

ПРИМЕНЕНИЕ ФУНКЦИЙ ГРИНА С ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ МАГНИТОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ В ПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛАХ

Кашин И.В.¹

¹) Кафедра Теоретической физики и прикладной математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира 19, 620002 Екатеринбург, Россия
E-mail: i.v.kashin@urfu.ru

APPLICATION OF GREEN'S FUNCTIONS WITH SPATIAL RESOLUTION TO CALCULATE THE ENERGY OF SINGLE-ION MAGNETIC ANISOTROPY IN CONDUCTING MATERIALS

Kashin I.V.¹

¹) Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University, Mira Street 19, 620002 Ekaterinburg, Russia

An analytical derivation of expressions for the single-ion magnetic anisotropy energy has been performed. The application of the spatial resolution of electronic Green's functions allowed a stable and fast estimation of this energy for conducting systems, with atomic and orbital detail.

Эффекты пространственной анизотропии локальных магнитных моментов атомов в твёрдых телах и молекулярных кластерах [1, 2] привлекали внимание учёных с момента первых успехов в прикладной спинтронике. Действительно, сохранение определённого магнитного порядка исключительно за счёт симметричных свойств кристаллической решетки представляется крайне перспективным для кодирования информации, а также для её надёжного хранения и устойчивой к помехам обработки.

В данной работе в фокусе рассмотрения магнитокристаллическая анизотропия, возникающая вследствие спин-орбитального взаимодействия электрона на частично заполненных орбиталях. Базовый механизм формулируется достаточно чётко. Нарушение высокой симметрии кристаллического поля (чаще всего - лигандов) приводит к снижению симметрии пространственного распределения орбитального момента. Вследствие этого формулируются энергетически более выгодные направления этого момента. Спин-орбитальное взаимодействие же переносит данную анизотропию на спиновый момент, выделяя и для него выгодные пространственные направления.

Несмотря на ясность механизма, в реальных магнетиках теоретическое объяснение анизотропии спинового момента - глубоко нетривиальная задача, в силу того, что реальные орбитали в веществе порой очень далеки от

водородоподобных. Ситуация особо усугубляется, если дело касается металлических систем, в которых значительный вклад в магнетизм вносят делокализованные электроны.

Помимо прямого расчёта разницы в значениях полной энергии при разных ориентациях кристалла [3], дающего качественный ответ на вопрос о характере анизотропии, но не позволяющего проводить детальный атомный и орбитальный анализ, популярным является применение формализма электронных функций Грина [2]. Этот формализм удобен для структурной расшифровки результата, однако выражение для энергии магнитокристаллической анизотропии, выведенное на основе межузельных функций Грина, содержит внутреннюю сумму по всем атомам кристалла. Её нахождение для изоляторных систем не вызывает затруднений, однако для металлов она может сходиться очень медленно, или не сходиться вовсе.

В силу этого в настоящей работе были выведены выражения на основе функций Грина с пространственным разрешением. Они позволяют не только получать устойчивые численные значения для проводящих систем - время расчёта также сокращается в сотни раз. Более того, результат оказывается более стабильным по отношению к количеству точек сетки Монкхорста–Пака - значимость данного аспекта была показана в статье [4].

Полученная численная схема представляет собой производительный инструмент для теоретического исследования эффектов магнитокристаллической анизотропии в реальных проводящих материалах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-01003, <https://rscf.ru/project/23-72-01003/>

1. A. Schrön et al., Phys. Rev. B 86, 115134 (2012)
2. V. V. Mazurenko et al., Phys. Rev. B 89, 214422 (2014)
3. T. Liao et al., Phys. Rev. Mater. 6, 024402 (2022)
4. I. V. Solovyev et al., Phys. Rev. B 52, 13419 (1995)