

Contribution ID : **248** Type : **Poster**

Estudio Ab Initio de las Interacciones de Intercambio en una Monocapa de $CrCl_3$: Mapeo Energético de Cuatro Estados mediante el Hamiltoniano Generalizado de Heisenberg

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 entre 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, método PAW y DFT+U ($U_{\text{eff}} = 3.84$ eV). Se emplearon un *energy cutoff* de 550 eV, una malla Monkhorst–Pack de $6 \times 4 \times 1$, 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.

Primary author(s) : Mr VILCA SUCASAIRE, Franklin Paúl (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Co-author(s) : Dr GUZMAN ARELLANO, Robert Mikhail (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr ROJAS AYALA, Chachi (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr GONZALEZ GARCIA, Alvaro (Universidad del Norte)

Presenter(s) : Mr VILCA SUCASAIRE, Franklin Paúl (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Session Classification : Poster Fisica del Estado Solido