Titulo: Estudio Ab Initio de las Interacciones de Intercambio en la monocapa $CrCl_3$: Mapeo Energético de Cuatro Estados mediante el Hamiltoniano Generalizado de Heisenberg.

Franklin P. Vilca S.[1], Robert M. Guzmán A.[1], Alvaro Gonzalez G.[2], Chachi Rojas A.[1]
Universidad Nacional Mayor de San Marcos[1], Universidad del Norte[2]

Resumen

El $CrCl_3$ bulk es un material aislante que presenta orden antiferromagnético interlaminar por debajo de aproximadamente 14 K [1]. Debido a las débiles interacciones de van der Waals, puede exfoliarse hasta obtener monocapas, cuyo estado fundamental ferromagnético está dominado por interacciones de intercambio entre primeros vecinos [2].

En este trabajo, se estudió una monocapa aislada de $CrCl_3$ mediante cálculos *ab initio*, empleando el método de cuatro estados y el Hamiltoniano de Heisenberg generalizado [3] para determinar el tensor de intercambio J_{ij}, incluyendo sus contribuciones anisotrópicas y antisimétricas asociadas al acoplamiento espín-órbita.

El estado fundamental ferromagnético se identificó comparando cuatro configuraciones magnéticas. Se calcularon las componentes J_{xx}, J_{yy} y J_{zz} para primeros y segundos vecinos, obteniéndose constantes isotrópicas J_1=-2.338 meV y J_2=-0.132 meV. Asimismo, las contribuciones del vector de Dzyaloshinskii–Moriya resultaron inferiores a la precisión numérica.

Los cálculos se realizaron con el *Vienna Ab Initio Simulation Package*, utilizando el funcional PBE, el método PAW y DFT+U (U_{eff}=3.84 eV). Se emplearon un *energy cutoff* de 550 eV, una malla Monkhorst–Pack de 6×4×1, convergencia energética de 1 meV/celda y fuerzas inferiores a 0.01 eV/Å. A 800 eV, la variación de las constantes de intercambio fue de 0.0539 meV/celda.

Palabras clave: *ab initio*, DFT+U, acoplamiento espín-órbita, intercambio magnético.

[1] McGuire, M. A., Clark, G., Kc, S., Chance, W. M., Jellison Jr, G. E., Cooper, V. R., ... & Sales, B. C. (2017). Magnetic behavior and spin-lattice coupling in cleavable van der Waals layered CrCl 3 crystals. Physical Review Materials, 1(1), 014001.

[2] Tran, H. B., & Matsushita, Y. I. (2024). Skyrmions in van der Waals centrosymmetric materials with Dzyaloshinskii–Moriya interactions. Scripta Materialia, 239, 115799.

[3] Šabani, D., Bacaksiz, C., & Milošević, M. V. (2020). Ab initio methodology for magnetic exchange parameters: Generic four-state energy mapping onto a Heisenberg spin Hamiltonian. Physical Review B, 102(1), 014457.

[4] Cococcioni, M., & De Gironcoli, S. (2005). Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+ U method. Physical Review B-Condensed Matter and Materials Physics, 71(3), 035105.