



## Первопринципные высокопроизводительные расчёты магнитных свойств одноосного кирального гелимагнетика

Евсин Д.В.<sup>1</sup>, Прудников П.В.<sup>2,1</sup>, Мамонова М.В.<sup>1</sup>, Борзилов В.О.<sup>1</sup>, Ложников В.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск

<sup>2</sup> Центр новых химических технологий ИК СО РАН, г. Омск



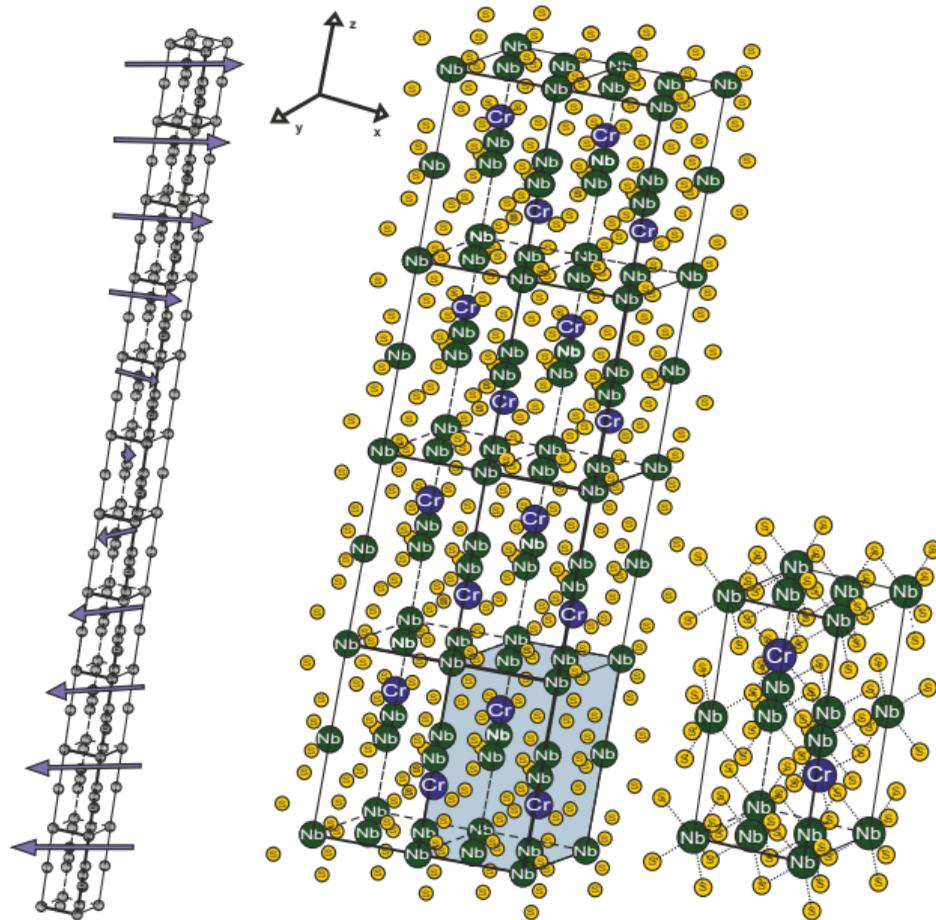


Рис. 1. Кристаллическая структура одноосного кирального гелимагнетика  $CrNb_3S_6$ .

## Плавление солитонной решетки в $\text{CrNb}_3\text{S}_6$

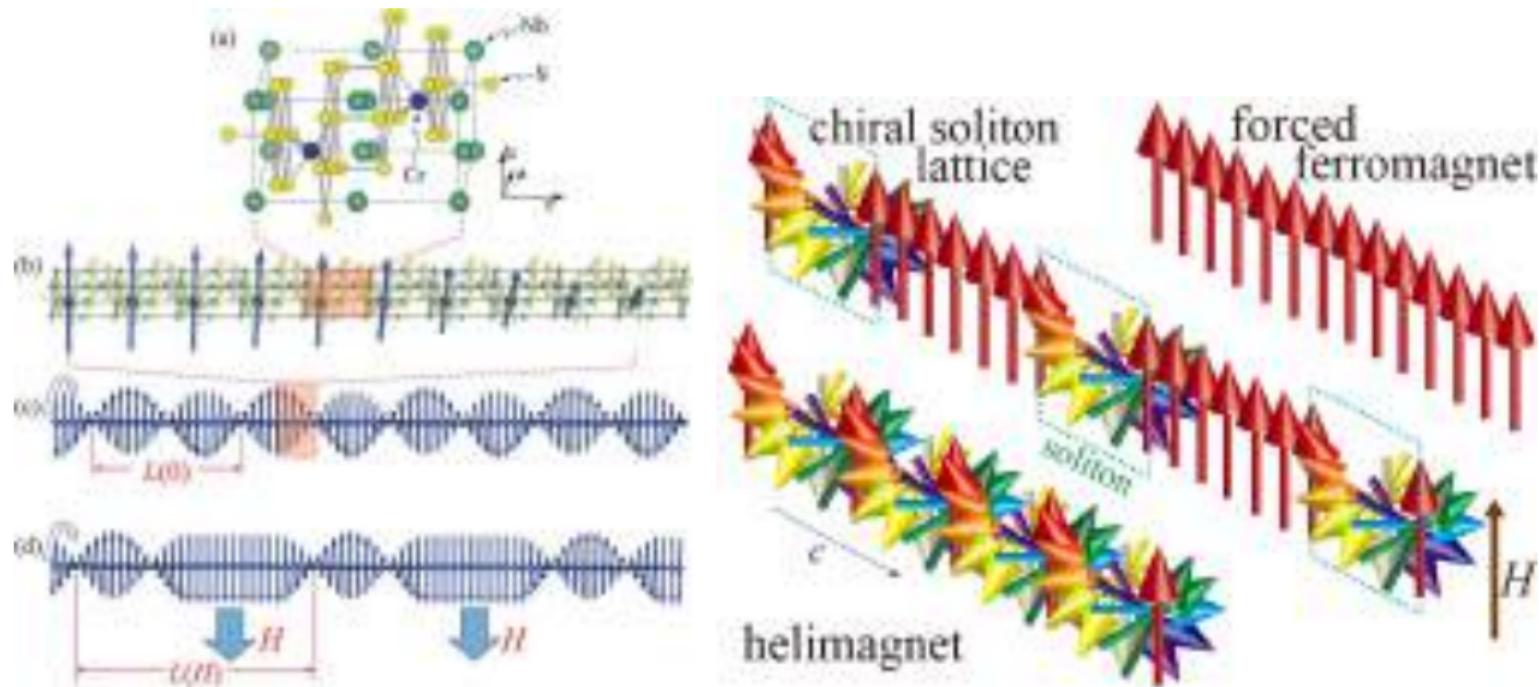


Рис. 2. Плавление КСР во внешнем магнитном поле в  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  [3,4].

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

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

## Плавление солитонной решетки в $\text{CrNb}_3\text{S}_6$

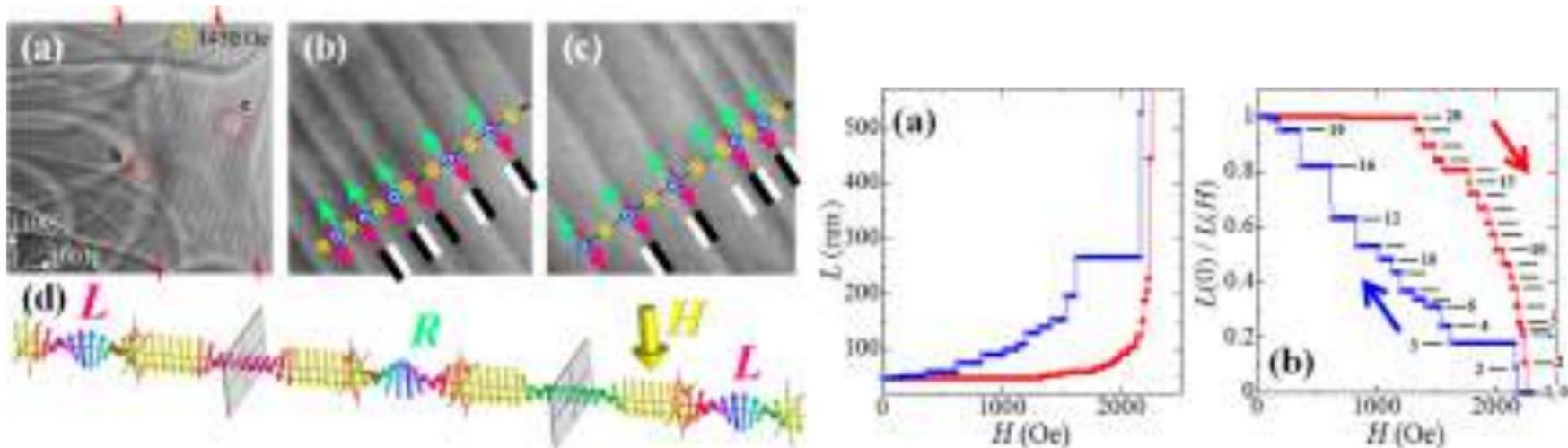
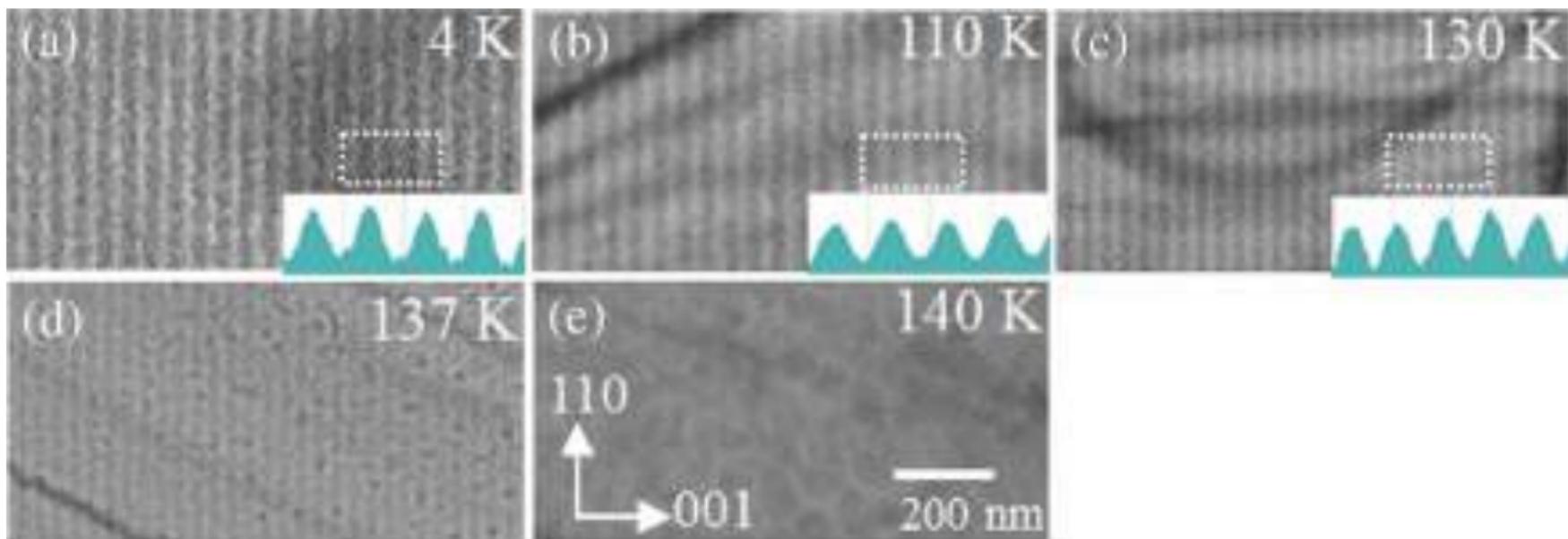


Рис. 3. Дискретность плавления КСР во внешнем магнитном поле в  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  [6].

<sup>6</sup>Y. Togawa et al., J. Phys. Soc. Jpn. 85, 112001 (2016);

## Плавление солитонной решетки в тонком слое $\text{CrNb}_3\text{S}_6$



**Рис. 4.** Плавление КСР в тонком слое  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  во внешнем магнитном поле [8].

<sup>8</sup>Y. 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  $\alpha$  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.

<sup>9</sup>S. 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:

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

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

## Распространение спиновой спирали

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

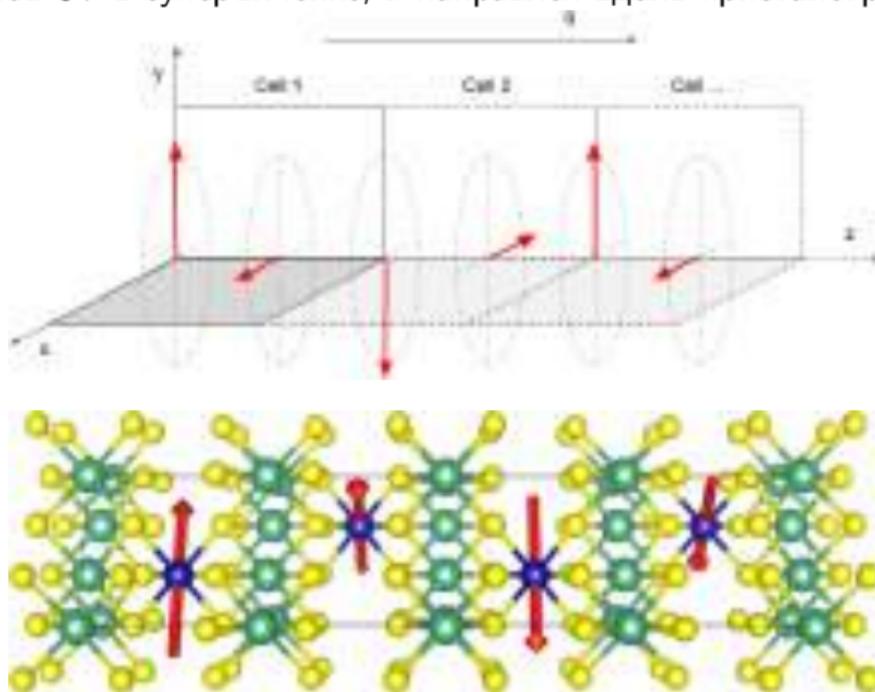


Рис. 5. Ориентация вектора распространения спиновой спирали в системе.

## Одиная суперъячейка $Cr_2Nb_6S_{12}$

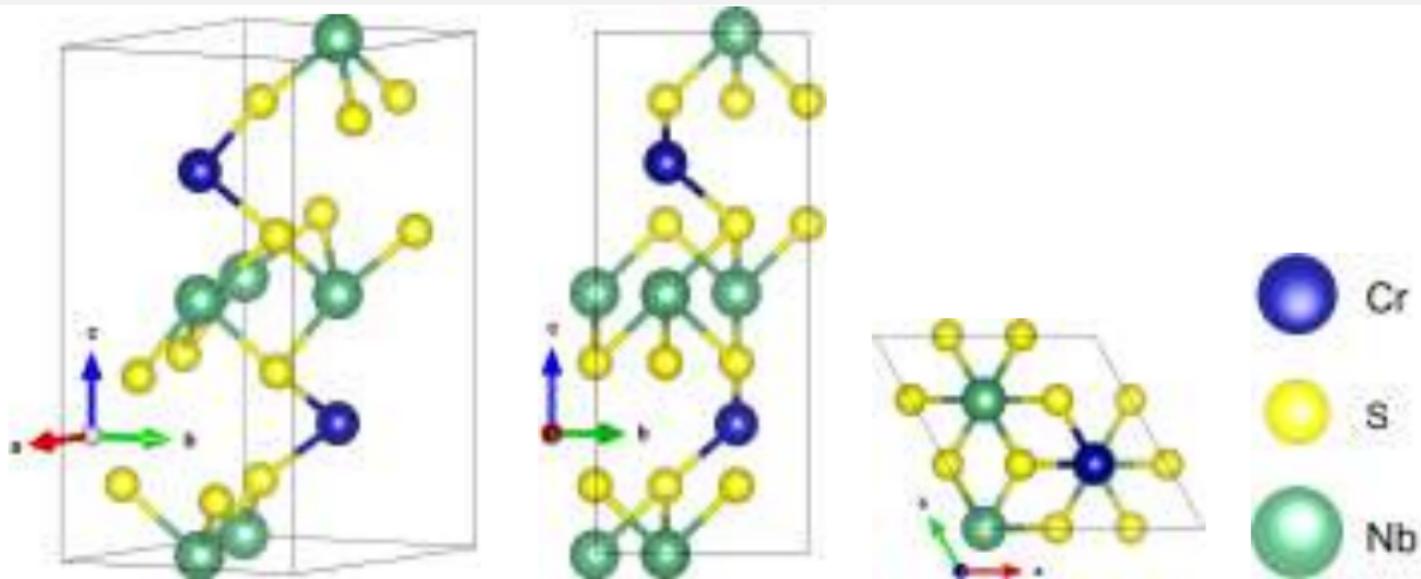


Рис. 6. Структура одинарной суперъячейки  $Cr_2Nb_6S_{12}$

(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].

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

## Параметры сходимости

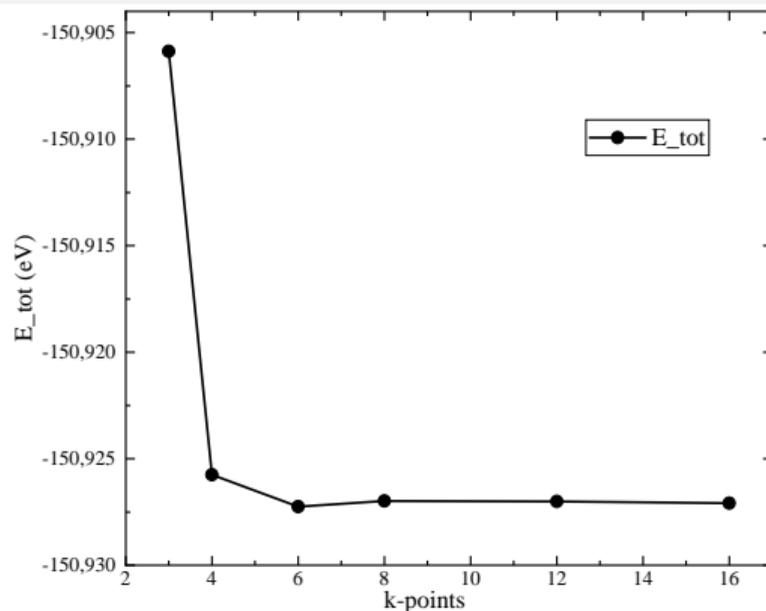


Рис. 7. Сходимость полной энергии системы по к-точкам.

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  $-5 \text{ \AA}$ .

## Одиная объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

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

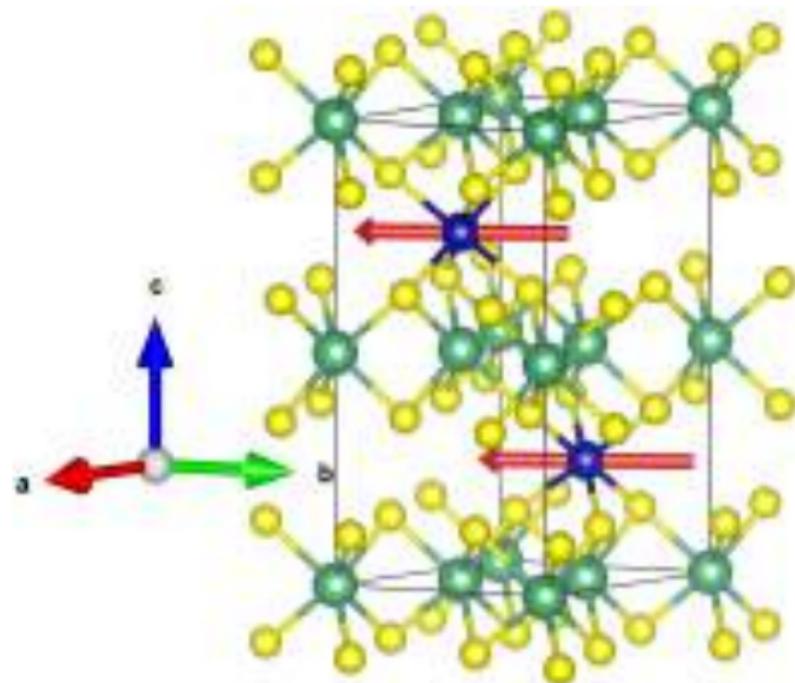
$$Cr_2 - \mu_X = 0.000\mu_B, \mu_Y = 3.000\mu_B;$$

Полученные значения намагниченности:

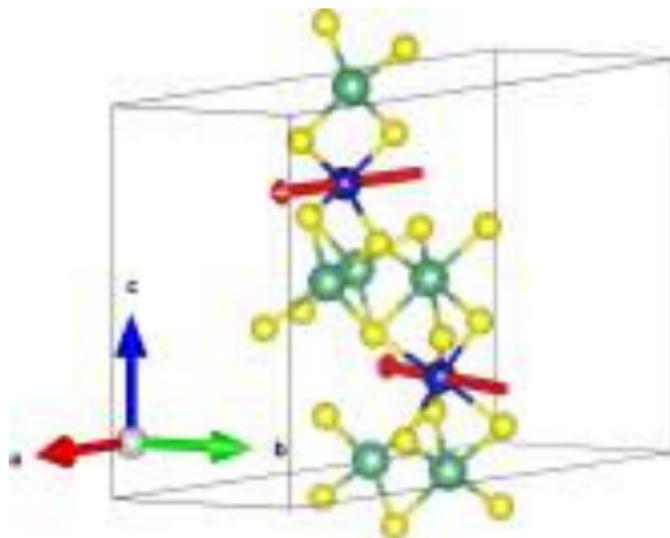
$$Cr_1 - \mu_X = 1.981\mu_B, \mu_Y = -1.981\mu_B;$$

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

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



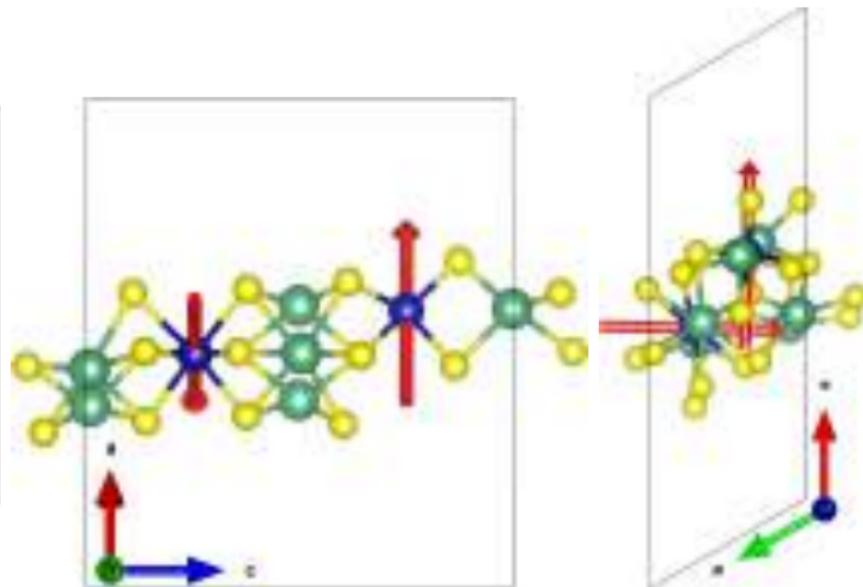
## Одиная ячейка плёнки



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:

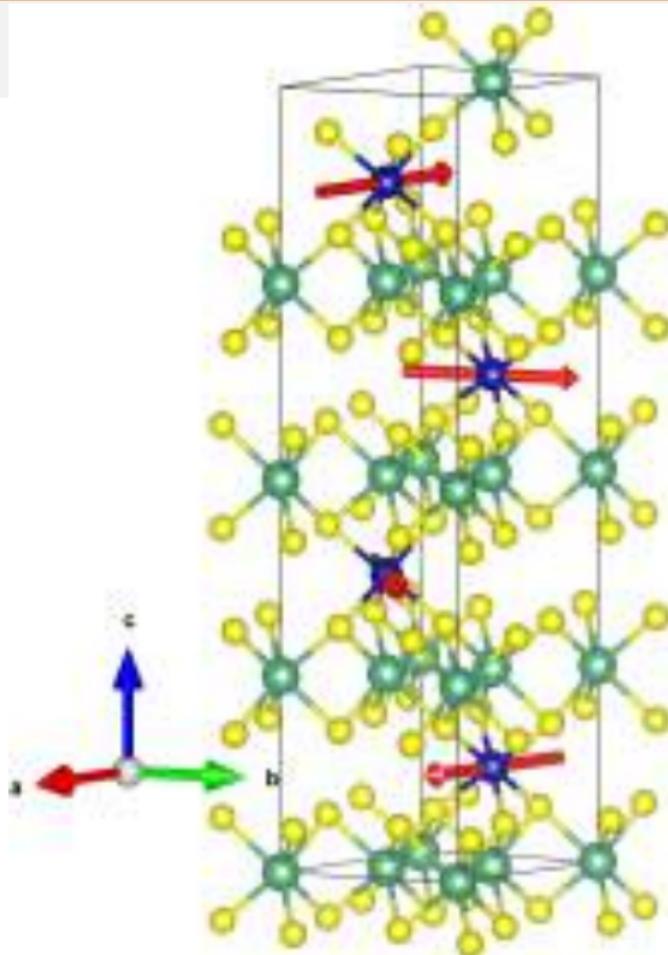
$$Cr_1 - \mu_X = 2.705\mu_B, \mu_Y = -0.589\mu_B;$$

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

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

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

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



## 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:

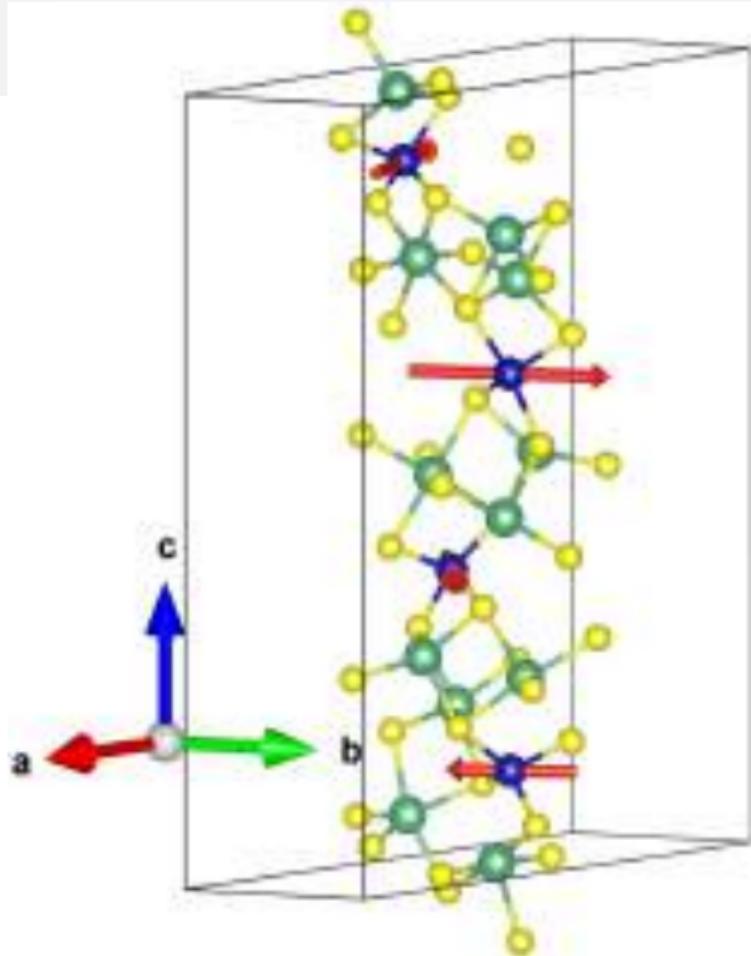
$$Cr_1 - \mu_X = 1.343\mu_B, \mu_Y = -1.497\mu_B;$$

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

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

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

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



## 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:

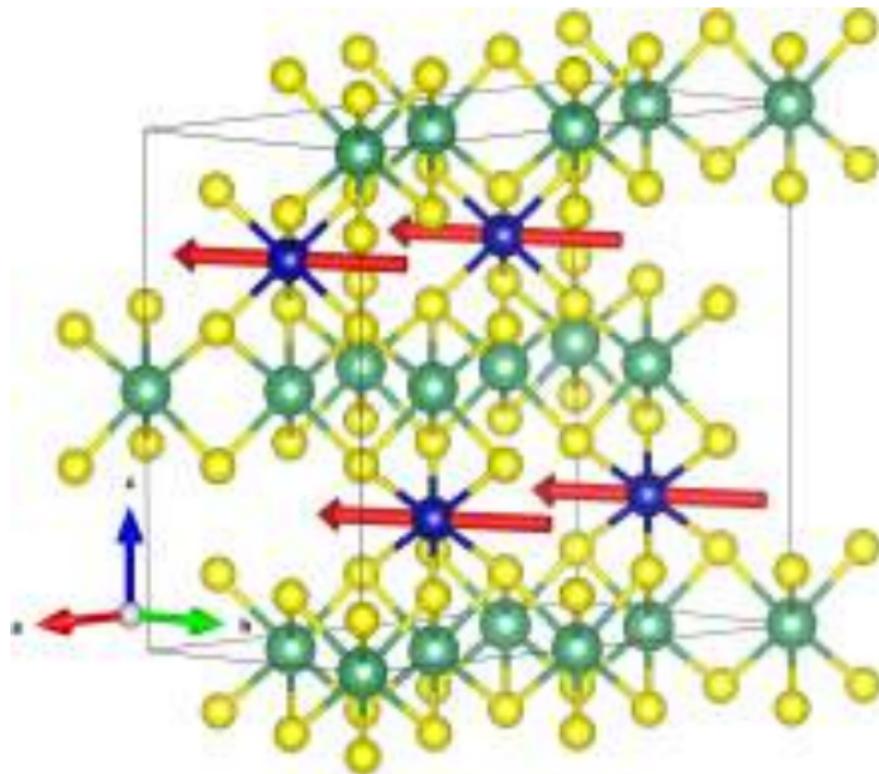
$$Cr_1 - \mu_X = 1.982\mu_B, \mu_Y = -1.982\mu_B;$$

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

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

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

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



## 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:

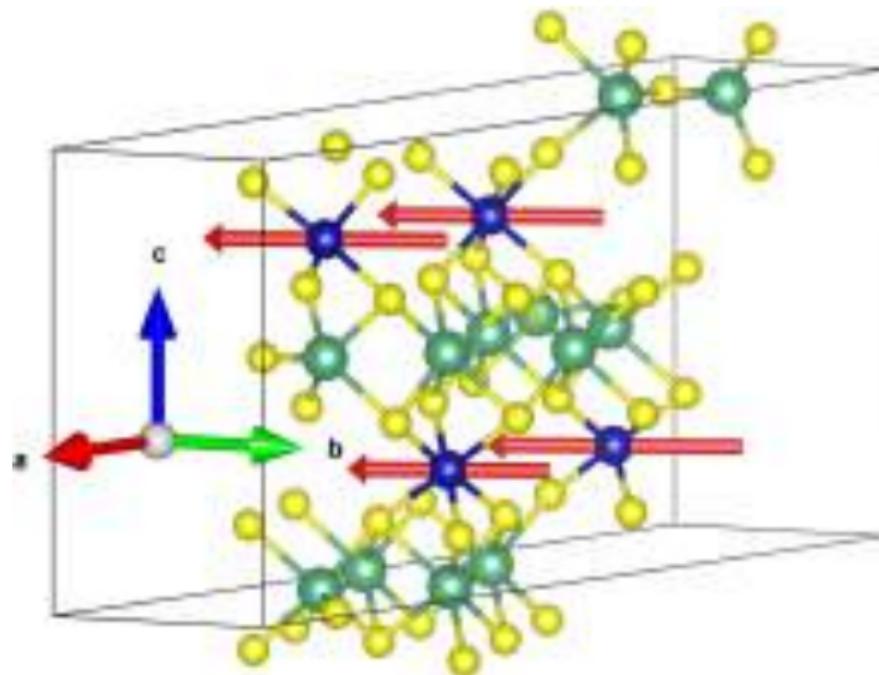
$$Cr_1 - \mu_X = 2.375\mu_B, \mu_Y = -2.343\mu_B;$$

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

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

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

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



## 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:

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

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

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

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

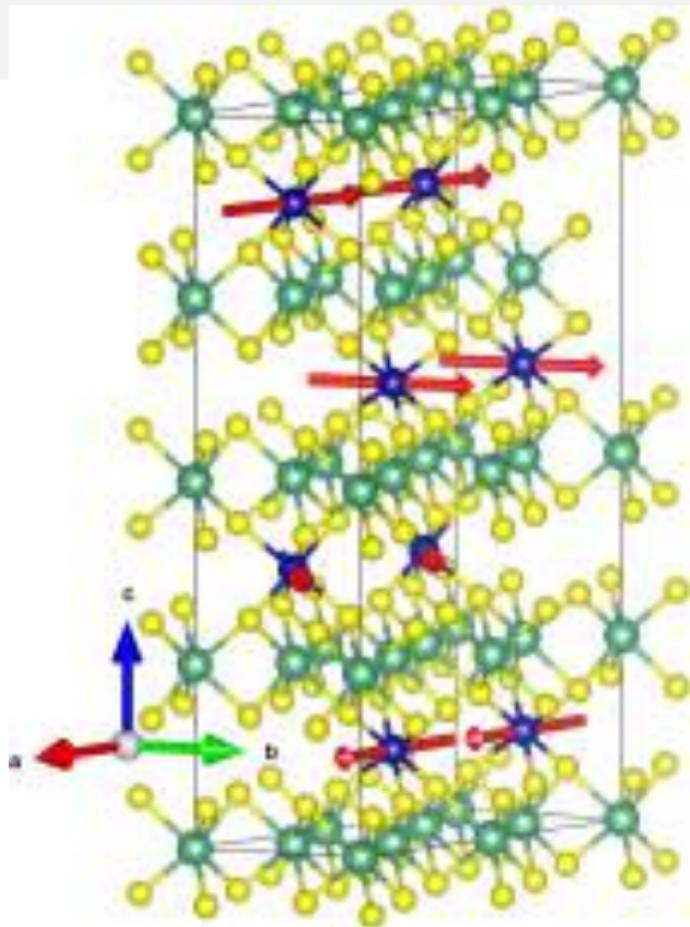
$$Cr_5 - \mu_X = 1.572\mu_B, \mu_Y = 2.329\mu_B;$$

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

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

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

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



## Четырёхкратная вдоль $c$ объёмная ячейка

Заданные значения намагниченности:

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

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

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

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

$$Cr_5 - \mu_X = 2.130\mu_B, \mu_Y = 2.130\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = -2.130\mu_B, \mu_Y = 2.130\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = -2.130\mu_B, \mu_Y = -2.130\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = 2.130\mu_B, \mu_Y = -2.130\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = 2.787\mu_B, \mu_Y = -0.395\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 0.672\mu_B, \mu_Y = 2.742\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = -2.549\mu_B, \mu_Y = 1.213\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -1.677\mu_B, \mu_Y = -2.271\mu_B;$$

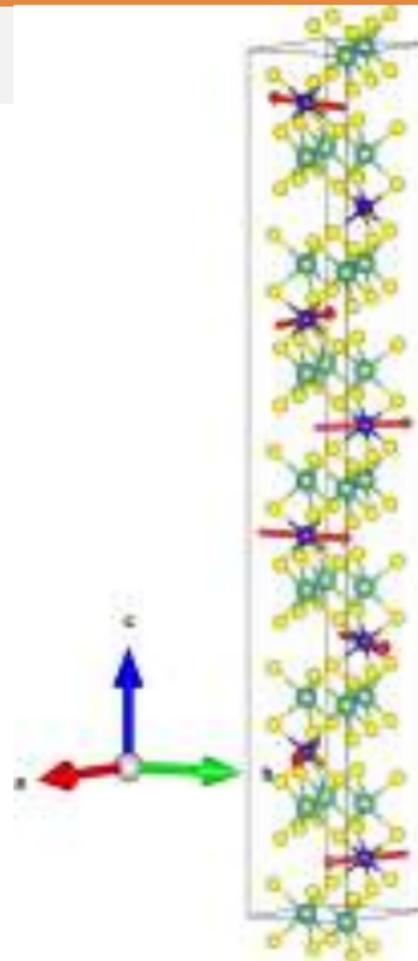
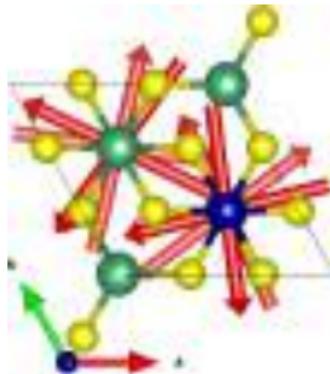
$$Cr_5 - \mu_X = 2.267\mu_B, \mu_Y = 1.682\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = -1.207\mu_B, \mu_Y = 2.552\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = -2.741\mu_B, \mu_Y = -0.676\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = 0.389\mu_B, \mu_Y = -2.788\mu_B.$$

$$E_{tot} = -603.80745 \text{ eV}$$



## Четырёхкратная вдоль $c$ ячейка плёнки

Заданные значения намагниченности:

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

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

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

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

$$Cr_5 - \mu_X = 2.130\mu_B, \mu_Y = 2.130\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = -2.130\mu_B, \mu_Y = 2.130\mu_B;$$

$$Cr_7 - \mu_X = -2.130\mu_B, \mu_Y = -2.130\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = 2.130\mu_B, \mu_Y = -2.130\mu_B.$$

Полученные значения намагниченности:

$$Cr_1 - \mu_X = -1.695\mu_B, \mu_Y = -1.824\mu_B;$$

$$Cr_2 - \mu_X = 2.078\mu_B, \mu_Y = -1.393\mu_B;$$

$$Cr_3 - \mu_X = 1.556\mu_B, \mu_Y = 1.961\mu_B;$$

$$Cr_4 - \mu_X = -1.826\mu_B, \mu_Y = 1.713\mu_B;$$

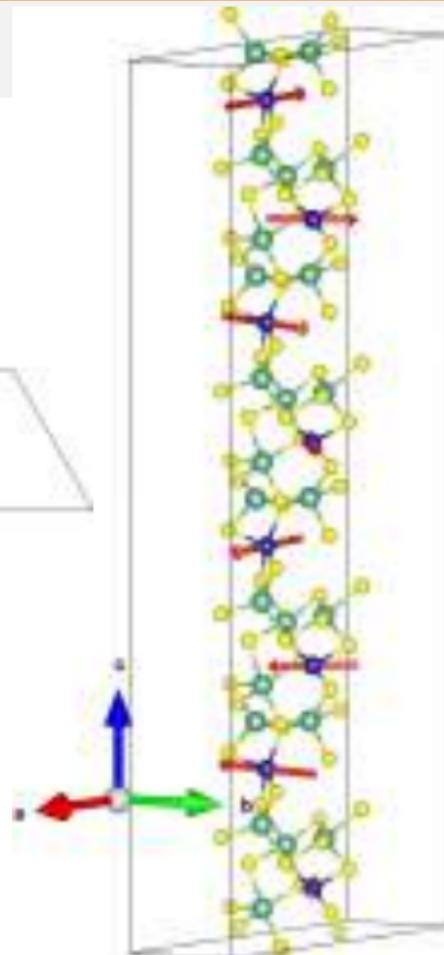
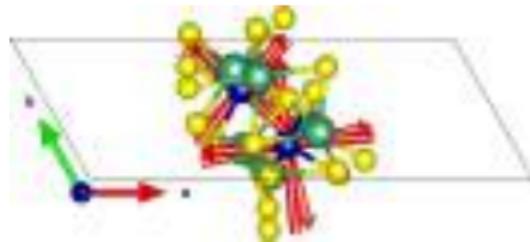
$$Cr_5 - \mu_X = 0.816\mu_B, \mu_Y = -3.018\mu_B;$$

$$Cr_6 - \mu_X = 3.068\mu_B, \mu_Y = 0.636\mu_B;$$

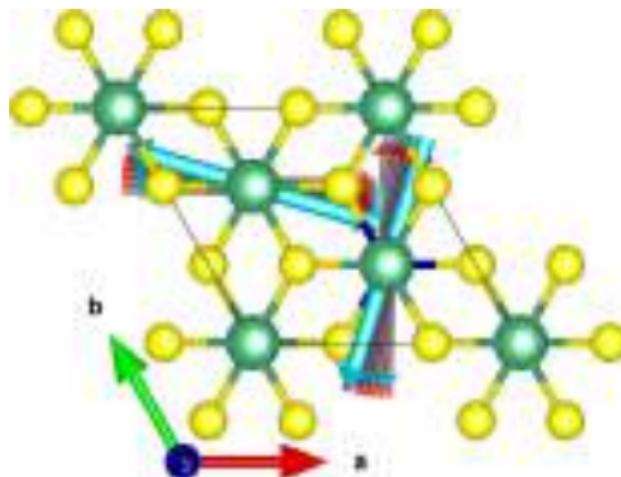
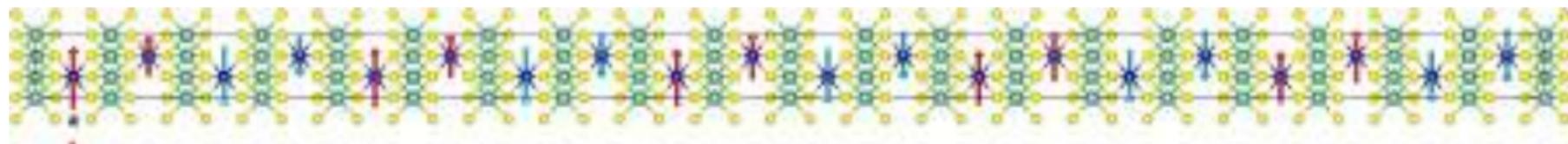
$$Cr_7 - \mu_X = -0.307\mu_B, \mu_Y = 3.118\mu_B;$$

$$Cr_8 - \mu_X = -3.116\mu_B, \mu_Y = -0.286\mu_B.$$

$$E_{tot} = -570.68865 \text{ eV}$$

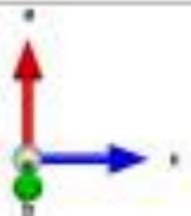
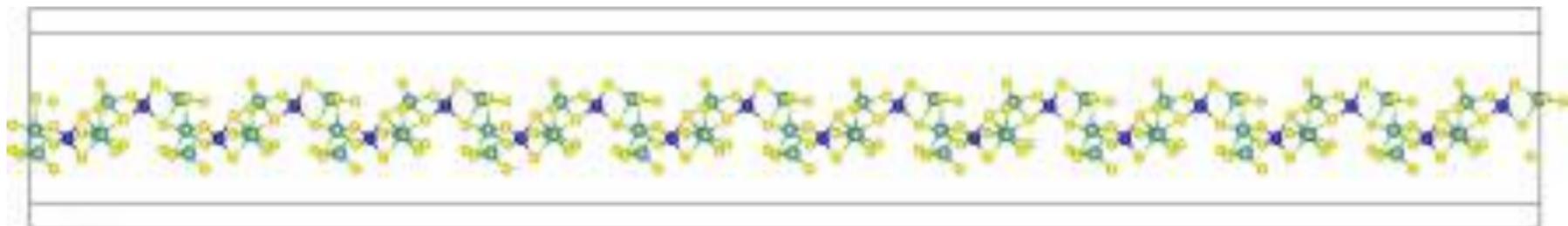


## Десятикратная вдоль $c$ объёмная ячейка



$$E_{tot} = -1508.99256 \text{ eV}$$

## Десятикратная вдоль $c$ ячейка немагнитной плёнки



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

- В данной работе было проведено моделирование одноосного кирального гелимагнетика в рамках первопринципного пакета VASP.
- Выявлено гелимагнитное состояние в объемной и плёночной структурах.
- 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!

Для выполнения расчётов были использованы вычислительные ресурсы:

- Лаборатории теоретической физики, прикладного моделирования и параллельных вычислений, ОмГУ им Ф.М. Достоевского;
- ЦКП «центр данных ДВО РАН» [11].



<sup>11</sup> А.А. Сорокин, С.В. Макогонов, С.П. Королев // Научно-техническая информация. Серия 1: Организация и методика информационной работы. 2017. № 12. С. 14-16.

## Ресурсоёмкость относительно k-points

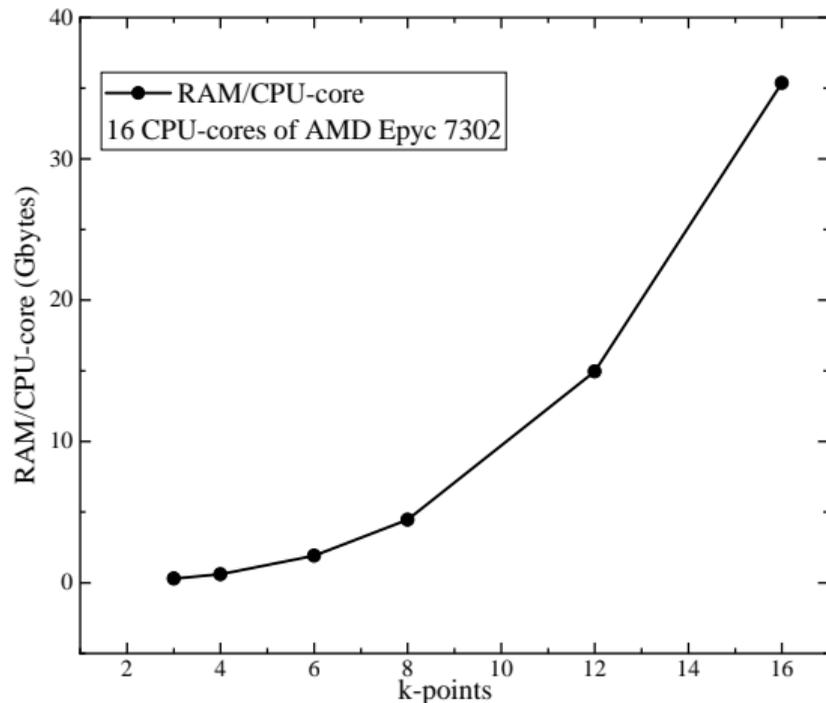
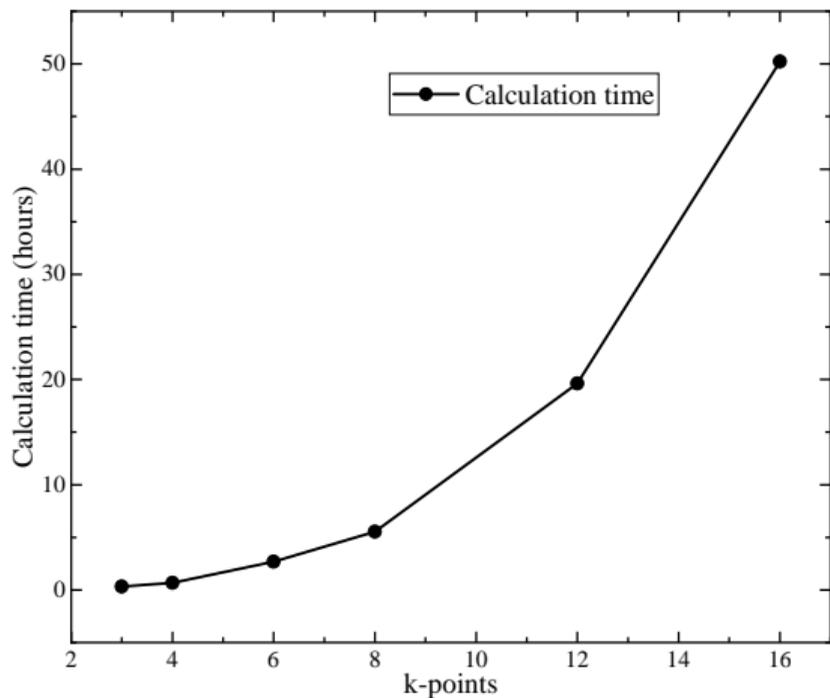


Рис. 8. Время и оперативная память на один MPI-поток, затраченные на расчёт одинарной объёмной ячейки  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$ .

## Плавление солитонной решетки $\text{CrNb}_3\text{S}_6$

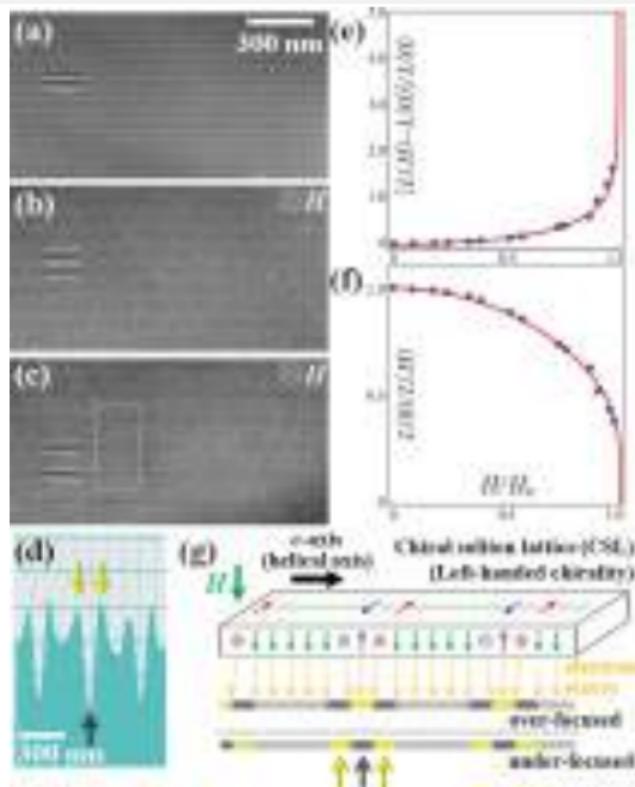


Рис. 9. Плавление КСР во внешнем магнитном поле в  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  [13].

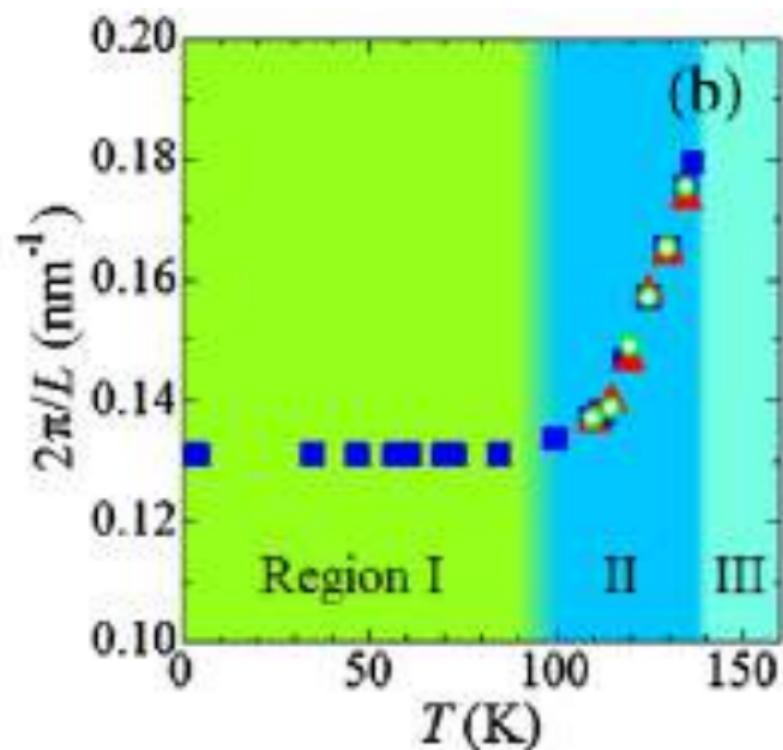
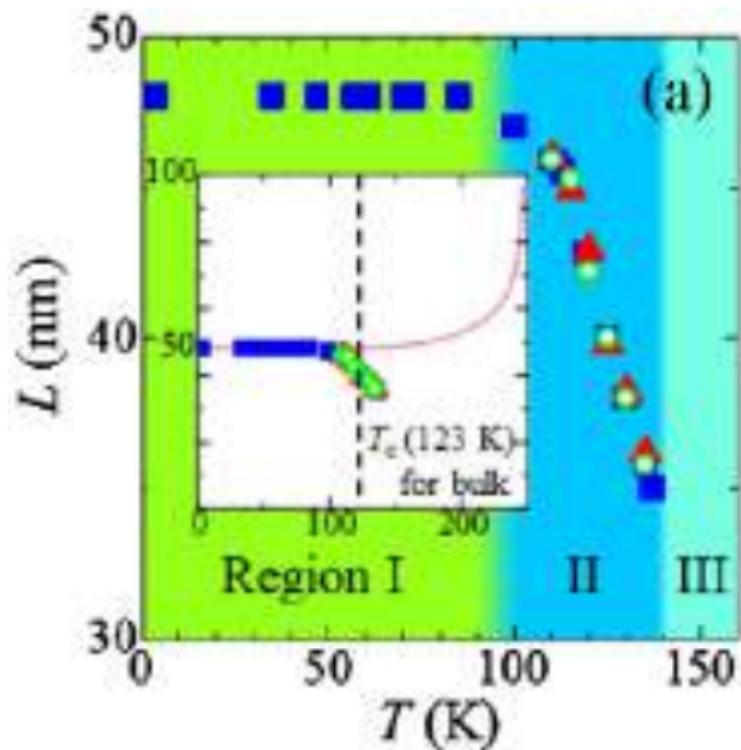


Рис. 10. Плавление КСР во внешнем магнитном поле в в тонком слое  $CrNb_3S_6$  [15].



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 смешение 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  $\alpha$  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  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$  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  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ . [16] 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  $\phi_i(\mathbf{r}) = R_i(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{R}}_i)$  - парциальные волны атома с центром в  $\mathbf{R}_i$ ,  $\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}^{\alpha}$  — — спинорная компонента  $\alpha$  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].

<sup>16</sup>Steiner S., Khmelevskiy S., Marsman M., Kresse G., Phys. Rev. B — 2016. V. 93, 224 — P425.

## Двойная вдоль $a$ и $c$ ячейка плёны

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$E_{\text{tot}} = 578.86547 \text{ eV}$$

