

LongXun Module

**magnetic exchange
parameters**

本篇利用四态法，即构建四种磁性结构来求得对应的磁耦合系数。

详细论证可以参考DOI: 10.1103/PhysRevB.84.224429

在体系中，如果不考虑磁晶各向异性，系统的哈密顿量可以表示为

$$E_{\text{spin}} = J_{12} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{K}_1 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{K}_2 + E_{\text{other}}$$

其中

$$\mathbf{K}_1 = \sum_{i \neq 1,2} J_{1i} \mathbf{S}_i; \quad \mathbf{K}_2 = \sum_{i \neq 1,2} J_{2i} \mathbf{S}_i; \quad E_{\text{other}} = \sum_{i \neq 1,2} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

四态法的构造：

1. 构建超胞：构建足够大的超胞使得选取的两个格点与其他周期的格点之间没有相互作用。

2. 构建四种不同的磁性态（在atom.config中设置不同的magnetic_xyz）

(1) $S^z_1 = S, S^z_2 = S;$

(2) $S^z_1 = S, S^z_2 = -S;$

(3) $S^z_1 = -S, S^z_2 = S;$

(4) $S^z_1 = -S, S^z_2 = -S;$

上述情况是用于计算 J_{12}^{zz} ，选取的两个原子的磁矩的方向均固定在z方向。若想求得其他方向的分量，如 J_{12}^{xz} ，则可以将 $S^x_1(2) = \pm S$ ，并将 $S^z_1(2) = 0$ ，其他原子磁矩垂直于这两个原子磁矩的方向，以此类推。

在PWmat计算结束后，为了得到磁性耦合系数，可以在输出文件REPORT内寻得之前构建的四个态的能量，根据之前的公式 它们的表达式为

$$E_1 = E_0 + E_{\text{other}} + J_{12} S^2 + K_1 S + K_2 S$$

$$E_2 = E_0 + E_{\text{other}} - J_{12} S^2 + K_1 S - K_2 S$$

$$E_3 = E_0 + E_{\text{other}} - J_{12} S^2 - K_1 S + K_2 S$$

$$E_4 = E_0 + E_{\text{other}} + J_{12} S^2 - K_1 S - K_2 S$$

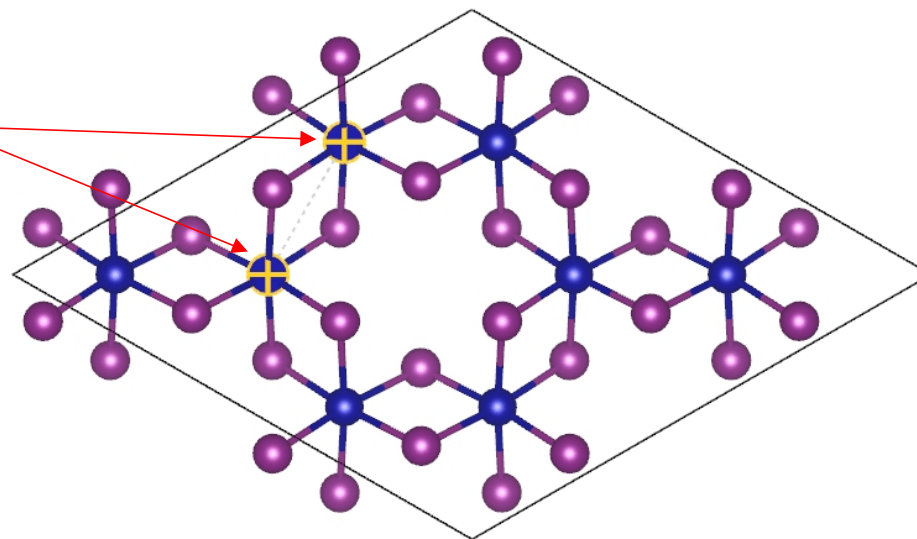
将上述四个能量进行组合，则可得到

$$J_{12} = \frac{E_1 + E_4 - E_2 - E_3}{4S^2}$$

接下来我将以二维的CrI3为例，来说明如何得到磁耦合系数 J_{12}^{xz}

首先构建超胞，并找到想要计算磁耦合系数的两个原子的位置

```
32
LATTICE
 14.01502991    0.00000000    0.00000000
 -7.00751657   12.13737100    0.00000000
  0.00000000    0.00000000   15.00000000
POSITION
24  0.11114254    0.38885756    0.47542744  1  1  1
24  0.11114253    0.88885756    0.47542744  1  1  1
24  0.61114254    0.38885756    0.47542744  1  1  1
24  0.61114253    0.88885756    0.47542744  1  1  1
24  0.27786534    0.22213478    0.47542744  1  1  1
24  0.27786533    0.72213474    0.47542744  1  1  1
24  0.77786534    0.22213478    0.47542744  1  1  1
24  0.77786531    0.72213474    0.47542744  1  1  1
53  0.26828822    0.37911709    0.36666075  1  1  1
53  0.26828824    0.87911713    0.36666075  1  1  1
53  0.76828823    0.37911709    0.36666075  1  1  1
53  0.76828828    0.87911713    0.36666075  1  1  1
53  0.12088296    0.23171183    0.58419412  1  1  1
53  0.12088297    0.73171189    0.58419412  1  1  1
53  0.62088291    0.23171183    0.58419412  1  1  1
53  0.62088293    0.73171189    0.58419412  1  1  1
53  0.44445195    0.23178854    0.36668374  1  1  1
53  0.44445196    0.73178850    0.36668374  1  1  1
53  0.94445192    0.23178854    0.36668374  1  1  1
53  0.94445189    0.73178850    0.36668374  1  1  1
53  0.26821152    0.05554811    0.58417117  1  1  1
53  0.26821153    0.55554812    0.58417117  1  1  1
53  0.76821148    0.05554811    0.58417117  1  1  1
53  0.76821151    0.55554812    0.58417117  1  1  1
53  0.44451030    0.37905109    0.58422012  1  1  1
53  0.44451031    0.87905113    0.58422012  1  1  1
53  0.94451027    0.37905109    0.58422012  1  1  1
53  0.94451031    0.87905113    0.58422012  1  1  1
53  0.12094896    0.05548977    0.36663478  1  1  1
53  0.12094897    0.55548978    0.36663478  1  1  1
53  0.62094899    0.05548977    0.36663478  1  1  1
53  0.62094898    0.55548978    0.36663478  1  1  1
```



然后建立四个计算目录，用于计算不同的磁性态

在atom.config中设置初始磁矩

```
magnetic_xyz
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 3.0 0.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 0.0 3.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
```

state1

```
magnetic_xyz
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 -3.0 0.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 0.0 3.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
```

state2

```
magnetic_xyz
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 3.0 0.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 0.0 -3.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
```

state3

```
magnetic_xyz
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 -3.0 0.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 0.0 -3.0
24 0.0 3.0 0.0
24 0.0 3.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
53 0.0 0.0 0.0
```

state4

接着准备好配套的赝势文件以及输入文件分别进行Pwmat的job=scf计算，值得注意的是，这里需要固定磁矩方向以及增加能量收敛的精度。

etot.input.scf

```
1 4
IN.ATOM = atom.config
JOB = scf
IN.PSP1 = Cr.SG15.PBE.SOC.UPF
IN.PSP2 = I.SG15.PBE.SOC.UPF
Ecut = 50.00
spin = 222
MP_N123 = 3 3 1 0 0 0 2
LDAU_PSP1 = 2 4.0
LDAU_PSP2 = -1 0.0
SPIN222_MAGDIR_STEPFIX = 1
E_ERROR = 1.E-5
RHO_ERROR = 1.E-6
```

计算结束后，在REPORT文件中寻找总能，并将其记录下来。

REPORT

```
ending_scf_reason = tol Etot_err 1.0000000000000000E-005
Ewald             = 0.25417559553311E+05
Alpha             = 0.97149636502927E+03
E_extV           = 0.0000000000000000E+00    0.0000E+00
E_NSC            = -.29883863350628E+05    0.4715E-01
E[-rho*V_Hxc]   = -.18403275536010E+06    -.4688E-01
E_Hxc            = 0.88984666203917E+05    0.4661E-01
-TS              = -.18580860085837E-03    -.3135E-06
E_tot(eV)       = -.98531101640188E+05    0.8121E-05
E_tot(Ryd)      = -.72419024571383E+04    0.2984E-06
```

可知 $E_1 = -.98531101640188E+05$; $E_2 = -.98531099722000E+05$; $E_3 = -.98531098019394E+05$;
 $E_4 = -.98531091901219E+05$

由此可得 $J_{12}^{\text{zz}} = (E_1 - E_2 - E_3 + E_4) / (4 * (3/2) ** 2) = 0.47 \text{mev}$