

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

26 stycznia 2022 r., o godz.10:00

odbędzie się seminarium **on-line (link podany jest na stronie IF PAN)**,
na którym

dr Dariusz Sztenkiel

(Instytut Fizyki PAN, Warszawa, Polska)

wyłosi referat na temat:

“Symulacje namagnesowania małych klastrów Mn^{3+} w GaN za pomocą metody pola krystalicznego”

Jednym ze standardowych podejść obliczania namagnesowania w funkcji temperatury i pola magnetycznego materiałów paramagnetycznych jest metoda pola krystalicznego. Stosowana jest ona zwykle w przybliżeniu jednojonowym. Na seminarium pokażę wyniki w których dokonaliśmy rozszerzenia niniejszej metody i zastosowaliśmy ją do magnetycznych klastrów zawierających do czterech jonów Mn sprzężonych przez oddziaływanie ferromagnetycznej nadwymiany $-JS_iS_j$. W obliczeniach uwzględniliśmy odpowiednie anizotropie pochodzące z efektu Jahn-Teller'a, deformacji trygonalnej i kubicznej kryształu wurcytu. W metodzie pola krystalicznego stan jonu Mn^{3+} w GaN (konfiguracja d^4 , $S=2$, $L=2$) jest określony przez orbitalne i spinowe liczby kwantowe $|m_S, m_L\rangle$. W przypadku klastrów złożonych z N jonów Mn^{3+} , struktura energetyczna jest uzyskana przez numeryczną diagonalizację macierzy Hamiltonianu o rozmiarze $25^N \times 25^N$. Rezultaty obliczeń zostały porównane z wynikami eksperymentalnymi dla materiału $Ga_{1-x}Mn_xN$, co pozwoliło na uzyskanie dolnego limitu dla wartości oddziaływania między najbliższymi sąsiadami Mn^{3+} w GaN [1]. W drugiej części seminarium pokazane zostanie porównanie wyników metody pola krystalicznego (podejście kwantowe) z rezultatami klasycznymi otrzymanymi za pomocą równania Landau-Lifshitz-Gilbert'a (LLG) [2,3].

[1] D. Sztenkiel, K. Gas, J. Z. Domagala, D. Hommel, M. Sawicki, *Crystal field model simulations of magnetic response of pairs, triplets and quartets of Mn^{3+} ions in GaN*, *New J. Phys.* 22 123016 (2020)

[2] R. F. L. Evans et al., *Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials* *J. Phys.: Condens. Matter* 26 103202 (2014).

[3] Y. K. Edathumkandy and D. Sztenkiel, *Comparative study of magnetic properties of Mn^{3+} magnetic clusters in GaN using classical and quantum simulations*, *arXiv:2108.01474*

The work is supported by the National Science Centre, Poland, through projects DEC-2018/31/B/ST3/03438 and by the Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling at the University of Warsaw through the access to the computing facilities.

Serdecznie zapraszamy

**Roman Puźniak
Andrzej Szewczyk
Henryk Szymczak**