

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНОННЫХ СПЕКТРОВ МОНОСЛОЯ ТРИЙОДИДА ХРОМА

Кашин И. В.¹, Мазуренко В. В.¹, Кацнельсон М. И.^{1, 2}, Руденко А. Н.^{1, 2, 3}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт Молекул и Материалов, Неймеген, Нидерланды

³⁾ Школа физики и технологии, Университет Уханя, Ухань 430072, Китай

E-mail: i.v.kashin@urfu.ru

THEORETICAL INVESTIGATION OF CHROMIUM TRIIODIDE MONOLAYER MAGNON SPECTRA

Kashin I. V.¹, Mazurenko V. V.¹, Katsnelson M. I.^{1, 2}, Rudenko A. N.^{1, 2, 3}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute for Molecules and Materials, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands

³⁾ School of Physics and Technology, Wuhan University, Wuhan 430072, China

The magnetic properties of CrI₃ monolayer, considered by means of magnon spectra, are the prime focus of this work. Using first-principles calculations and microscopic model techniques, we found that ferromagnetism of the system cannot be exhaustively described only by effective nearest-neighbour (1NN) isotropic exchange interactions. Accounting for longer ranged couplings, accomplished in terms of magnetic force theorem, yields distinct peaks in the magnon spectra, which are absent in the case of 1NN model. It highlights the comprehensive theoretical investigation to be the only tool to reveal the mechanisms, lying behind the CrI₃ monolayer ferromagnetism.

Монослой трийодида хрома (CrI₃) сегодня привлекает огромное внимание исследователей в силу наличия экспериментально подтвержденного ферромагнитного порядка [1], что открывает значительные перспективы его применения в новейших устройствах спинтроники и квантовых вычислений [2].

Объяснению микроскопических механизмов, приводящих к стабильному магнитному упорядочению в рассматриваемой системе, и посвящена данная работа. В ней методами первопринципного моделирования с привлечением теоремы о локальных силах [3] были рассчитаны магнонные спектры. Данные спектры получены на основе найденных величин попарных изотропных обменных взаимодействий между атомами хрома, находящихся на первой, второй и третьей координационной сфере.

Путем сравнения с эффективной моделью, учитывающей лишь взаимодействия между ближайшими атомами хрома [4], было обнаружено, что учет более дальнедействующих связей приводит к качественному обновлению магнонных спектров. В частности, наблюдаются острые пики в соответствующих энергетических зонах, потенциально доступные для прямой экспериментальной регистрации, что доказывает принципиальную необходимость в рассмотрении более

содержательных моделей для полновесного описания ферромагнетизма моно-слоя трийодида хрома.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда №17-72-20041.

1. B. Huang et al., Nature 546, 270 (2017).
2. C. Gong and X. Zhang, Science 363, 6428 (2019).
3. A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, V. P. Antropov and V. A. Gubanov, J. Magn. Magn. Mater. 67, 65 (1987).
4. J. L. Lado and J. Fernández-Rossier, 2D Mater. 4, 035002 (2017).

РАССЕЯНИЕ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА НАНОСИСТЕМЕ С УЧЕТОМ ДЕФЕКТА

Харламова А.А.¹, Макаров Д.Н.¹

¹ Северный Арктический федеральный университет
E-mail: kharlamova.anastasya2015@yandex.ru

SCATTERING OF ULTRASHORT LASER PULSES ON THE NANOSYSTEM CONSIDERING DEFECTS

Kharlamova A.A.¹, Makarov D.N.¹

¹ Northern (Arctic) Federal University

It is shown that when an ultrashort pulse of an electromagnetic field is scattered by poly-atomic systems, their defects can be determined.

Взаимодействие ультракоротких импульсов с веществом представляет интерес не только для фундаментальных задач атомной и ядерной физики, но и для прикладных, радиобиологии, терапии раковых заболеваний, выявление дефектов биоматериала и т.д. Наличие практической возможности изучения химических и биологических процессов, а также различных процессов в наноструктурах в установках с использованием как существующих, так и перспективных рентгеновских лазеров на свободных электронах, например, Европейский рентгеновский лазер с свободными электронами (XFEL), требует развития теории взаимодействия лазерных импульсов с веществом. Данное взаимодействие дает представление о многих свойствах материала. В частности, таким способом возможно выявить дефекты различных наносистем, в том числе, например, исследовать биологические дефекты в хромосомах человека. Обычно в расчётах рассеяния ультракоротких импульсов электромагнитного поля (УКИ) на различные рода сложных системах используют аппарат, адаптированный к рассеянию непрерывного излучения, не учитывая форму УКИ и его специфику. Такой подход является приближённым и по сути основан на классической теории рассеяния