



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2022-20-4-62-70>

Оригинальная статья  
Original paper

УДК 539.18

## НИЗКОРАЗМЕРНЫЙ МАГНЕТИЗМ В СОЕДИНЕНИЯХ С РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ МАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

М.С. БАРАНОВА

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
(г. Минск, Республика Беларусь)

Поступила в редакцию 16 мая 2022

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2022

**Аннотация.** В статье представлены результаты исследования условия формирования низкоразмерного магнитного порядка. Обоснован выбор кристалла ZnO в качестве полупроводниковой немагнитной матрицы для формирования квазиодномерных и квазинульмерных магнитных систем путем внедрения примесных атомов Cr, Mn, Fe, Co и Ni. Структурные параметры, электронные и магнитные свойства рассчитывались на атомном уровне в рамках квантово-механического моделирования, интегралы обменного взаимодействия – на микроскопическом уровне с использованием модели Гейзенберга. Определение механизмов обменного взаимодействия осуществлялось на основе выявленных зависимостей значений интеграла обменного взаимодействия от структурных и электронных свойств. Обобщены результаты исследования механизмов обменного взаимодействия в двумерных магнитных системах, формирующихся в материалах группы  $MAX_3$  ( $M = Cr, Fe, A = Ge, Si, X = S, Se, Te$ ). Установленные механизмы обеспечили возможность сравнения условий формирования ферромагнитного порядка в системах с различной размерностью магнитного взаимодействия, в частности показано, что ферромагнитный порядок во всех изучаемых структурах формируется за счет косвенного суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии. Установлено, что для формирования устойчивого высокотемпературного ферромагнетизма необходимо применять стратегии, направленные на усиление суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии либо уменьшение вкладов обменного взаимодействия между орбиталями одной симметрии.

**Ключевые слова:** *ab initio* моделирование, теория функционала плотности, наномангнетики, ферромагнетизм, антиферромагнетизм, переходные металлы, разбавленные магнитные полупроводники, структуры Ван-дер-Ваальса

**Благодарности.** Автор выражает благодарность канд. ф.-м. наук Данилюку А.Л. за оказанную научную консультативную помощь, канд. техн. наук Стемпицкому В.Р., под руководством которого получены основные результаты. Работа выполнялась в рамках задания 2.07 (2021–2025) ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», заданий 2.87 (2019–2020) и 2.53 (2016–2018) ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», договоров с БРФФИ Ф20В-008 (2020–2021) и Ф13А3-024 (2013–2015), а также гранта Министерства образования.

**Для цитирования.** Баранова М.С. Низкоразмерный магнетизм в соединениях с различной размерностью магнитного взаимодействия. Доклады БГУИР. 2022; 20(4): 62-70.

## LOW-DIMENSIONAL MAGNETISM IN COMPOUNDS WITH DIFFERENT DIMENSIONS OF MAGNETIC INTERACTION

MARYIA S. BARANAVA

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)*

*Submitted 16 May 2022*

© Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2020

**Abstract.** The results of a comparison of the exchange interaction mechanisms in low dimensional magnetic systems are presented. It has been shown that ZnO crystal may be used as a semiconductor non-magnetic matrix for the formation of quasi-one-dimensional and quasi-zero-dimensional magnetic systems by introducing impurity atoms of Cr, Mn, Fe, Co and Ni. Structural parameters, electronic and magnetic properties were calculated at the atomic level in the framework of quantum mechanical simulation. The exchange interaction integrals were calculated at the microscopic level using the Heisenberg model. The exchange interaction mechanisms were determined on the obtained dependences of the exchange interaction integral on the structural and electronic properties, as well as on the features of the low-dimensional magnetic systems partial density of electronic states. The results of studying the exchange interaction mechanisms in two-dimensional magnetic systems formed in materials of the MAX<sub>3</sub> (M= Cr, Fe, A = Ge, Si, X= S, Se, Te) group are summarized. The established mechanisms made it possible to compare the conditions for the formation of a ferromagnetic order in systems with different dimensions of magnetic interaction. The ferromagnetic order in all the structures under study is formed due to the indirect superexchange interaction between orbitals of different symmetry. Strategies aimed at enhancing the superexchange interactions between orbitals of different symmetry or attenuating the contributions of the exchange interaction between orbitals of the same symmetry contribute to the formation of stable high-temperature ferromagnetism.

**Keywords:** *ab initio* simulation, density functional theory, nanomagnets, ferromagnetism, antiferromagnetism, transition metals, dilute magnetic semiconductors, van der Waals structures

**Gratitude.** The author are grateful to Dr. A. Danilyuk for scientific consultations, and Dr. V. Stempitsky under whose supervision the main results were obtained. The study was carried out within the framework of the State Programs of Scientific Investigations such as task 2.07 (2021–2025) of the “Materials Science, New Materials and Technologies”, tasks 2.87 (2019-2020) and 2.53 (2016-2018) of the “Physical Materials Science, New Materials and Technologies”, contracts with the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research № F20V-008 (2020-2021) and F13AZ-024 (2013-2015), as well as a grant from the Ministry of Education.

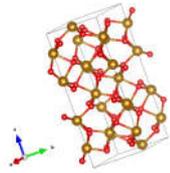
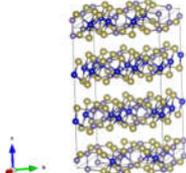
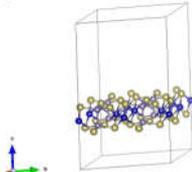
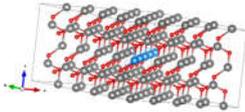
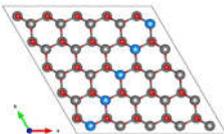
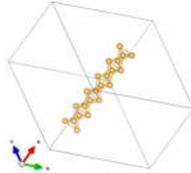
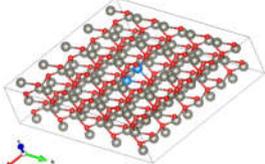
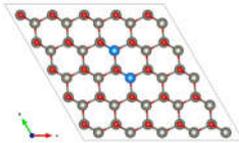
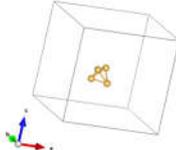
**For citation.** Baranava M.S. Low-dimensional Magnetism in Compounds with Different Dimensions of Magnetic Interaction. Doklady BGUIR. 2022; 20(4): 62-70.

### Введение

Магнитные эффекты лежат в основе принципа функционирования современных спинтронных устройств и имеют большой потенциал применения в области разработки новых электронных приборов микро- и нанoeлектроники [1]. Реализация таких устройств требует применения низкоразмерных магнитных систем, которые обладают механической гибкостью, чувствительностью к внешним воздействиям, возможностью интеграции в различные гетероструктуры на различных типах подложек, большой восприимчивостью физических свойств к структуре, внешним полям и т. д. [2]. Твердое тело можно считать низкоразмерной магнитной системой, если магнитное взаимодействие ограничено по одному или более пространственных направлений. Низкоразмерные магнитные системы, такие как димеры, цепочки и т. п., можно наблюдать в объемных немагнитных матрицах (табл. 1).

Серьезной проблемой низкоразмерного магнетизма является сохранение дальнего магнитного порядка при конечной температуре. Упорядоченное пространственное расположение магнитных моментов атомов в твердом теле возможно, когда значение магнитной энергии атомной системы превышает значение характерной энергии тепловых флуктуаций  $k_B T$  [3].

**Таблица 1.** Разновидности магнитных систем в соответствии с размерностью  
(D – размерность магнитного взаимодействия)  
**Table 1.** Types of magnetic systems in accordance with the dimension  
(D is the dimension of the magnetic interaction)

D	Геометрическая размерность твердого тела		
	Объемные кристаллы	Двумерные кристаллы	Одномерные наноструктуры
3D	<p>Объемная магнитная система</p>  <p><math>\text{Fe}_2\text{O}_3</math></p> <p>Магнитное взаимодействие по всем направлениям</p>	<p>–</p>	<p>–</p>
2D	<p>Квазидвумерная магнитная система</p>  <p><math>\text{CrGeTe}_3</math></p> <p>Магнитное взаимодействие в плоскости слоев, отсутствие магнитного взаимодействия между плоскостями</p>	<p>Двумерная магнитная система</p>  <p><math>\text{CrGeTe}_3</math></p> <p>Магнитное взаимодействие в плоскости монослоя</p>	<p>–</p>
1D	<p>Квазиодномерная магнитная система</p>  <p><math>\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}</math></p> <p>Магнитные цепочки и спиновые лестницы в немагнитной матрице</p>	<p>Квазиодномерная магнитная система</p>  <p><math>\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}</math></p> <p>Магнитные цепочки и спиновые лестницы в немагнитном монослое</p>	<p>Одномерная магнитная система</p>  <p>Au</p> <p>Магнитные шнуры</p>
0D	<p>Квазинульмерная магнитная система</p>  <p><math>\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}</math></p> <p>Магнитные димеры и магнитные атомы в немагнитной матрице</p>	<p>Квазинульмерная магнитная система</p>  <p><math>\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}</math></p> <p>Магнитные димеры и магнитные атомы в немагнитном монослое</p>	<p>Нульмерная магнитная система</p>  <p>Au</p> <p>Магнитные наночастицы</p>

Магнитная энергия твердого тела включает в себя энергетические вклады, связанные с эффектами, протекающими на различных физических уровнях. На микроскопическом уровне,

где исследуются взаимодействия между атомами, рассматривают энергетические вклады от магнитокристаллической анизотропии и обменного взаимодействия. Энергия магнитокристаллической анизотропии может быть на несколько порядков ниже энергии обменного взаимодействия, но данный энергетический вклад ответственен за формирование коллинеарного магнетизма. Энергия обменного взаимодействия способствует формированию высокоспинового состояния. Важной задачей является поиск способов повышения магнитной энергии в атомных системах, а ее решение возможно в рамках двух основных направлений исследований: управление физическими механизмами, которые вносят вклад в магнитную энергию атомной системы, например, управление энергией магнитной анизотропии с помощью варьирования составом твердого тела, изменения параметров решетки или ограничения размерности [4, 5]; второй подход – поиск новых материалов, которые изначально обладали бы высоким значением магнитной энергии.

Сильная магнитная анизотропия, наряду с обменным взаимодействием ферромагнитного типа, наблюдается в низкоразмерных магнитных системах [6]. Идеальный оксид цинка (ZnO) является немагнитным кристаллом с высокой степенью растворимости примесей переходных металлов. Примеси типа Fe, Co, Ni, Cr, Mn встраиваются в узлы кристаллической решетки, заменяя атомы Zn, что обеспечивает формирование квазиодномерных и квазинульмерных магнитных систем (димеров, цепочек) [7, 8]. Атомные системы типа  $MAX_3$  ( $M = Cr, Fe$   $A = Ge, Si$   $X = S, Se, Te$ ) проявляют сильную перпендикулярную магнитную анизотропию в объемной фазе и являются кристаллами Ван-дер-Ваальса, что позволяет получать двумерные низкоразмерные магнитные системы [9]. Однако магнитной энергии, которой обладают данные системы, недостаточно для наблюдения высокотемпературного ферромагнетизма, который позволит использовать эти материалы в устройствах спинтроники.

В статье представлены результаты исследования условий формирования магнитного порядка в низкоразмерных магнитных системах, сформированных в ZnO, а также обобщены результаты исследования доминирующих механизмов обменного взаимодействия в  $MAX_3$ . Выполнено сравнение особенностей механизмов, которые протекают в различных низкоразмерных магнитных системах и выдвинуты рекомендации, способствующие формированию устойчивого высокотемпературного ферромагнитного (ФМ) порядка.

### Методика проведения моделирования

Интеграл обменного взаимодействия ( $J$ ) и энергия магнитной анизотропии являются микроскопическими магнитными параметрами, которые характеризуют магнитные свойства атомной системы на соответствующем физическом уровне. Данные параметры могут быть рассчитаны с применением специально разработанного подхода, учитывающего размерность магнитного взаимодействия, состав и структуру атомной системы и основанного на квантово-механическом моделировании и модельном гамильтониане Гейзенберга.

Моделирование зависимостей магнитных свойств от структурных и электронных свойств на разных физических уровнях состоит из трех основных этапов.

На атомном уровне выполняется квантово-механическое моделирование в рамках теории функционала плотности (DFT) [10] с использованием программного комплекса VASP [11]. На микроскопическом уровне на основе данных квантово-механического моделирования проводятся расчеты трех параметров: интеграла обменного взаимодействия, энергии магнитокристаллической анизотропии и коэффициента спиновой поляризации. Интегралы обменного взаимодействия рассчитываются с использованием модельного гамильтониана Гейзенберга [12]. Энергия магнитокристаллической анизотропии ( $E_{MAE}$ ) для ФМ материалов рассчитывается как разница между значением полной энергии твердого тела, где все спины направлены вдоль оси легкого намагничивания, и значением полной энергии твердого тела, где все спины направлены вдоль оси трудного намагничивания. Коэффициенты спиновой поляризации оценивались исходя из плотностей электронных состояний для электронов с различными направлениями спинов вблизи уровня Ферми. На макроскопическом уровне могут быть рассчитаны такие параметры, как температура Кюри, намагниченность насыщения,

константа обменного взаимодействия и константа Блоха и пр. Для их расчета необходимо значение интеграла обменного взаимодействия. Для оценки потенциала использования представленных соединений с переходными элементами в работе рассчитана температура Кюри ( $T_c$ ) с помощью подхода, описанного в [13].

### Результаты исследования низкоразмерных магнитных систем

Для исследования низкоразмерных магнитных систем в объемной матрице диамагнитного ZnO сформированы квазиодномерные магнитные цепочки с пространственным направлением магнитного взаимодействия: в плоскости (001) – *Цепочка*||, в плоскости (110) – *Цепочка*⊥, а также квазинульмерные магнитные димеры с пространственным направлением магнитного взаимодействия: в плоскости (001) – *Димер*||; в плоскости (110) – *Димер*⊥.

Для определения механизмов обменного взаимодействия в низкоразмерных магнитных системах на основе ZnO выполнено квантово-механическое моделирование структурных параметров, в частности определены расстояния между атомами переходного элемента в пределах первой координационной сферы ( $d_{M-M}$ ), угол между переходными элементами через вершину немагнитного иона O ( $\alpha_{M-X-M}$ ) (рис. 1).

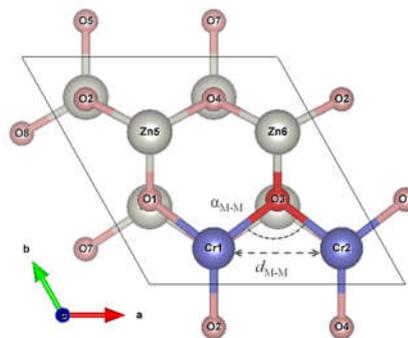


Рис. 1. Структура ZnO с примесью Cr  
Fig. 1. ZnO structure with Cr impurity

Определены значения эффективного магнитного момента ( $\mu_{eff}$ ), проведен расчет интеграла обменного взаимодействия ( $J$ ), а также для магнитных систем с ФМ порядком рассчитаны энергия магнитной анизотропии ( $E_{MAE}$ ) и температура Кюри ( $T_c$ ) с применением методики, описанной в [14] (табл. 2).

Таблица 2. Результаты квантово-механического моделирования магнитных свойств ZnO  
Table 2. Results of quantum mechanical simulation of ZnO properties

Примесь	$\mu_{eff}$ , $\mu_B$	$J$ , мэВ	$d_{M-M}$ , Å	$\alpha_{M-X-M}$ , °	Примесь	$\mu_{eff}$ , $\mu_B$	$J$ , мэВ	$d_{M-M}$ , Å	$\alpha_{M-X-M}$ , °
<i>Димер</i> ⊥					<i>Димер</i>				
Cr	3,80	-0,89	2,99	91,97	Cr	3,82	-6,75	2,85	91,26
Mn	4,52	-0,84	3,17	101,50	Mn	4,60	-4,50	3,19	100,60
Fe	3,74	-0,36	2,99	95,44	Fe	3,73	-4,73	3,06	102,65
Co	2,73	-0,27	3,14	104,71	Co	2,72	-8,98	3,08	105,00
Ni	1,75	-1,47	3,05	103,84	Ni	1,74	-19,97	2,97	101,56
<i>Цепочка</i> ⊥					<i>Цепочка</i>				
<b>Cr</b>	<b>3,77</b>	<b>6,84</b>	3,28	98,73	Cr	3,80	-5,54	3,06	96,05
Mn	4,61	-1,13	3,06	100,67	Mn	4,58	-2,52	3,04	100,04
<b>Fe</b>	<b>3,75</b>	<b>1,44</b>	3,16	98,66	Fe	3,75	-11,53	3,03	95,96
<b>Co</b>	<b>2,73</b>	<b>3,47</b>	3,14	103,41	Co	2,73	-2,01	3,03	103,94
Ni	1,76	-2,51	3,15	104,63	Ni	1,74	-23,86	3,01	103,95

Установлено, что ФМ порядком обладают *Цепочки*⊥ из магнитных ионов Cr, Fe и Co. Остальные низкоразмерные системы обладают АФМ порядком.

Согласно полученным результатам увеличение расстояния между магнитными ионами  $d_{M-M}$  приводит к росту абсолютного значения  $J$ , то есть к ослаблению антиферромагнитного (АФМ) обменного взаимодействия. Сильная зависимость от расстояния между магнитными ионами, указывает на прямое АФМ обменное взаимодействие посредством  $d$ -орбиталей ионов примеси.

Другим видом обменного взаимодействия является косвенное, которое может осуществляться через электроны проводимости или посредством гибридизации  $d$ -орбиталей переходных элементов с  $p$ -орбиталями кислорода (суперобменное взаимодействие).

Свободные атомы, которые выступают в качестве примеси, имеют следующие конфигурации внешних электронных оболочек: Cr  $[Ar] 3d^5 4s^1$ , Mn  $([Ar] 3d^5 4s^2)$ , Fe  $([Ar] 3d^6 4s^2)$ , Co  $([Ar] 3d^7 4s^2)$  и Ni  $([Ar] 3d^8 4s^2)$ . Согласно рассчитанному эффективному магнитному моменту  $\mu_{eff}$  (табл. 2) ионы переходных элементов являются двухвалентными, как и ион Zn. То есть два электрона валентной  $s$ -орбитали примеси участвуют в образовании молекулярной орбитали, а электроны на  $d$ -орбиталях формируют  $\mu_{eff}$ . Эффективный магнитный момент ионов имеет небольшое отклонение от целочисленного значения, что объясняется ковалентностью химических связей в исследуемых атомных системах. Таким образом, электроны  $d$ -орбиталей преимущественно локализованы на магнитных ионах. Следовательно, косвенный обмен через электроны проводимости не вносит существенного вклада в формирование результирующего обменного взаимодействия.

На существование суперобменного взаимодействия указывает зависимость значения интеграла обменного взаимодействия от угла  $\alpha_{M-X-M}$  между магнитными ионами: увеличение угла приводит к ослаблению АФМ. В этом случае необходимо доказать гибридизацию атомных орбиталей переходных элементов и O. Для этих целей получены парциальные плотности электронных состояний (ППЭС). На рис. 2 представлены ППЭС  $d$ -орбиталей Zn,  $p$ -орбиталей O и  $d$ -орбиталей примеси Co для Цепочки $\perp$ . Уровень Ферми соответствует нулю по оси абсцисс.

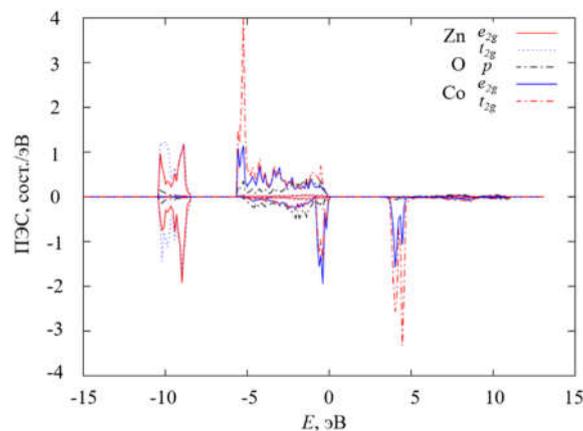


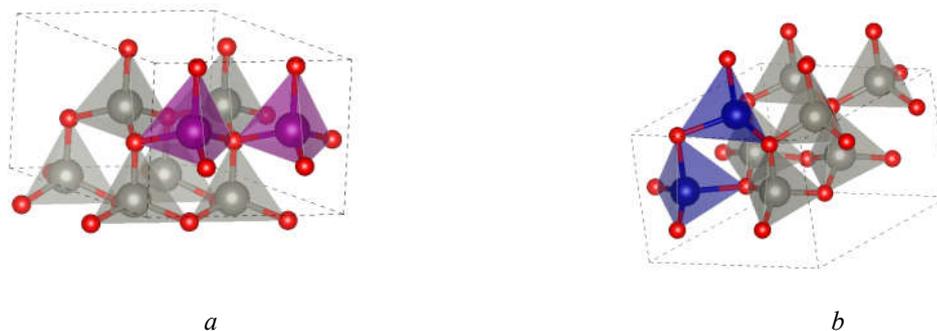
Рис. 2. Парциальные ПЭС для Цепочки $\perp$ , состоящей из атомов Co

Fig. 2. Partial DOS for Chain $\perp$  of Co atoms

Полученные ППЭС свидетельствуют о гибридизации  $d$ -орбитали примеси с  $p$ -орбиталями кислорода для энергий от  $-5$  до  $0$  эВ. Поскольку ионы примеси проявляют степень окисления, равную  $+2e$ , следовательно,  $d$ -электроны ионов не участвуют в образовании связывающей орбитали. Молекулярная связывающая орбиталь образуется за счет  $sp^3$  гибридных атомных орбиталей переходных элементов и  $p$ -орбиталей кислорода. Этот вывод справедлив для всех атомных систем, кроме тех, в состав которых входит Cr. Особенности его электронной оболочки, а именно один электрон на внешней  $s$ -орбитали, приводят к задействованию одного электрона с  $d$ -орбитали для формирования молекулярной связывающей орбитали. Этот факт подтверждается рассчитанными значениями магнитного момента (табл. 2): для атомных систем с Cr значение  $\mu_{eff}$  составляет от  $3,77 \mu_B$  до  $3,80 \mu_B$  при электронной конфигурации невозбужденного атома  $[Ar] 3d^5 4s^1$ .

Кристаллическая структура кристалла ZnO с низкоразмерными магнитными системами характеризуется тетраэдрическими комплексами, состоящими из центрального элемента – иона

переходного металла ( $\text{Cr}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ) и лигандов O. Если низкоразмерная магнитная система расположена в плоскости (001), как на рис. 3, *a*, то тетраэдрические комплексы будут иметь одинаковую ориентацию в декартовой системе координат, следовательно, орбитали одной симметрии соседних магнитных ионов будут расположены вдоль одного направления. Если низкоразмерная магнитная система расположена в плоскости (110), как на рис. 3, *b*, то пространственное расположение тетраэдрических комплексов приводит к взаимодействию между собой орбиталей различной симметрии. В конечном итоге структурные различия определяют доминирующий механизм обменного взаимодействия, т. е. объясняют тот факт, что ФМ порядок, наблюдается только в Цепочках $\perp$  из ионов Co, Cr и Fe, остальные объекты изучения являются антиферромагнетиками.



**Рис. 3.** Пространственное расположение тетраэдрических комплексов в низкоразмерных магнитных системах: *a* – Цепочка $\parallel$  и Димер $\parallel$ ; *b* – Цепочка $\perp$  и Димер $\perp$

**Fig. 3.** Spatial arrangement of tetrahedral complexes in low-dimensional magnetic systems: *a* – Chain $\parallel$  and Dimer $\parallel$ ; *b* – Chain $\perp$  and Dimer $\perp$

Таким образом, благодаря установленной гибридизации *d*-орбиталей переходных элементов и *p*-орбиталей кислорода O косвенное суперобменное взаимодействие осуществляется между:

1) частично заполненными орбиталями одной симметрии, что приводит к усилению АФМ порядка. Данный механизм является доминирующим в Цепочках $\parallel$  и Димерах $\parallel$ , так как их пространственное расположение способствует взаимодействию орбиталей одной симметрии. Также данный механизм объясняет сильный АФМ порядок в низкоразмерных магнитных системах с Ni;

2) частично заполненными (пустыми для низкоразмерных магнитных систем с Cr) и полностью заполненными (частично заполненными для низкоразмерных магнитных систем с Cr) *d*-орбиталями разной симметрии ( $J_{pe}$ ). Данный механизм является доминирующим в низкоразмерных магнитных системах Цепочках $\perp$  и Димерах $\perp$  с Cr, Fe и Co, что обусловлено пространственным расположением, которое способствует лучшему взаимодействию между орбиталями разной симметрии, а также строением внешней электронной оболочки переходных ионов, которое приводит к параллельному расположению результирующих спинов.

Рассчитанный интеграл обменного взаимодействия (табл. 2) будет состоять из вкладов, характеризующих каждый установленный механизм:

$$J = -J_{ee} - J_{pd} + J_{pe} + J_{RKKI}, \quad (1)$$

где  $J_{ee}$  – вклад прямого АФМ обменного взаимодействия,  $J_{pd}$  – вклад АФМ суперобменного взаимодействия между электронами, расположенными на орбиталях одной симметрии,  $J_{pe}$  – вклад АФМ суперобменного взаимодействия между электронами, расположенными на орбиталях разной симметрии,  $J_{RKKI}$  – вклад косвенного ФМ обменного взаимодействия через электроны проводимости.

В Цепочке $\perp$  из ионов Co  $E_{MAE} = 3,47$  мэВ, что является наибольшим значением для всех изучаемых объектов. Ось легкого намагничивания направлена вдоль низкоразмерной магнитной структуры (вдоль кристаллографического направления [001]). В Цепочках $\perp$  из ионов Cr и Fe  $E_{MAE}$  составляет 0,29 и 0,02 мэВ соответственно, то есть коллинеарный магнетизм неустойчив. Цепочка $\perp$  из ионов Cr имеет  $T_c = 287,56$  К, что является самым высоким значением, поскольку для Цепочек $\perp$  из Fe и Co полученные значения составляют 59,84 и 86,57 К соответственно. Все остальные структуры

обладают АФМ порядком. Таким образом, для формирования устойчивого высокотемпературного ФМ и повышения температуры Кюри необходимо увеличить вклад  $J_{pe}$  с использованием стратегий, направленных на увеличение вероятности косвенного суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии. Одной из них является одноосная деформация вдоль оси  $c$ . С другой стороны, возможно уменьшить вклады  $J_{ee}$  и  $J_{pd}$  с использованием воздействий, направленных на ослабление гибридизации с  $p$ -орбиталями кислорода O, или уменьшение расстояния между магнитными ионами, например, с помощью деформации сжатия вдоль осей  $a$  или  $b$ .

Ранее получено, что обменное взаимодействие в двумерных магнитных системах  $MAX_3$  ( $M=Cr$ ,  $A=Ge, Si$ ,  $X=S, Se, Te$ ) осуществляется по механизмам прямого и косвенного обменов [15]. Результаты моделирования подтверждают перспективность использования материалов типа  $MAX_3$  в спинтронных приложениях: ось легкого намагничивания лежит перпендикулярно плоскости квазидвумерных слоев, коэффициенты спиновой поляризации для некоторых соединений ( $CrSiSe_3$  и  $CrSiTe_3$ ) обладают высоким значением. Однако температура Кюри  $T_c$  для соединений с ФМ порядком ( $CrGeSe_3$ ,  $CrGeTe_3$ ,  $CrSiSe_3$  и  $CrSiTe_3$ ) находится в диапазоне от 59,22 до 180,50 К. Установлено, что суперобменное взаимодействие ( $J_{te}$ ), которое осуществляется за счет перескоков электронов между молекулярной орбиталью  $\sigma$ ,  $p$ -орбиталями промежуточного халькогена и  $t_{2g}$  атомными орбиталями второго Cr, является ФМ. АФМ прямое обменное взаимодействие ( $J_{kin}$ ) осуществляется между  $d$ -орбиталями одной симметрии ( $t_{2g}$ ) соседних ионов Cr. АФМ суперобменное взаимодействие ( $J_{tt}$ ) осуществляется между  $d$ -орбиталями, имеющими одинаковую симметрию.

Суммарный интеграл обменного взаимодействия выражается следующим образом:

$$J = -J_{tt} - J_{kin} + J_{pe}. \quad (2)$$

Сравнение выражений (1) и (2) для результирующих интегралов обменного взаимодействия позволяет сделать следующие выводы:

– АФМ обменное взаимодействие во всех исследуемых магнитных системах осуществляется по прямому и суперобменному механизмам между  $d$ -орбиталями одной симметрии;

– ФМ взаимодействие осуществляется между орбиталями разной симметрии посредством  $p$ -орбитали халькогена (Te, S, Se) в  $MAX_3$  и  $p$ -орбитали O в низкоразмерных магнитных системах, сформированных в ZnO.

## Заключение

Результаты исследований структурных, электронных и магнитных свойств квазиодномерных и квазинульмерных магнитных систем – цепочек и димеров соответственно, сформированных в ZnO посредством включения примеси переходных металлов, позволяют определить тип и механизмы обменного взаимодействия в рассматриваемых системах. Сравнение полученных ранее результатов для двумерных магнитных систем на основе халькогенидов переходных металлов  $MAX_3$  и результатов, полученных для ZnO, позволяет сделать вывод об условиях, необходимых для формирования устойчивого ФМ порядка и повышения температуры Кюри, которые обеспечиваются за счет применения стратегий, направленных на увеличение вероятности суперобменного взаимодействия между орбиталями разной симметрии и/или уменьшение вкладов прямого обменного взаимодействия.

## Список литературы / References

1. Cortie D.L., Causer G.L., Rule K.C., Fritzsche H., Kreuzpaintner W., Klose F. Two-dimensional magnets: forgotten history and recent progress towards spintronic applications. *Advanced Functional Materials*, 2020;30(18):1901414.
2. Sierra J.F., Fabian J., Kawakami R.K., Roche S., Valenzuela S.O. Van der Waals heterostructures for spintronics and opto-spintronics. *Nature Nanotechnology*. 2021;16(8):856-868.
3. Coey John MD. *Magnetism and magnetic materials*. Cambridge university press; 2010.
4. Xiao R., Kuz'min M.D., Koepernik K., Richter M. CoIr-carbon complexes with magnetic anisotropies larger than 0.2 eV: A density-functional-theory prediction. *Applied Physics Letters*. 2010;97(23):232501.

5. Sun Y., Xiao R.C., Lin G.T., Zhang R.R., Ling L.S., Ma Z.W., Luo X., Lu W.J., Sun Y.P., Sheng Z.G. Effects of hydrostatic pressure on spin-lattice coupling in two-dimensional ferromagnetic  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ . *Applied Physics Letters*. 2018;112(7):072409.
6. Lee J.U., Lee S., Ryoo J.H., Kang S., Kim T.Y., Kim P., Park C.H., Park J.G., Cheong H. Ising-type magnetic ordering in atomically thin  $\text{FePS}_3$ . *Nano letters*. 2016;16(12):7433-7438.
7. Armah, E. N. A. A., Egblewogbe, M., Koffi, H. A., Yankson, A. A., Ampong, F. K., Boakye, F., Ametefee Amuzu J. K., Nkum, R. K. Solubility of Mn in ZnO crystallites synthesized using solid state techniques. *Advanced Nano Researc*. 2020;3(1):28-39.
8. Borysiewicz M.A. ZnO as a functional material, a review. *Crystals*. 2019;9(10):505.
9. Huang B., Clark G., Navarro-Moratalla E., Klein D.R., Cheng R., Seyler K.L., Zhong D., Schmidgall E., McGuire M., Cobden D., Yao W., Xiao D., Pablo Jarillo-Herrero P., Xu X. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*. 2017;546(7657):270-273.
10. Engel E., Dreizler R.M. Density functional theory. *Theoretical and mathematical physics*. 2011:351-399.
11. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical review B*. 1996;54(16):11169.
12. Mermin N.D., Wagner H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*. 1966;17(22):1133.
13. Rassekh M., He J., Shayesteh S.F., Palacios J.J. Remarkably enhanced Curie temperature in monolayer  $\text{CrI}_3$  by hydrogen and oxygen adsorption: A first-principles calculations. *Computational Materials Science*. 2020;183:109820.
14. Baranova M.S., Danilyuk A.L., Stempitsky V.R. Direct exchange interaction of cobalt chains in zinc oxide: model approach. *Materials Physics & Mechanics*. 2018;39(1):15-20.
15. Baranova M.S. Influence of exchange-correlation functional on the structural and electronic properties of periodic structures with transition metal atoms. *Doklady BGUIR = Doklady BGUIR*. 2021;19(8):87-91.

#### Сведения об авторах.

Баранова М.С., научный сотрудник НИЛ 4.4 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

#### Information about the authors

Baranova M.S., Researcher at R&D Lab 4.4 of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

#### Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,  
г. Минск, ул. П. Бровки, д. 6,  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники;  
тел. +375 17 293 84 09;  
e-mail: baranova@bsuir.by  
Баранова Мария Сергеевна

#### Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,  
Minsk, P. Brovka St., 6,  
Belarusian State University  
of Informatics and Radioelectronics;  
tel. +375 17 293 84 09;  
e-mail: baranova@bsuir.by  
Baranova Maryia Sergeevna