

МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Бадртдинов Д.И.^{1*}, Николаев С.А.¹, Кацнельсон М.И.^{1,2}, Мазуренко В.В.¹

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

²⁾ Университет Неймегена, г. Неймеген, Голландия

*E-mail: reason2205@yandex.ru

MAGNETIC INTERACTION IN SILICON NANOSTRUCTURES

Badrtdinov D.I.^{1*}, Николаев С.А.¹, Katsnelson M.I.^{1,2}, Mazurenko V.V.

¹⁾Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾Radboud University Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands

Within this work we show the possibility of formation non-trivial magnetic configuration in Si(111):{C,Si,Sn,Pb} $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ systems. Starting from the first principle calculations with spin-orbit coupling effect, we derive the corresponding parameters for spin and electronic models, and solve them utilizing Hartree-Fock and Monte Carlo methods. As a result, complex spin patterns, such as interpenetrating spin spirals, were shown to stabilize in the Si(111):{Sn,Pb} systems at low temperatures. Finally, at high magnetic fields, we predict the stabilization of an antiferromagnetic skyrmion lattice state.

Системы поверхностных наноструктур кремния Si(111):{C,Si,Sn,Pb} $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ демонстрируют интересные особенности, такие как изоструктурный переход металл-изолятор [1], волновое зарядовое упорядочение [2], наблюдаемые в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии. Однако, нет согласованной картины магнитного порядка. К примеру, по результатам первопринципных расчетов авторы работы [3] выделяют формирование 120°- Неелевского магнитного упорядочения в системе Si(111):Sn, тогда как в работе [4] говорится об образовании построчно-коллинеарного магнитного порядка. Следует отметить, что авторы данных работ не учитывают спин-орбитальное взаимодействие, которое должно иметь существенную роль в системах с атомами свинца и олова.

Результаты расчетов в рамках функционала электронной плотности показывают наличие хорошо отделенной энергетической зоны на уровне Ферми, описывающие p_z состояние атома. Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к заметному расщеплению данной зоны, что указывает на присутствие сильной анизотропии в системе. Соответствующие электронные и спиновые модели были построены в базисе функций Ванье. Решение электронной модели при нулевой температуре в рамках Хартри-Фока показывает, что 120°- Неелевское упорядочение энергетически более выгодным для Si(111):{C,Si,Sn} систем, тогда как для Si(111):Pb возможно формирование построчно-неколлинеарного 120° упорядочения. Решение спиновой модели при конечных температурах в рамках подхода Монте Карло показывает формирование спиновой спирали в системах

Si(111):{Sn,Pb} под воздействием внешнего магнитного поля. При высоких магнитных полях $\sim 2J_1$, где J_1 обменное взаимодействие между ближайшими атомами, возможна стабилизация антиферромагнитных скирмионных решеток (Рис.1).

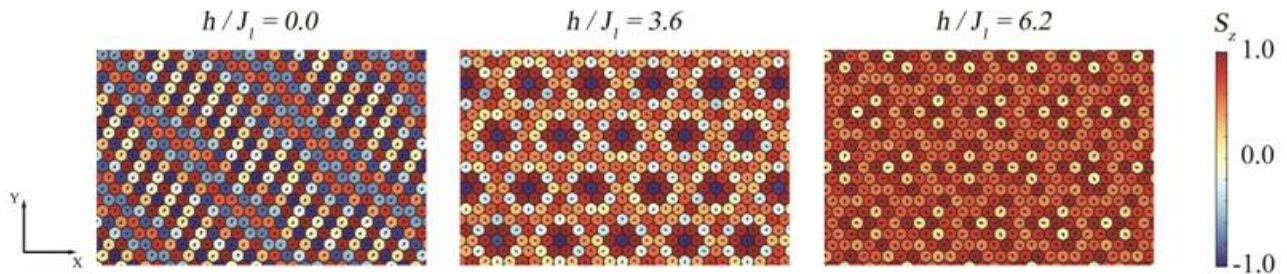


Рис. 1. Формирование спиновых спиралей и скирмионных решеток в Si(111):Pb под воздействием внешнего магнитного поля h

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации № МД-6458.2016.2.

1. S. Modesti et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 126401 (2007).
2. J. M. Carpinelli et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 2859 (1997).
3. S. Schuwalow et al., Phys. Rev. B **82**, 035116 (2010).
4. G. Li et al., Nat. Commun. **4**, 1620 (2013).