



Рис. 1. Смоделированный спектр ARPES монослоя сурьмы.

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

1. Kim S.H. et al., Sci. Rep., 6, 33193 (2016).
2. Rudenko A.N., Katsnelson M.I. and Roldán R., Phys. Rev. B, 95, 081407 (2017).

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В СОЕДИНЕНИЯХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Кашин И.В.*, Андреев С.Н., Мазуренко В.В.

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

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

PECULIARITY OF COLLECTIVE MAGNETIC EXCITATIONS MODELING IN TRANSITION METAL-BASED COMPOUNDS

Kashin I.V.*, Andreev S.N., Mazurenko V.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The question of applicability for different numerical methods to estimate the basic characteristic of the spin spirals in transition metal-based compounds is investigated. Depending on localization of the magnetic moment (bcc Fe and FeGe systems were taken as the exam-

ple), methods, which include the spatial summing, were found converging or not. It reveals the significance of delocalized magnetic moment in forming of the collective magnetic excitations in real transition metal-based materials.

На сегодняшний день материалы с топологическими магнитными возбуждениями привлекают значительное внимание исследователей, в связи с перспективами построения на их основе вычислительных устройств нового поколения [1]. Данная работа посвящена изучению вопроса о применимости различных численных методов моделирования таких возбуждений в материалах с различной степенью локализованности магнетизма.

Первопринципное моделирование магнитных возбуждений сопряжено с рядом трудностей, как на этапе построения модели, так и при ее численном решении. Особенно ярко это проявляется при рассмотрении соединений на основе переходных металлов, магнетизм в которых, в большинстве случаев, строго говоря, нельзя назвать ни локализованным, ни зонным [2].

Базовой анизотропной характеристикой таких коллективных возбуждений, как спиновые спирали, является спиновая жесткость D , определяющая зависимость энергии возбуждения от пространственной частоты закручивания спирали. В работе [3] было сформулировано два подхода для оценки D : в случае рассмотрения спирали в прямом и обратном пространствах. Первый из них (наиболее популярный среди исследователей) основан на пространственном суммировании парных обменных взаимодействий кинетической природы, величины которых хорошо поддаются оценке различными численными методами. Но он имеет существенный недостаток: при делокализованном магнетизме сложно определить оправданные границы такого суммирования [4].

Второй подход лишен этого недостатка, однако для его реализации необходим расчет частных производных пространственно и энергетически разрешенной функции Грина по векторам обратного пространства. Для этого применим метод конечных разностей и аналитический метод. Последний, опять же, представляет функцию Грина как пространственную сумму.

В данной работе, в рамках приближения локальной спиновой плотности (LSDA) в обратном пространстве, была оценена спиновая жесткость объемного кристалла железа (*bcc* Fe) и германида железа (FeGe). Первая система характеризуется более локализованным магнетизмом: кинетические вклады в обменное окружение становятся пренебрежимо малыми уже на 6-ой координационной сфере, когда как в случае FeGe это наблюдается лишь на 20-ой. Это приводит к качественно различным результатам: если для *bcc* Fe аналитический и численный подход к вычислению производной привел к схожей оценке $D_{\text{Fe}} = 292 \text{ мэВ} \cdot \text{Å}^2$, согласующейся с теоретической работой [3], то для FeGe численно сходящимся методом оказался только численный подход, $D_{\text{FeGe}} = 424 \text{ мэВ} \cdot \text{Å}^2$ (находится в хорошем согласии с другими работами [5]).

Полученный результат говорит о том, что степень локализации магнетизма играет значительную роль в формировании базовых характеристик коллективных возбуждений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16–32–00076.

1. N. Romming et al., Science, 341, 636 (2013).
2. M. I. Katsnelson et. al., Phys. Rev., B 82, 100403 (2010).
3. A. I. Lichtenstein et al., J. Phys. F: Met. Phys., 14, L125 (1984).
4. M. Pajda et. al., Phys. Rev. B, 64, 174402 (2001).
5. J. Gayles et al. Phys. Rev. Lett., 115, 036602 (2015).

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ПЕРЕДАЮЩЕГО УСТРОЙСТВА НА БАЗЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ НАНОСИСТЕМЫ Co/Cu(111)

Вялова С.А.^{*}, Кашин И.В.

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

*E-mail: VyalovaSA42@gmail.com

DESIGNING OF AN ELEMENTARY TRANSMITTER BASED ON SURFACE NANOSTRUCTURE Co/Cu(111)

Vyalova S.A.^{1*}, Kashin I.V.¹

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Co adatoms on the Cu(111) surface are known to exhibit strong ferromagnetic character of the exchange interaction, if coupled directly, and explicit antiferromagnetic one, if separated by two Cu atoms [1]. Our calculations, carried out in terms of Heisenberg model, revealed a possibility to design an elementary transmitting unit by adjusting geometry of the system. The transmittance of the unit was found stable up to ≈ 100 Å (100 bonds of FM chain) in small magnetic fields (~ 1 meV) at room temperature.

Сегодня общий курс на миниатюризацию функциональных устройств ставит перед теоретической и экспериментальной наукой актуальные задачи поиска качественно новых принципов их работы, на атомном и субатомном уровне. Стоит отметить, что важными требованиями остаются доступность исходных материалов и высокая рабочая температура. Поэтому целью данной работы служило проектирование элементарного передающего устройства («спинового провода») на основе локальных магнитных моментов атомов кобальта, адсорбированных на медную поверхность.