НИУ ВШЭ Московский институт электроники и математики им. А. Н. Тихонова

Департамент электронной инженерии

Москва
2025

Моделирование спиновых волн в низкоразмерных магнетиках

Ихсанов Р.Ш., доцент ДЭИ МИЭМ ВШЭ

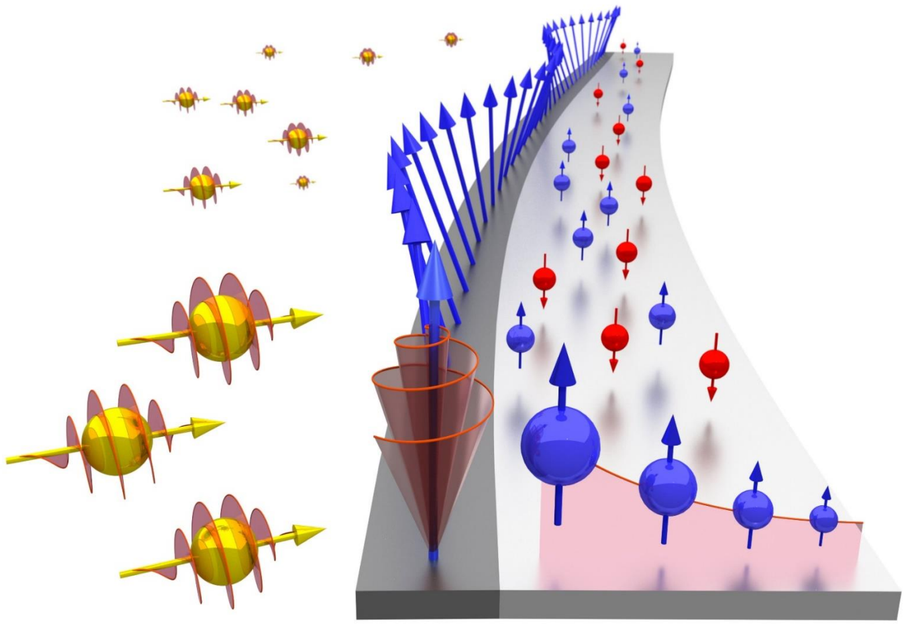
Актуальность :

Классическая электроника ограничена физически.

Магноника — новое направление, использующее спиновые волны (магноны) вместо электронов.

Квазидвумерные магниты открывают перспективы в:

- Наноэлектронике
- Спинтронике
- Квантовых вычислениях



Исследование магнитных свойств производится с помощью:

- Пакета VASP — Vienna Ab initio Simulation Package (DFT)
- Разработанного программного пакета на основе пакетов Mathcad, MATLAB и библиотеки Matlab-процедур SpinW

Результатом работы является пакет для расчета спиновых спектров и рассчитанные спектры для трех структур

Цель — разработка методов и расчет параметров квазидвумерных магнитных соединений.

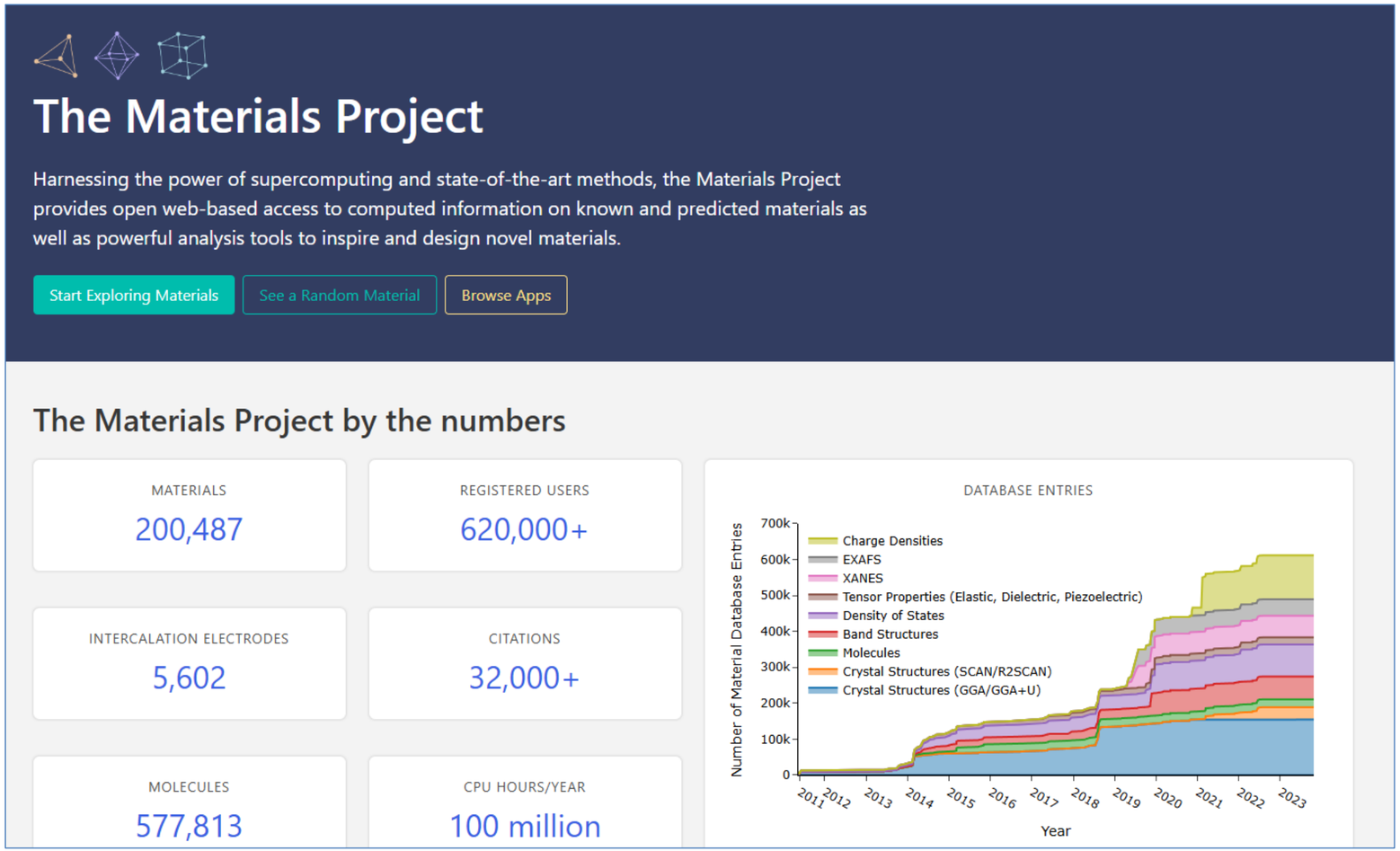
Задачи:

1. Геометрическая оптимизация атомной структуры соединений.
2. Расчёт электронной структуры в VASP.
3. Извлечение параметров обменных взаимодействий.
4. Расчет спектров в SpinW.

Результаты:

Зонные структуры, плотности состояний, спектры магнонов.

Выбор материалов для исследования



Выбор материалов для исследования: низкоразмерные магнетики на основе редкоземельных металлов (например, Ce)

4 materials match your search

Showing 1-4

✕ Chemical System: Ce-I

Material ID	Formula	Crystal System	Space Group Symbol
mp-1545417	CeI_3	Monoclinic	$P12_1/m1$
mp-1025426	CeI_3	Orthorhombic	Cmcm
mp-1183849	CeI_3	Hexagonal	$P6_3/mmc$
mp-1183731	Ce_3I	Hexagonal	$P6_3/mmc$

2d	Experimentally observed	No
1d	Experimentally observed	No
2d	Experimentally observed	No
3d	Experimentally observed	No

Оптимизация (релаксация) структур в VASP

POSCAR – координаты атомов
POTCAR – псевдопотеницалы
KPOINTS – сетка в k-пространстве
INCAR – настройки процедуры релаксации

OUTCAR – результаты расчетов
CONTCAR – оптимизированные координаты атомов

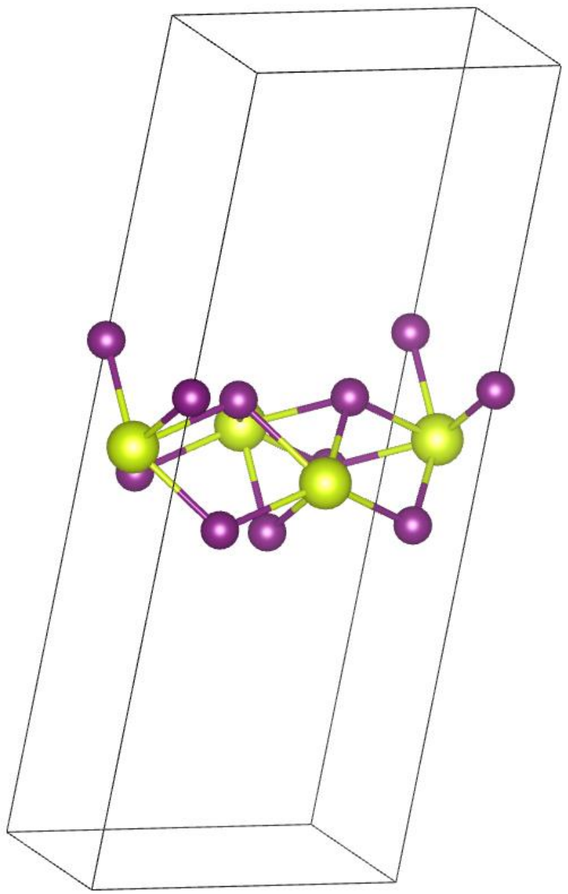
b-initio
ackage
imulation
ienna

Оптимизация (релаксация) структур в VASP

```
#General parameters:_____________________________________________________
 #Reading and writing WAVECAR and CHGCAR files:
  ISTART = 1            ! 0 - start from the scratch, 1 - from previous results (***)
  ICHARG = 1            ! 0 - start from the scratch, 1 - read the charge density from file CHGCAR (***)
  LWAVE = .TRUE.        ! Write the WAVECAR (however, default option)
  LCHARG = .TRUE.       ! Write CHGCAR or not (however, default option)
 #Projector-augmented-wave (PAW) formalism:_____________________________
  LASPH = True          ! non-spherical contributions related to the gradient of the density in the PAW spheres
  LMAXMIX = 6           ! LMAXMIX controls up to which l-quantum number the one-center PAW charge densities are passed through the charge density mixer and written to the CHGCAR file
 #Others:
  LREAL = .FALSE.       ! Projection operators (however, default value)
  PREC = Normal         ! Precision level
  ADDGRID = .TRUE.      ! if TRUE - increase grid, helps GGA convergence
  LORBIT = 11           ! Selects a projection method onto local quantum numbers

#Electronic subsystem:__________________________________________________
 GGA = PE               ! GGA specifies a LDA or GGA exchange-correlation functional (PS - revised PBE for solids)
 ENCUT  = 520           ! Energy cut-off
 ALGO = 53              ! Electronic minimization algorithm (48, 53, D and Fast also)
 #Smearing:
  ISMEAR = -1           ! -5 - tetrahedron, 0 - gaussian, Fermi smearing
  SIGMA = 0.05          ! width of the smearing
 #Electronic steps:
  NELM = 150            ! NELM sets the maximum number of electronic SC (self-consistency) steps
  NELMIN = 8            ! NELMIN specifies the minimum number of electronic self-consistency steps (in ionic-minimization methods we recommend increasing the NELMIN tag to a value between 4 and 8)
  EDIFF = 1E-07         ! EDIFF specifies the global break condition for the electronic SC-loop. EDIFF is specified in units of eV.
 #Spin-orbit coupling:
  #LSORBIT = .TRUE.     ! Switch on spin-orbit coupling (***)
  #GGA_COMPAT = .FALSE. ! apply spherical cutoff on gradient field

#Magnetism:_____________________________________________________________
 ISPIN = 2              ! 1 - non spin-polarized calculations; 2 - spin polarized calculations
 MAGMOM = 2*0.941 4*-0.014 2*-0.015   ! Initial magnetic moment for each atom if no magnetization density is present

#Lattice Relaxation:____________________________________________________
 NSW = 500              ! Number of ionic steps (***)
 EDIFFG = -1E-04        ! Ionic convergence, eV/A. The relaxation is stopped when the norms of all the forces are smaller than |EDIFFG|.
 IBRION = 2             ! Conjugate gradient algorithm for ionic relaxation (algorithm: 0-MD; 1-Quasi-New; 2-CG)
 ISIF = 4               ! positions   cell shape   cell volume: yes no no (for ISIF=2) (Stress/relaxation: 2-Ions, 3-Shape/Ions/V, 4-Shape/Ions)
```

Оптимизация (релаксация) структур в VASP

mp-1025426:



```
POSITION                                       TOTAL-FORCE (eV/Angst)
-----------------------------------------------------------------------------------
     2.19389     -0.00000     12.21050         0.000000      0.000000     -0.000077
     0.00000      5.05777     11.88598        -0.000000      0.000000      0.000077
    -0.00000      8.26523     10.56818         0.000000      0.000014     -0.000066
     2.19389      6.90808     13.52829        -0.000000     -0.000014      0.000066
     2.19389      3.20746     13.52829        -0.000000      0.000014      0.000066
     0.00000      1.85031     10.56818         0.000000     -0.000014     -0.000066
     0.00000     -0.00000     14.51289         0.000000      0.000000     -0.000004
     2.19389      5.05777      9.58359        -0.000000      0.000000      0.000004
-----------------------------------------------------------------------------------
   total drift:                               -0.000000      0.000000      0.000000
```

```
 magnetization (x)

# of ion       s       p       d       f       tot
-----------------------------------------------------
    1        0.004  -0.044   0.013   0.980   0.953
    2        0.004  -0.044   0.013   0.980   0.953
    3       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
    4       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
    5       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
    6       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
    7       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
    8       -0.000  -0.009   0.000   0.000  -0.009
-----------------------------------------------------
tot          0.006  -0.143   0.028   1.959   1.851
```

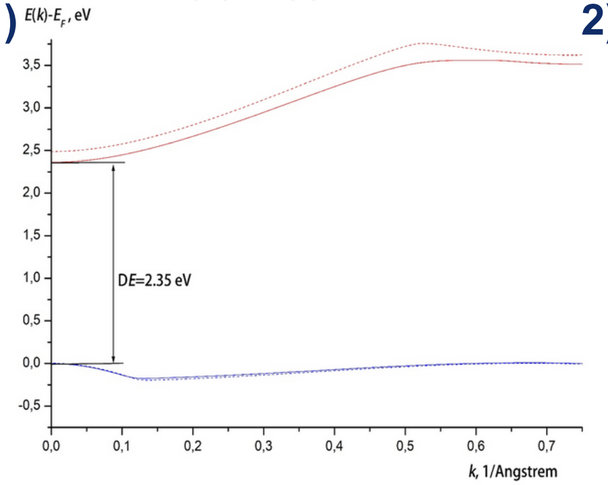
Намагниченность в магнетонах Бора:

Materials Project data	
1	
1	
0.6	
0.6	
0.6	
0.6	
0.6	
0.6	
5.6	

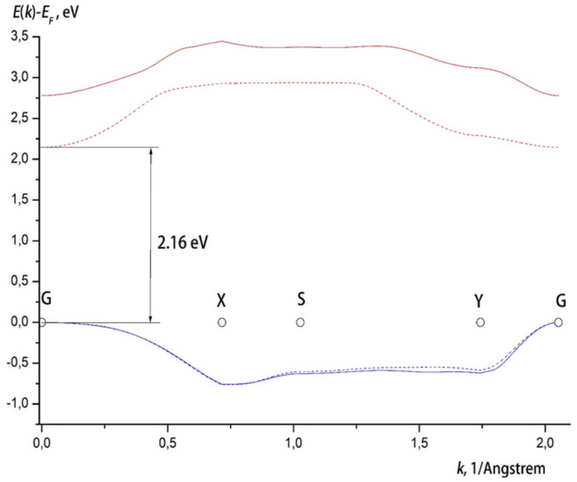
Представление результатов исследования (VASP):

Зонная структура:

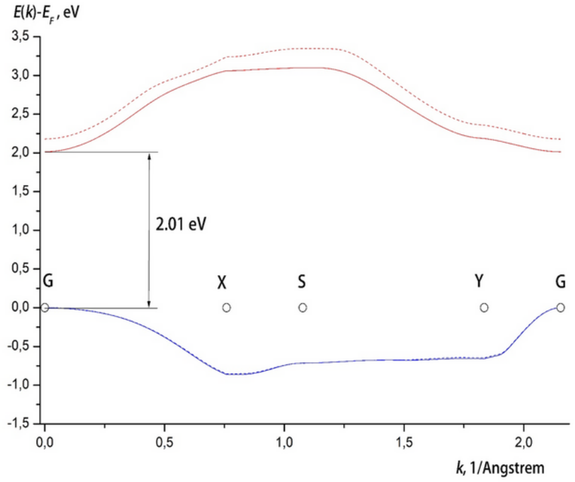
1)



2)

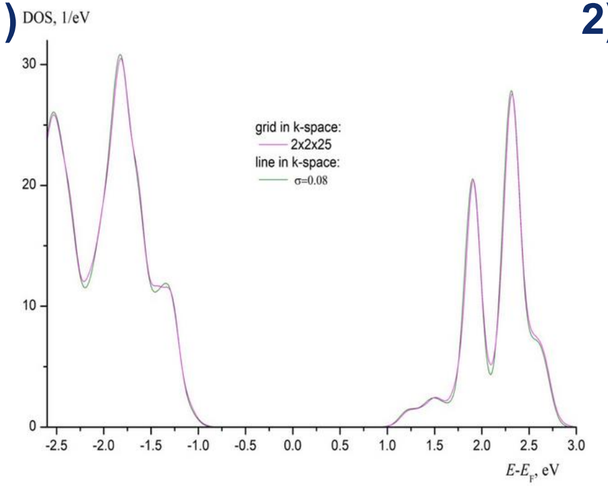


3)

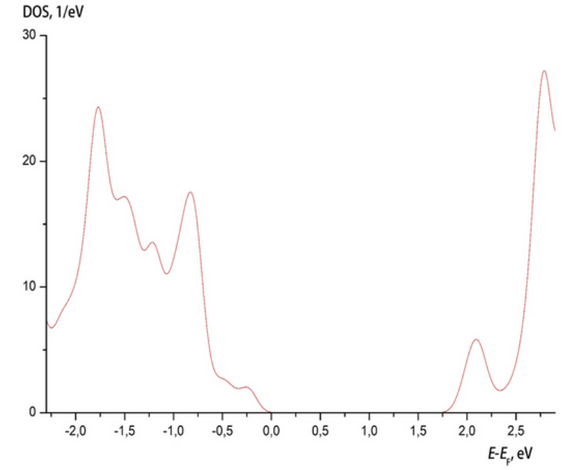


Плотность состояний:

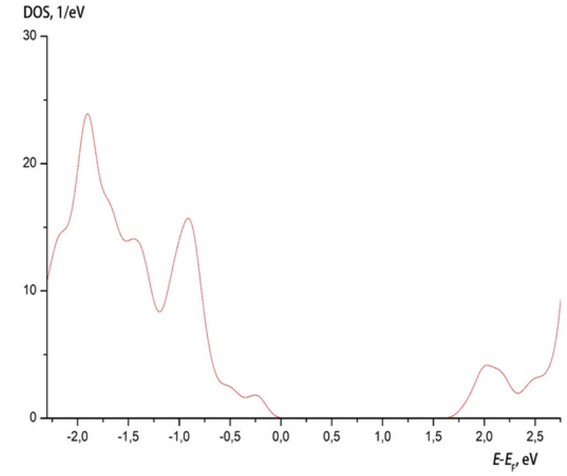
1)



2)



3)



1) mp-1183849 (1D)

2) mp-1025426 (2D)

3) mp-1545417 (2D)

Все соединения - широкозонные полупроводники

Пакет для расчета спинового спектра на основе библиотеки SpinW

Равновесная конфигурация атомов

VASP

Обменные константы

Abacus

Спиновый спектр

SpinW

Интерфейс (Mathcad)

Расчеты (Matlab)

Интерфейс (Mathcad)

Расчет спинового спектра

Режим расчета:

$flag_m := 1$ - флажок, который указывает режим расчета:
0 - определение номеров связей
1 - расчет спектра

$N_{crd} := 10$ - число координационных сфер при расчете числа связей (максимальная длина связей - длина диагонали ячейки)

Материал:

Файлы с данными, заполняемые вручную:
cell.dat - элементарная ячейка (масштабный множитель в POSCAR должен быть равен 1)
atoms.dat - атомы в элементарной ячейке: матрица из POSCAR (в режиме Direct) + спины атомов
bondscol.dat - цвета связей (по возрастанию номеров)
atomscol.dat - цвета атомов (в порядке строк файла atoms.dat)

Матрица параметров J-связей:
1) первая колонка - первый индекс связей;
2-3) вторая и третья - диапазон вторых индексов связей;
4) четвертая - параметры J (в meV).

$$J := \begin{pmatrix} 8 & 1 & 2 & -1.2 \\ 9 & 1 & 4 & -0.953 \\ 4 & 1 & 2 & -0.01 \\ 5 & 1 & 4 & -0.01 \\ 1 & 1 & 4 & 0.1 \end{pmatrix}$$

Связи (первый индекс, тип и длина):
8 - Ce-Ce, 4.388
9 - Ce-Ce, 5.523
4 - I-I, 3.701
5 - I-I, 3.926
6 - Ce-I, 3.18

Численный расчет:

$N_{bds} := 5$ - число учитываемых при расчете связей (начиная с первой строки матрицы J)

$N_{opt} := 1$ - число циклов оптимизации магнитной структуры (0 означает отсутствие оптимизации)

$SpinArrow := 0$ **Стрелки спинов на рисунке в Matlab:**
1 - показывают только направление спина;
0 - показывают направление и величину спина.

Размеры магнитной ячейки (целые множители по осям):

$n_{mc} := (1\ \ 1\ \ 1)$

Размеры ячейки для отображения на рисунке (целые множители по осям):

$n_{view} := (1\ \ 1\ \ 1)$

Матрица начальных ориентаций спинов (спины заданы в локальной СК, векторы спинов - в столбцах, в порядке, заданном в файлах atoms.dat и atomscol.dat):

$$S_{init} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Вектор нормали к плоскости, в которой вращаются спины (задан в локальной СК):

$n_{pl} := (1\ \ 0\ \ 0)$

Необходимые константы:

$h_D := 6.58212 \times 10^{-16}$ - редуцированная постоянная Планка (постоянная Дирака), эВ с

$k_B := 8.61733 \times 10^{-5}$ - постоянная Больцмана, $\frac{эВ}{K}$

$e_q := 1.6021766 \times 10^{-19}$ - заряд электрона, Кл

$N_A := 6.022045 \times 10^{23}$ - постоянная Авогадро, 1/моль

Примечания:
1) Программа принимает из этой матрицы только направление спина. Абсолютные величины спинов содержатся в последней колонке матрицы файла atoms.dat.
2) Правила заполнения матрицы для магнитной сверхъячейки содержатся в файле Readme.doc.

Примечание: Случай, когда спины вращаются в разных плоскостях, пока не реализован.

Файловая система пакета

Файлы, которые заполняются вручную:

atoms.dat	координаты атомов (из POSCAR) и их спины (последняя колонка)
cell.dat	элементарная ячейка (из POSCAR)
atomscol.dat	цвета атомов (в порядке строк файла atoms.dat)
bondscol.dat	цвета связей (в порядке строк матрицы J)

Файлы, которые заполняет Mathcad:

bonds.dat	
constants.dat	
km.dat	
kpoints.dat	
mode.dat	
n.dat	
numerics.dat	
Sinit.dat	
mc.dat	

Выходные файлы Matlab-а:

spectr_kE.dat	файл со спиновым спектром

atoms – Блокнот

Файл Правка Формат Вид Справка

```
 0.5000000000000000 -0.0000000000000000  0.5067337598442616 1
 0.0000000000000000  0.5000000000000000  0.4932662401557384 1
-0.0000000000000000  0.8170823379603306  0.4385779309892596 1
 0.5000000000000000  0.6829176620396694  0.5614220690107402 1
 0.5000000000000000  0.3170823379603303  0.5614220690107402 1
 0.0000000000000000  0.1829176620396696  0.4385779309892596 1
 0.0000000000000000 -0.0000000000000000  0.6022826704290036 1
 0.5000000000000000  0.5000000000000000  0.3977173295709966 1
```

cell – Блокнот

Файл Правка Формат Вид Справка

```
4.3877732855762677    0.0000000000000000    0.0000000000000000
0.0000000000000000   10.1155435711264357    0.0000000000000000
0.0000000000000000    0.0000000000000000   24.0964764897791426
```

atomscol – Блокнот

Файл Правка Формат Вид Справка

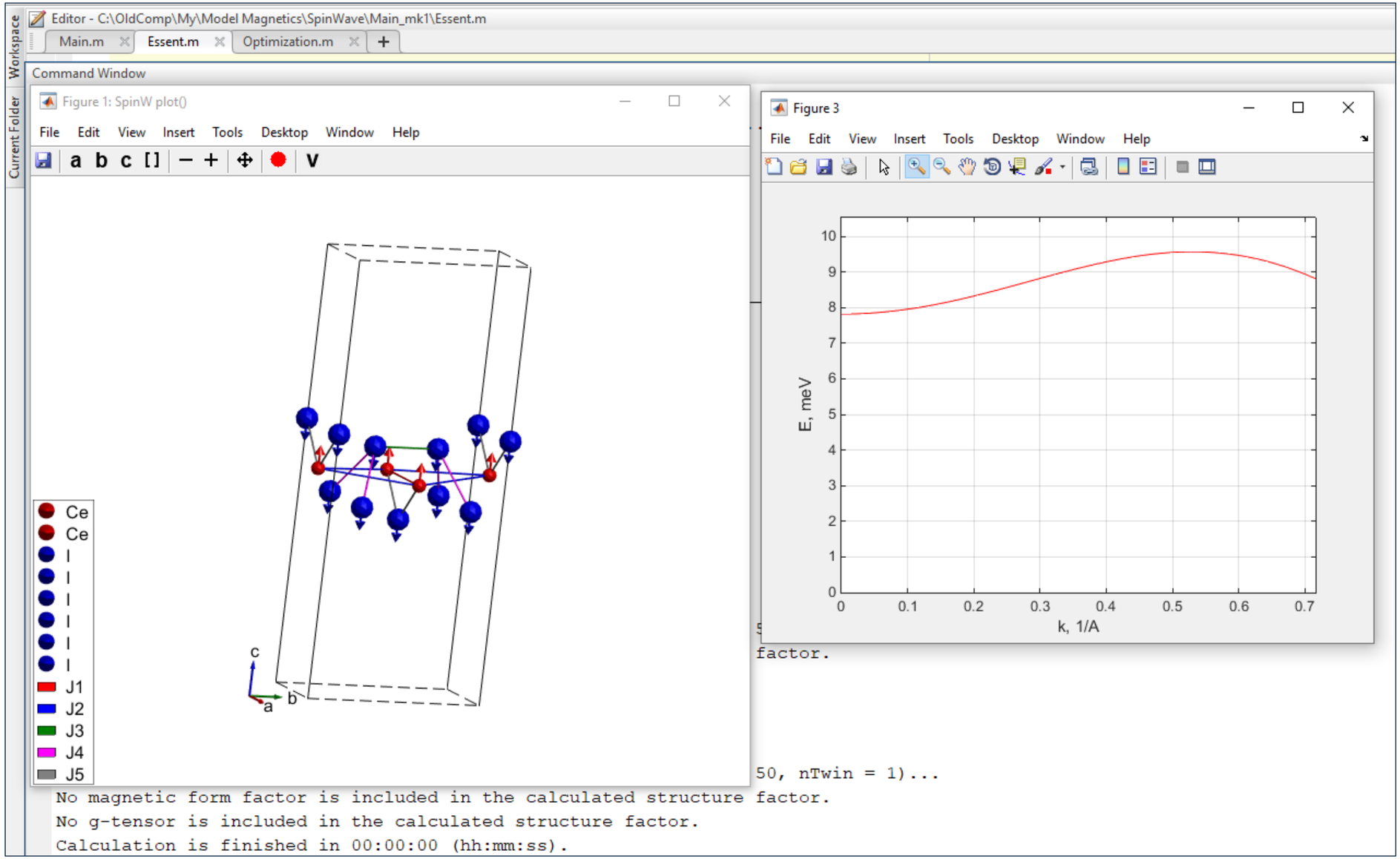
```
Ce red
Ce red
I blue
I blue
I blue
I blue
I blue
I blue
```

bondscol – Блокнот

Файл Правка Формат Вид Справка

```
red
blue
green
magenta
gray
brown
black
```

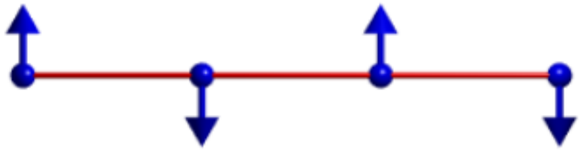
Расчеты (Matlab)



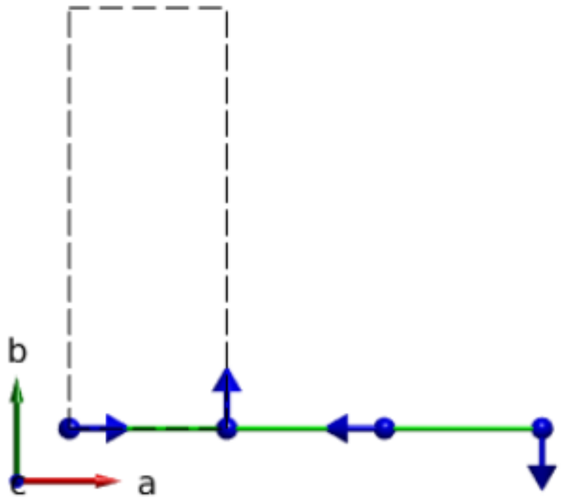
Тестирование пакета

1. Ферромагнитная спиновая цепочка со взаимодействием между ближайшими соседями:

2. Антиферромагнитная спиновая цепочка со взаимодействием между ближайшими соседями :

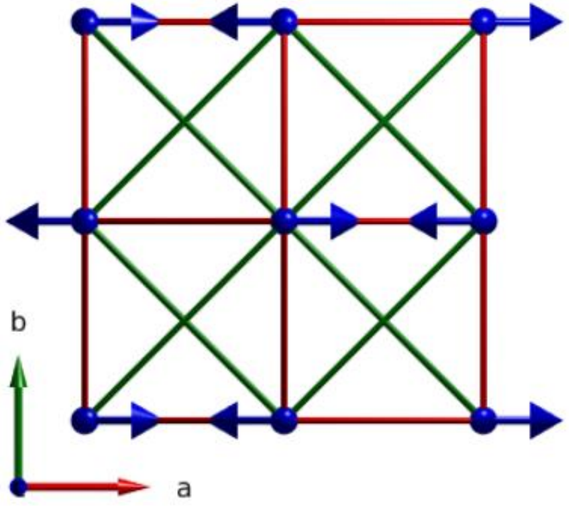


3. Фрустрированная цепочка:

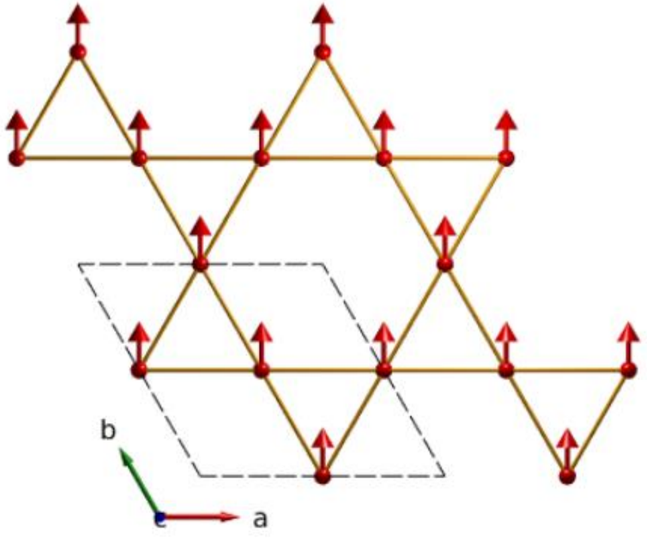


Тестирование пакета

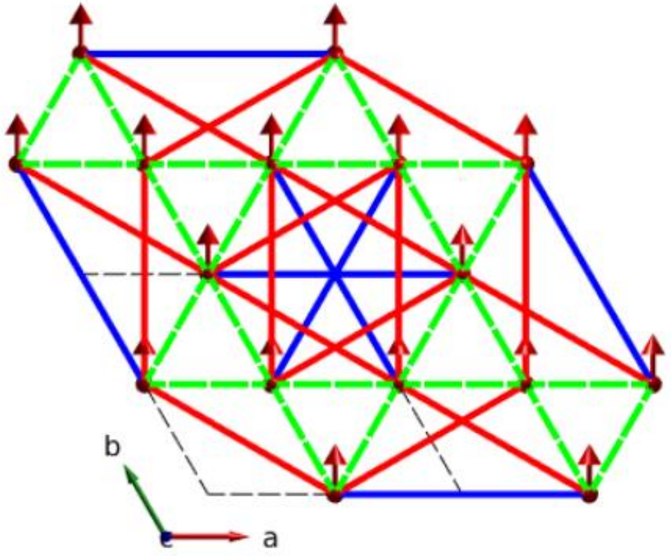
4. Антиферромагнитная квадратная решетка:



5. Ферромагнитная решетка Кагоме со взаимодействием в первой координационной сфере:

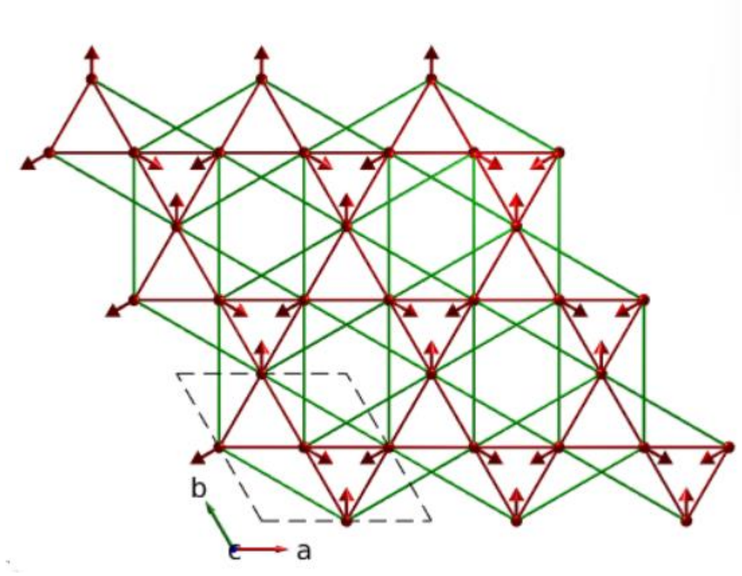


6. Ферромагнитная решетка Кагоме (со взаимодействием в первых трех координационных сферах):

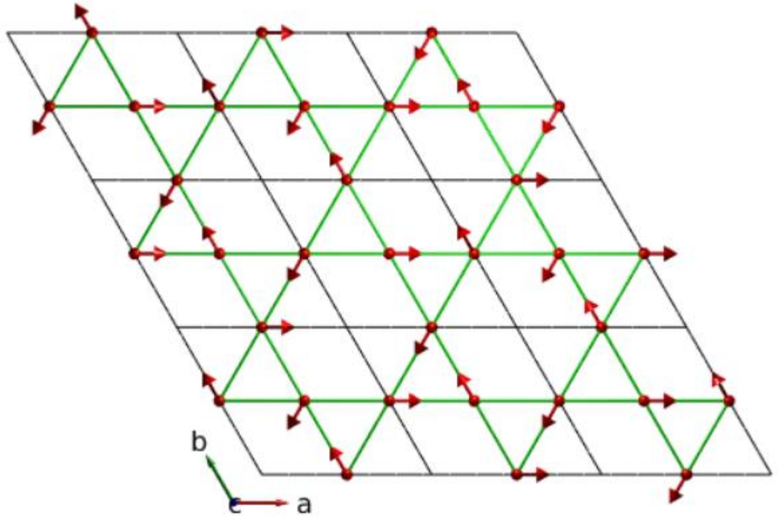


Тестирование пакета

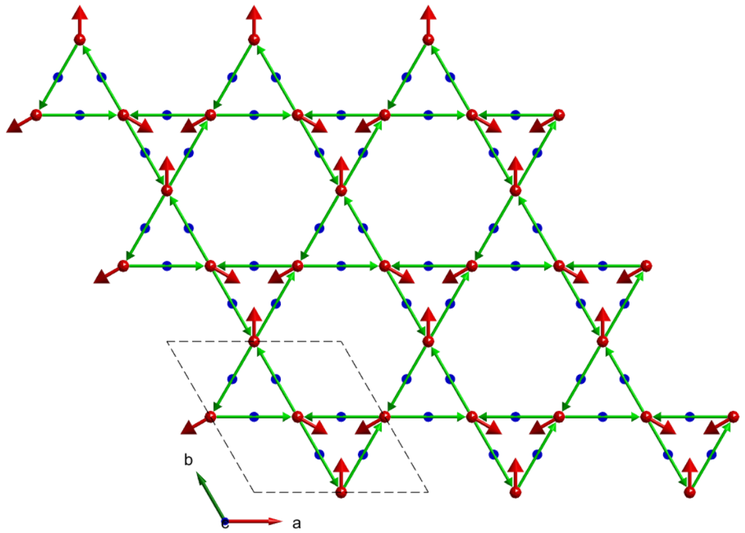
7. Антиферромагнетик типа Кагоме-1:



8. Антиферромагнетик типа Кагоме-2:

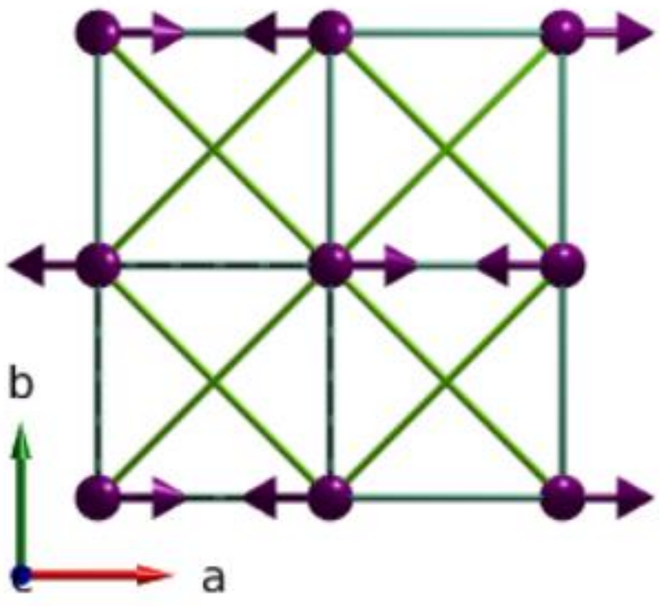


9. Антиферромагнетик Кагоме со взаимодействием Дзялошинского-Мории:

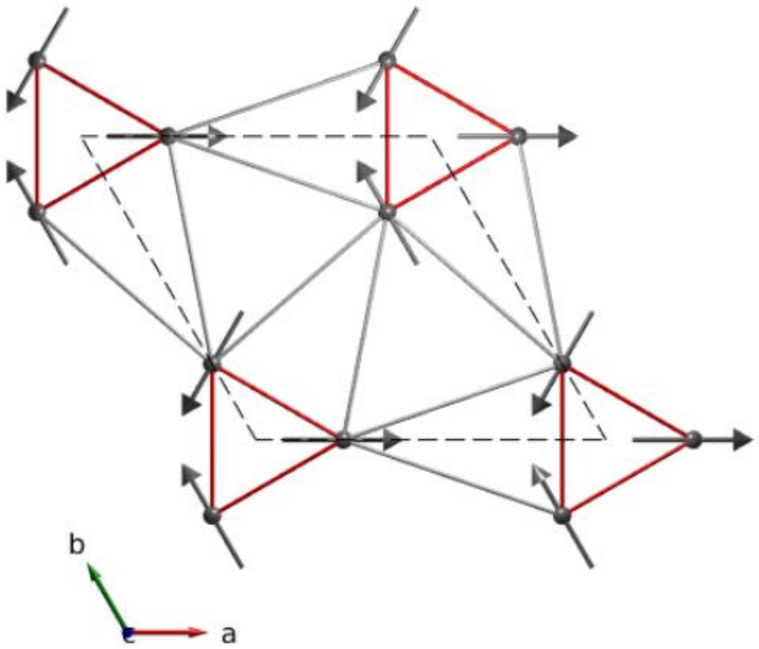


Тестирование пакета

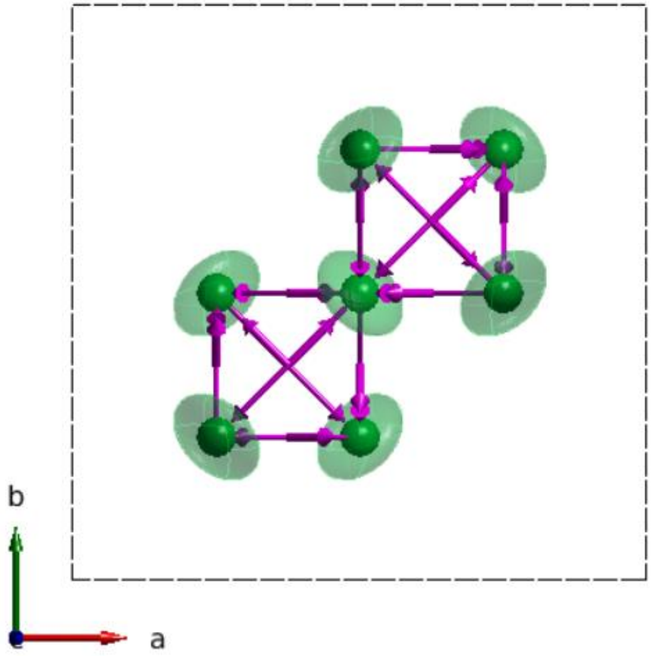
10. La_2CuO_4:



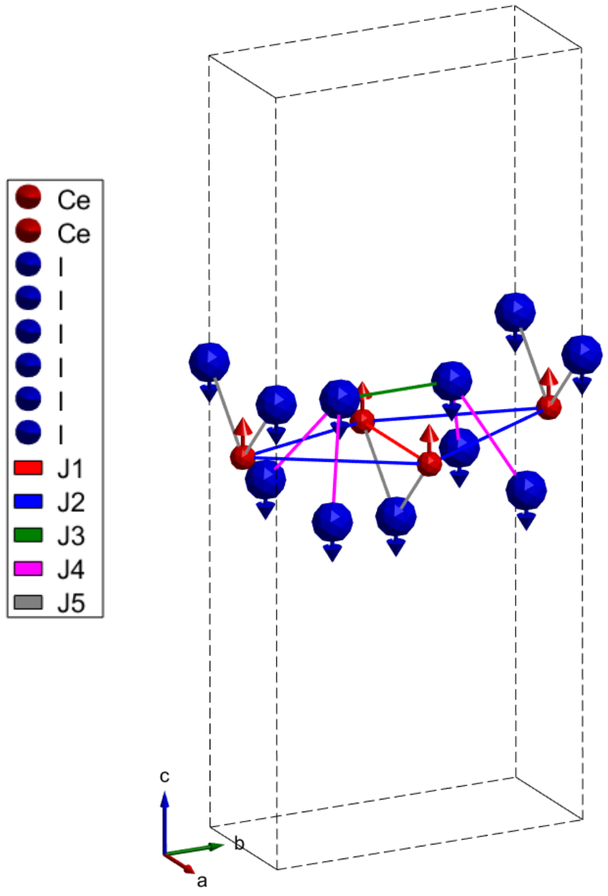
11. $Ba_3NbFe_3Si_2O_{14}$:



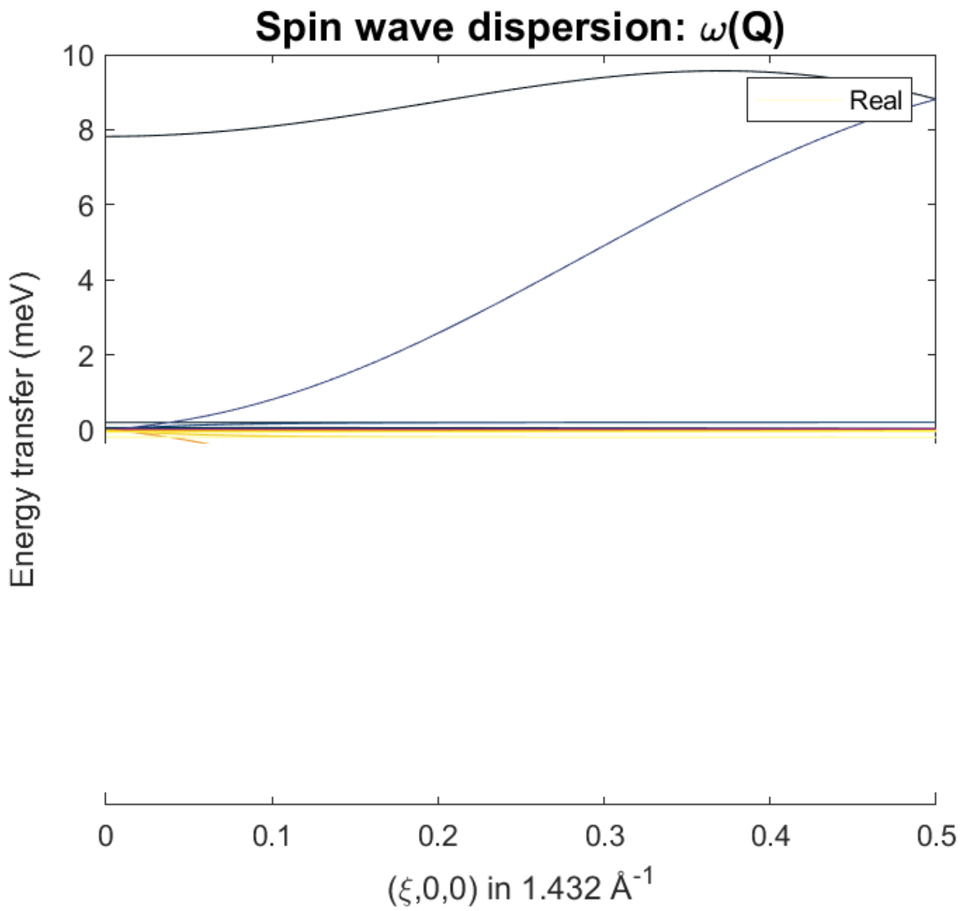
12. $Yb_2Ti_2O_7$:



Представление результатов исследования (mp-1025426):

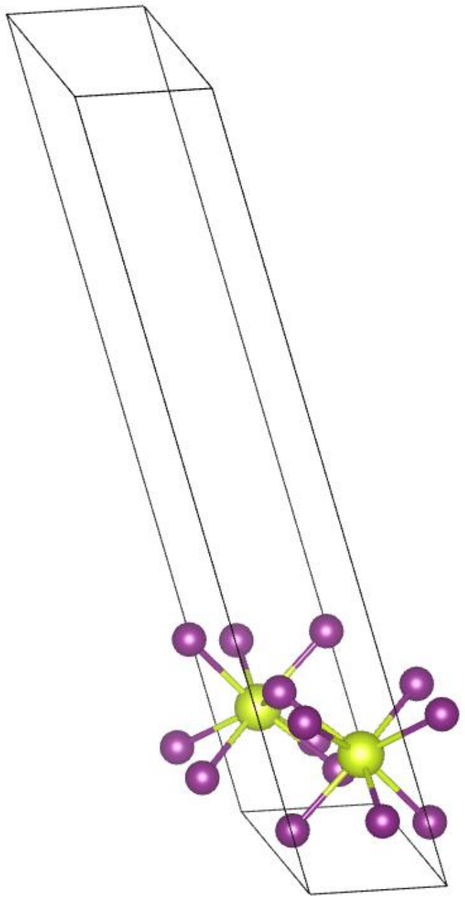


Связи между спинами в решетке



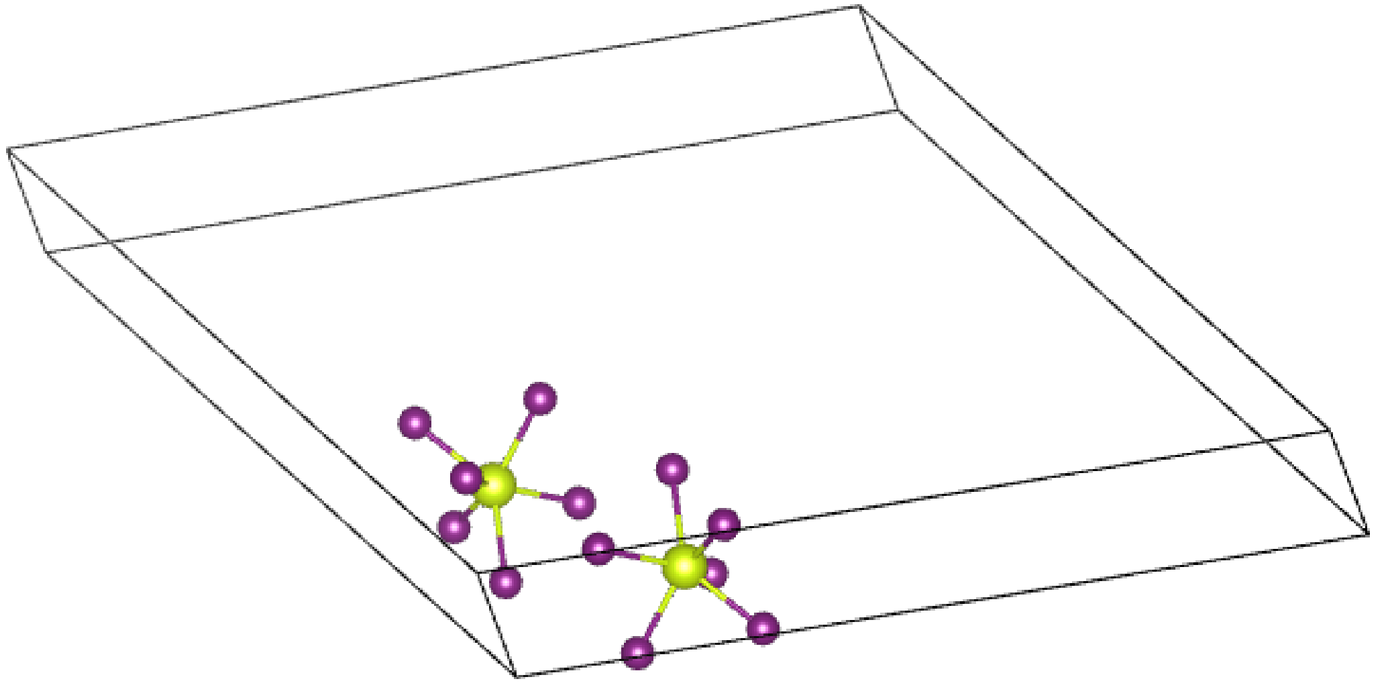
Спектр спиновых волн

Представление результатов исследования (mp-1545417):



Спектр спиновых волн

Представление результатов исследования (mp-1183849):



Спектр спиновых волн

Новизна и практическая значимость

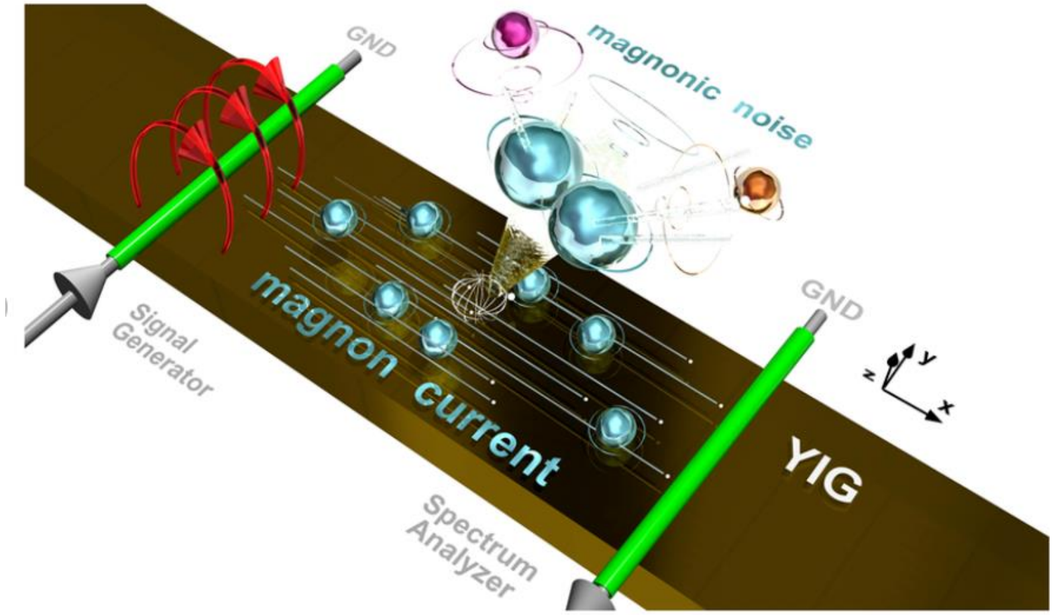
- Впервые для соединений типа CeI_3 получены магнонные спектры.
- Применение современных инструментов (VASP + SpinW) обеспечивает воспроизводимость и точность.

Возможная практическая значимость:

- Разработка прототипов магнонных логических устройств и элементов памяти.
- Снижение энергопотребления за счёт отсутствия тока.
- Возможность интеграции в квантовые вычислительные схемы.

Возможные потребители:

- Исследовательские центры
- Компании по разработке наноэлектроники
- Разработчики квантовых и спинтронных технологий



Перспективы развития:

Расширение масштабов исследования:

- Применение модели к другим 2D-магнитам (на основе редкоземельных и переходных элементов).

Экспериментальное подтверждение:

- Подготовка образцов CeI_3.
- Сравнение с экспериментами по нейтронной спектроскопии.

Разработка устройств:

- Использование расчётных параметров в моделях магнонной памяти и логики.
- Интеграция в схемы спинтронных устройств.

Развитие моделей:

- Учет анизотропии, температуры, внешних полей.
- Многоуровневое моделирование: от DFT до макроуровня (например, расчет T_c).