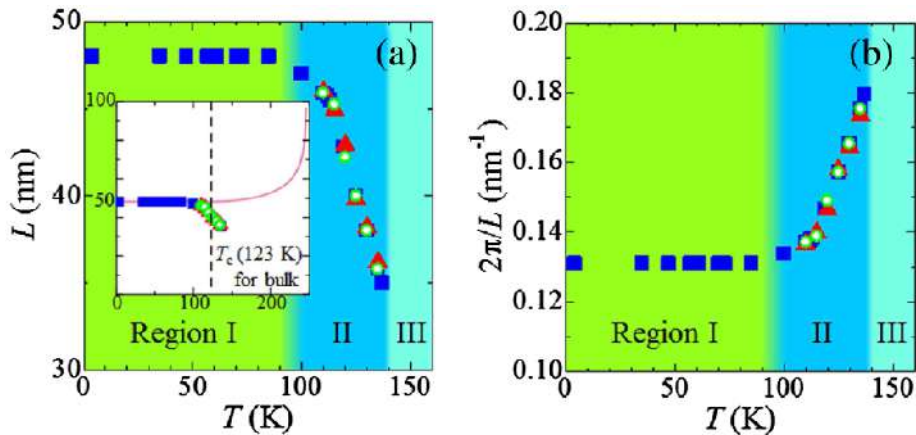


Рис. 10. Плавление КСР во внешнем магнитном поле в тонком слое $CrNb_3S_6$ [14].



Использовался пакет VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) - это комплексный пакет для выполнения ab initio квантового механического моделирования с использованием псевдопотенциалов или метода проекционных волн и базисного набора плоских волн. Подход, реализованный в VASP, основан на приближении локальной плотности (конечной температуры) со свободной энергией как вариационной величиной и точной оценке мгновенного основного состояния электрона на каждом временном шаге. VASP использует эффективные схемы диагонализации матрицы и эффективное смещение плотности заряда Бройдена. Взаимодействие между ионами и электронами описывается методом проекционно-усиленной волны (PAW). PAW позволяет значительно уменьшить количество плоских волн на атом для переходных металлов и элементов первого ряда. Силы и полный тензор напряжений могут быть рассчитаны с помощью VASP и использованы для релаксации атомов в их мгновенное основное состояние.

В основе первопринципных расчетов электронной и кристаллической структуры магнитных материалов лежит спиновая теория функционала плотности и (SDFT). Теория функционала плотности - один из широко используемых методов расчета электронной структуры систем многих частиц в квантовой физике и квантовой химии как молекул так и конденсированного вещества. Основная идея SDFT - при описании электронной подсистемы, заменить многоэлектронную волновую функцию $\Psi(r_1, \dots, r_N)$ электронной плотностью $\rho(r)$, чтобы уменьшить число свободных переменных. Чтобы обеспечить возможность расчета магнитных свойств, энергия системы записывается в виде функционала не только электронной плотности $\rho(r)$, но и плотности намагниченности $m(r)$.

Волновые функции Кона-Шэма заменяются двухкомпонентными волновыми функциями Паули $\Psi_{\alpha i}(r)$ способны представлять как плотность электронов и намагниченную плотность. Индекс α обозначает здесь спиновые состояния.

$$\rho(r) = \left\langle \Psi \left| \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i) \right| \Psi \right\rangle = \sum_{v=1}^N \sum_{a=1,2} |\Psi_v(r)|^2 \quad (9)$$

$$m(r) = \sum_{v=1}^N \Psi_v^*(r) \sigma \Psi_v(r) \quad (10)$$

$$\sigma = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}, \quad (11)$$

где σ_x , σ_y и σ_z матрицы Паули.

Из вариационного принципа получаются уравнения Кона-Шэма, аналогичные уравнениям Шредингера-Паули.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff} + \sigma \cdot B_{eff}(r) - \varepsilon_v \right\} \Psi_v(r) = 0 \quad (12)$$

Эффективное магнитное поле B_{eff} состоит из вклада B_{xc} возникающего из обменно-корреляционной энергии и вклада B_{ext} из внешнего поля.

$$B_{eff} = B_{xc} + B_{ext} \quad (13)$$

$$B_{xc} = \frac{\partial E_{xc}[\rho(r), m(r)]}{\partial m(r)} \quad (14)$$

Включение спин-орбитальной связи (SOC) в обычном вычислении DFT добавляет дополнительный член $H_{soc}^{\alpha\beta} \propto \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ к гамильтониану, который связывает оператор спина Паули $\vec{\sigma}$ с оператором углового момента $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. [15] В качестве релятивистской поправки SOC действует в непосредственной близости от ядер, так что предполагается, что вклады H_{soc} за пределами PAW незначительны. Таким образом, VASP вычисляет матричные элементы H_{soc} только для одноцентровых вкладов всех электронов

$$E_{soc}^{ij} = \delta_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} \delta_{l_i l_j} \sum_{n\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \langle \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\alpha} | \tilde{p}_i \rangle \langle \phi_i | H_{soc}^{\alpha\beta} | \phi_j \rangle \langle \tilde{p}_j | \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\beta} \rangle \quad (15)$$

где $\phi_i(\mathbf{r}) = R_i(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_i)$ - парциальные волны атома с центром в $\mathbf{R}_i$, $\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\alpha}$ — — спинорная компонента α псевдоорбитали с индексом полосы пропускания n и вектором Блоха $\mathbf{k}$, а $f_{n\mathbf{k}}$ и $w_{\mathbf{k}}$ являются Ферми- и k -точками, соответственно[10].

¹⁵Steiner S., Khmelevskiy S., Marsman M., Kresse G., Phys. Rev. B — 2016. V. 93, 224 — P425.

Двойная вдоль a и c ячейка плёнки

Заданные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = -3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -3.000\mu_B, \mu_Y = 0.000\mu_B.$$

$$Cr_5 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

$$Cr_6 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = -3.000\mu_B.$$

$$Cr_7 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B.$$

$$Cr_8 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = -3.000\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 3.320\mu_B, \mu_Y = 0.229\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = -1.906\mu_B, \mu_Y = 2.748\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 2.151\mu_B, \mu_Y = 1.512\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -1.700\mu_B, \mu_Y = 1.997\mu_B.$$

$$Cr_5 - \mu_X = 1.713\mu_B, \mu_Y = 2.377\mu_B.$$

$$Cr_6 - \mu_X = -2.816\mu_B, \mu_Y = 0.836\mu_B.$$

$$Cr_7 - \mu_X = 1.967\mu_B, \mu_Y = 2.500\mu_B.$$

$$Cr_8 - \mu_X = -3.150\mu_B, \mu_Y = 0.456\mu_B.$$

$$E_{tot} = -578.86547 eV$$

