

ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТА ОБРАТНОЙ МАГНИТОСТРИКЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК/СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК С ПОМОЩЬЮ РАСЧЕТОВ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

© 2023 г. И. И. Гумарова^{1,2,*}, К. В. Евсеев¹, А. А. Камашев¹, Р. Ф. Мамин¹

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН, Казань, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*E-mail: iipiyanzina@kpfu.ru

Поступила в редакцию 09.01.2023 г.

После доработки 24.01.2023 г.

Принята к публикации 24.01.2023 г.

Исследованы гетероструктуры Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃, Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃, в которых проявляется магнитоэлектрический эффект. Показано, что с помощью внешнего электрического поля можно управлять магнитными свойствами тонких ферромагнитных пленок. При использовании методов расчетов из первых принципов исследованы структурные, электронные и магнитные свойства гетероструктур. Показано, что с помощью обратного пьезоэффекта можно уменьшить абсолютное значение вектора намагниченности ферромагнетика. Такой подход может стать основой для управления свойствами одного из ферромагнитных слоев сверхпроводящего спинового клапана и, как следствие, сверхпроводящими свойствами клапана.

DOI: 10.31857/S0023476123600544, EDN: DNYSRJ

ВВЕДЕНИЕ

Недавно для устройств нового поколения была разработана так называемая гибкая электроника [1–4] с уникальными характеристиками износостойкости и малой массой. Особый интерес вызывает многомодовая перестраиваемая гибкая спинтроника, основанная на гетероструктурах ферромагнетик/сегнетоэлектрический оксид, обладающих более высокой скоростью, меньшими размерами и более эффективной энергией, чем их традиционные аналоги, управляемые током [5, 6]. В [7] было показано, что сверхгибкие мультиферроидные гетероструктуры на основе железа (Fe)/BaTiO₃ (ВТО) демонстрируют идеальную кристалличность и гетероэпитаксиальный рост. В плане производительности они имеют хорошие мультиферроидные свойства и отличную перестраиваемость на изгиб, а также проявляют эффект магнитоэлектрической связи. Сопряженные магнитное и электрическое поля могут быть использованы для управления соответствующим параметром порядка с перекрестной связью. Например, переключение ферромагнитного порядка электрическим полем позволит значительно влиять на разработку устройств следующего поколения [8]. Такими устройствами могут стать

сверхпроводящие спиновые клапаны [9]. Они интересны тем, что возникает возможность контроля с их помощью сверхпроводящего тока. Если разработать методику переключения электрическим полем ферромагнитного слоя, входящего в состав такого устройства, то появится возможность управления сверхпроводящим спиновым клапаном при помощи электрического поля. Также магнитные туннельные переходы вызывают большой интерес экспериментального и теоретического сообщества из-за многообещающих приложений в магнитных запоминающих устройствах с произвольной выборкой.

Переключение направления вектора намагниченности за счет приложения электрического поля возможно в гетероструктуре, когда тонкая ферромагнитная пленка нанесена на пьезоэлектрическую подложку. При приложении электрического поля к пьезоэлектрику в нем возникает деформация за счет обратного пьезоэффекта, и аналогичная деформация возникнет в ферромагнитной пленке за счет эффекта близости. А вследствие обратной магнитострикции в ферромагнетике появляется эффективное магнитное поле, которое может повернуть вектор намагниченности. Таким образом, можно управлять

свойствами одного из ферромагнитных слоев сверхпроводящего спинового клапана и, вследствие этого, сверхпроводящими свойствами всего клапана. Л.А. Шувалов заложил основы понимания процессов переключения в сегнетоэлектрических кристаллах [10, 11], а любые процессы переключения схожи. Прежде всего пьезоэлектрическими свойствами обладают сегнетоэлектрические кристаллы, поэтому изучение интересующих явлений, связанных с пьезоэффектом, проведем, используя сегнетоэлектрические кристаллы.

В настоящей работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности исследованы пленочные гетероструктуры Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃ (STO), Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃. Выбор перечисленных компонентов гетероструктуры мотивирован тем, что Fe и BaTiO₃ являются двумя “классическими” ферроидными материалами, обладающими хорошо известными свойствами в объеме. Кроме того, постоянные решеток ГЦК-Fe и перовскита BaTiO₃ очень хорошо совпадают (рассогласование составляет ~1.4%), что позволяет проводить послойный эпитаксиальный рост мультислоев Fe–BaTiO₃ без существенных дислокаций несоответствия, а также проводить моделирование гетероструктуры на компьютере. Поскольку гетероструктура Fe/BTO была тщательно исследована ранее [12–15], в настоящей работе проведем сравнение с аналогичными соединениями – ферромагнитным Co и квантовым параэлектриком SrTiO₃ (потенциальный сегнетоэлектрик), в котором сегнетоэлектрический фазовый переход (ФП) подавлен квантовыми флуктуациями [16]. В [14] было показано, что изменение направления поляризации может изменить намагниченность внутри ферромагнитной пленки. Покажем, что изотропная магнитострикция влияет на величину магнитных моментов. Для исследования магнитострикционного эффекта осуществляли изотропное сжатие вдоль осей *x* и *y*.

ПАРАМЕТРЫ РАСЧЕТОВ

В работе расчеты *ab initio* (из первых принципов) проводили на основе теории функционала плотности [17]. Обменные и корреляционные эффекты учитывали с помощью приближения обобщенного градиента (GGA – generalized gradient approximation) с использованием функционала Пердю–Берка–Эрнцгергофа [18]. Уравнения Кона–Шема [19] решали с использованием проективно расширенных волновых потенциалов и волновых функций [20]. Все расчеты проводили с помощью программы VASP (Vienna *ab-initio* Simulation Package) [21–23], встроенной в программу MedeA [24]. Были приняты отсечка плоской волны 520 эВ, критерий сходимости атомной релаксации 0.015 эВ/Å, условие сходимости самосгла-

сованных расчетов – инвариантность полной энергии системы с точностью 10^{–6} эВ. Зоны Бриллюэна разделяли с помощью сеток Монкхорста–Пака [25], включающих в себя 7 × 7 × 7 *k*-точек в случае объемных структур BaTiO₃ и SrTiO₃, а плотность электронных состояний рассчитывали с помощью метода линейных тетраэдров [26]. Напротив, для объемной структуры Fe и Co (рис. 1) использовали 9 × 9 × 9 *k*-точек и размытие Метфесселя–Пакстона первого порядка [27] 0.2 эВ. Наконец, для пленочных гетероструктур Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃, Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃ (суперъядейка изображена на рис. 2) использовали *k*-точки 5 × 5 × 1 с нулевым размытием по Гауссу. Для учета сильных корреляций между электронами *d*-оболочек расчеты были выполнены в рамках метода GGA + *U* с использованием упрощенного подхода [28], учитывающего только разницу между кулоновским параметром экранирования *U* и стонеровским обменным параметром *J* ($U_{\text{eff}} = U - J$). Были применены дополнительные локальные корреляции U_{eff} , равные 4.4, 4.6 и 5.0 эВ для 3*d*-орбиталей Ti, Fe и Co соответственно [29]. В настоящей работе ячейки гетероструктур Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃, Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃ моделировали таким образом (рис. 2), что шесть атомарных слоев Fe или Co приходились на 12 атомарных слоев ВТО (или STO). Также была добавлена вакуумная область толщиной 20 Å, чтобы избежать взаимодействия поверхностей с их периодическими изображениями. Чтобы имитировать условия подложки, нижние (рис. 2, справа) четыре атомных слоя были “заморожены” во время процедуры оптимизации (их атомные позиции не изменялись).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Хорошо известно, что объемные Fe и Co (элементарные ячейки показаны на рис. 1) являются ферромагнитными металлами. Проведенные расчеты для объемных компонентов показали, что магнитный момент, приходящийся на атомы Fe и Co, равен 2.99μ_B и 1.72μ_B соответственно. Эти значения вместе с параметрами ячейки перечислены в табл. 1 и хорошо согласуются с экспериментальными значениями и предыдущими теоретическими предсказаниями [14, 30]. В структуре тетрагональной фазы сегнетоэлектрика ВТО наблюдается смещение атомов титана относительно кислородных плоскостей (Ti–O), равное 0.13 Å, что соответствует 31 мКл/см², тогда как в STO смещений в объеме нет.

Как было отмечено во введении, структурные параметры решеток всех четырех соединений очень близки, поэтому для составления гетероструктур они были приведены в соприкосновение без существенных искажений решеток или пово-

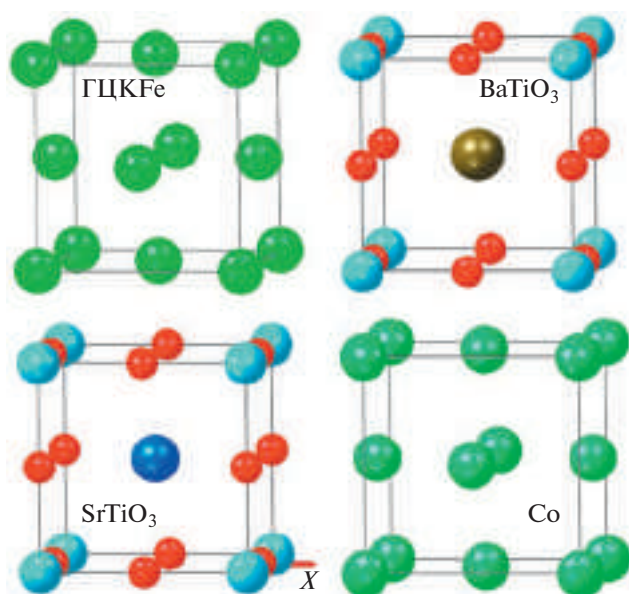


Рис. 1. Элементарные ячейки объемных компонентов.

ротов. Так как существуют четыре возможных типа границ раздела в зависимости от граничных слоев, была проведена оптимизация всех возможных структур для нахождения наиболее стабильной границы раздела с наименьшей энергией. Возможны следующие варианты: граница TiO_2 с атомами O поверх атомов Fe/Co (1) или Ti поверх атомов Co (2), а также граница Ba(Sr)O с атомами Ba(Sr) (3) и O поверх атомов Co и O в четырехкратных пустотах плоскости ГЦК-Co (001) (4). На рис. 2 показана наиболее стабильная конфигурация границы раздела, соответствующая первому типу. Этот вывод согласуется с [14, 28]. В дальнейшем обсуждение представлено для наиболее устойчивой геометрии.

Для всех рассмотренных гетероструктур были рассчитаны смещения атомов титана (Ti–O) и атомов бария и стронция (Ba/Sr–O) относительно кислородных плоскостей в тонких сегнетоэлектрических пленках ВТО и STO (рис. 3). Напомним, что последние четыре атомных слоя были заморожены (их релаксация была запрещена в процессе оптимизации) таким образом, что a и b параметры гетероструктуры были равны параметру решетки объемного материала. В [14] аналогичная структурная характеристика была рассчитана для Fe/VTO с различной толщиной слоя сегнетоэлектрика. В частности, полученная в настоящей работе кривая для Fe/VTO соответствует кривой [14] с $m = 4$ (число слоев сегнетоэлектрика). Полученная кривая лежит значительно ниже по амплитуде в случае смещений титана относительно кислородных плоскостей (Ti–O), что вполне может быть связано с фиксированной толщиной слоев и несимметричной в z -направлении суперъячейкой. Однако общий вид схож с видом опубликованных ранее кривых, а именно наблюдаются постоянство величины смещений в толще сегнетоэлектрика и спад на правой границе. В рассматриваемом случае правая граница соответствует границе с “замороженными” слоями (рис. 2), в [14] – границе со вторым слоем ферромагнетика. Главное отличие – в отсутствии минимума на границе раздела с ферромагнетиком в рассматриваемом случае. Более того, на рис. 3 для ВТО/Fe наблюдается максимум смещений на границе раздела (слой 1). Аналогичным образом была построена зависимость для STO/Fe. Поскольку STO не обладает спонтанной поляризацией, величина смещений чуть больше нуля, имеется минимум на границе с “замороженными” слоями (рис. 3, слой 8). При анализе гетероструктуры с кобальтом было обнаружено, что на кривой STO/Co наблюдаются большие смеще-

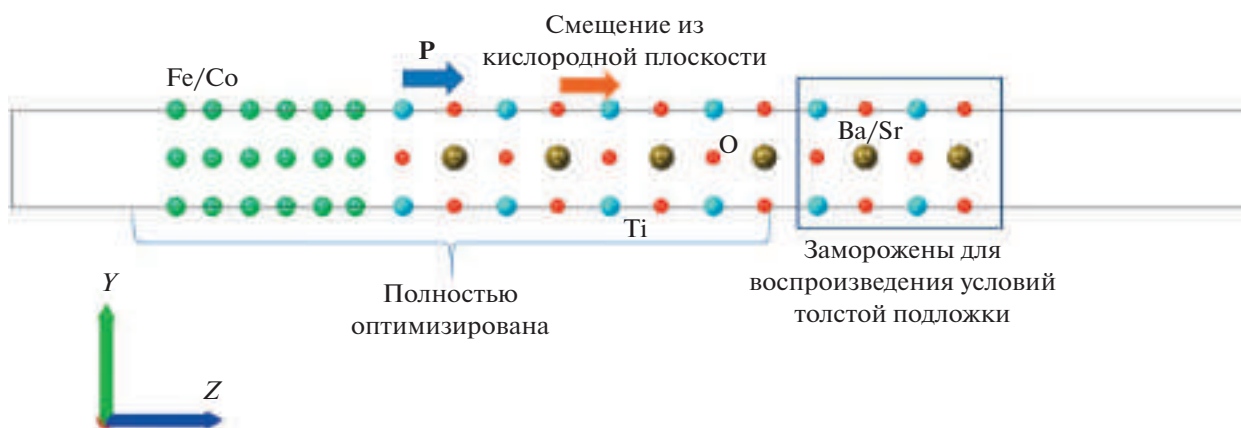


Рис. 2. Элементарная ячейка, используемая для моделирования гетероструктур Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃, Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃. Стрелки указывают направление смещения плоскостей вне атомов кислорода и возникающую вследствие этого поляризацию. Четыре атомных слоя справа были “заморожены” во время процедуры оптимизации.

Таблица 1. Магнитный момент, параметры решетки и ширина запрещенной зоны для объемных компонентов Fe, Co, BaTiO₃, SrTiO₃

Компонент	Магнитный момент, μ_B	Параметры решетки, Å	Ширина запрещенной зоны, эВ
Fe	2.9877	3.613	0
Co	1.7248	3.5367	0
Тетрагональная фаза BaTiO ₃	0	3.99, 4.0325	2.244
SrTiO ₃	0	3.9017	2.490

ния, чем на кривой STO/Fe. Аналогично, сравнивая BTO/Fe и BTO/Co, можно сказать, что присутствие Co в гетероструктуре приводит к тому, что в слое сегнетоэлектрика смещения вне кислородных плоскостей больше, чем в гетероструктуре с железом. Кроме того, в случае гетероструктуры с кобальтом смещения во втором атомарном слое (рис. 3, слой 2), соответствующем слою BaO, самые незначительные, а в случае STO/Co противоположно направлены (поэтому на рис. 3 одна точка в отрицательной области). Наконец, поскольку последний слой, обозначенный цифрой 8, соединен с “замороженными” слоями, на каждой кривой в этой точке амплитуда смещений значительно меньше.

Магнитные свойства рассмотренных гетероструктур обусловлены, очевидно, присутствием ферромагнитных атомов железа и кобальта. В табл. 2 показаны средние значения магнитных моментов, приходящихся на атом железа/кобальта, титана, находящегося в приграничном ато-

марном слое, а также средние значения в пограничном атомарном слое ферромагнетика. Для всех рассмотренных гетероструктур были построены зависимости среднего магнитного момента, приходящегося на атомарный слой начиная с границы раздела, от расположения в гетероструктуре (рис. 4). В случае гетероструктуры BTO/Fe выявлено, что на границе раздела магнетизм существенно подавлен и по мере отдаления от него магнитные моменты растут. В случае BTO/Fe значения магнитных моментов на границе раздела сильно отличны от того, что было получено в [14]. Однако значение магнитного момента на поверхности, равное $2.9\mu_B$, соответствует опубликованным ранее значениям для поверхности Fe(100) [14]. В случае других трех гетероструктур минимум на границе раздела получен не был. Все остальные три зависимости магнитных моментов близки. Более того, у гетероструктуры STO/Fe минимум соответствует поверхностному слою. Значительное ослабление на границе раздела с

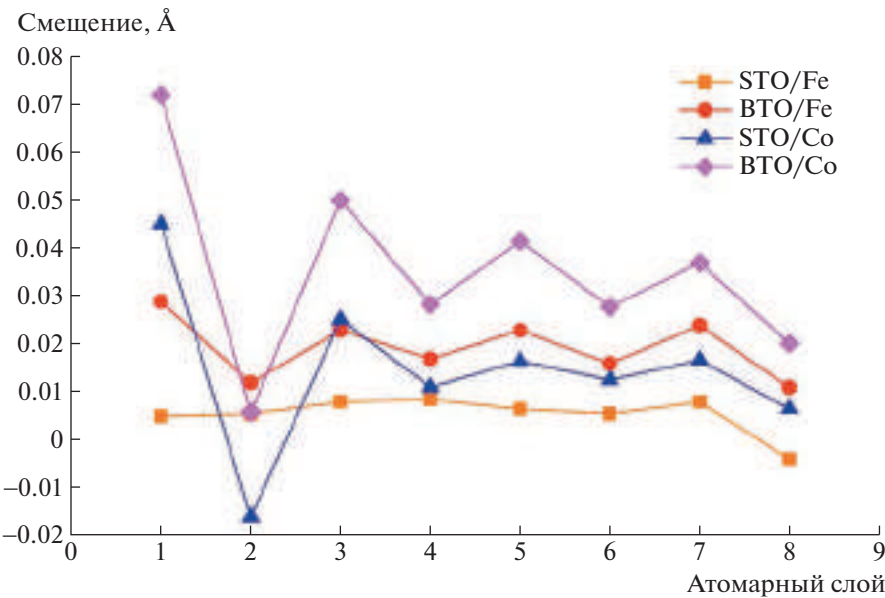


Рис. 3. Смещения атомов титана относительно кислородных плоскостей (Ti—O) в тонких пленках BTO и STO в направлении *z* (как указано на рис. 2). Положительные значения соответствуют локальным дипольным моментам, направленным от границы раздела. Первый слой — слой, ближайший к границе раздела.

Таблица 2. Рассчитанные средние значения магнитных моментов, приходящиеся на атом Fe/Co, в пограничном слое или во всем объеме ферромагнетика, а также на атомах Ti на границе раздела

Гетероструктура	Средний магнитный момент Fe/Co на границе раздела, μ_B	Средний магнитный момент Fe/Co в объеме, μ_B	Средний магнитный момент Ti на границе раздела, μ_B
BTO/Fe	0.46	2.08	−0.073
STO/Fe	2.63	1.86	−0.29
BTO/Co	2.01	2.00	−0.09
STO/Co	2.00	1.99	−0.11

сегнетоэлектриком может быть связано с образованием связей и переносом заряда. Так, наличие сегнетоэлектричества в BaTiO_3 приводит к отклонению магнитных моментов атомов Fe и Ti на границе раздела от их значений в параэлектрическом состоянии (табл. 2). Это связано с изменением прочности связи между атомами Fe и Ti, вызванным сегнетоэлектрическими смещениями. Увеличивающаяся вдоль гетероструктуры (слева направо согласно рис. 2) поляризация заставляет атомы Ti перемещаться от границы вправо. Это приводит к тому, что связь Fe–Ti становится длиннее, следовательно, перекрытие между d -орбиталями $\text{Fe}3d$ и $\text{Ti}3d$ становится меньше. Таким образом, сегнетоэлектрическая нестабильность уменьшает наведенный магнитный момент на атомах Ti. По этой же причине в гетероструктуре BTO/Fe на атомах железа существенным образом подавлен магнитный момент. В гетероструктуре STO/Fe все смещения вне кислородных плоскостей (рис. 3) незначительны, потому нет измене-

ний длин связей, и магнитный момент железа близок к значению магнитного момента объемного железа (табл. 1), а магнитный момент титана больше, чем в случае BTO/Fe. Наконец, намагниченность ферромагнитной пленки кобальта однородно распределена по слоям и всегда равна примерно $2\mu_B$ (табл. 3), что немного выше значения в случае объемного кобальта (табл. 1). В отличие от железа никаких аномалий не наблюдается, причины этого будут объяснены с помощью анализа плотности состояний.

Природа индуцированных магнитных моментов на границе раздела может быть понята из анализа локальных плотностей состояний с орбитальным разрешением. На рис. 5 представлены парциальные плотности состояний атомов, находящихся на границе BTO (STO) и Fe, а именно для $\text{Ti}3d$ -, $\text{Fe}3d$ - и $\text{O}2p$ -орбиталей. Полученные графики (рис. 5а–5в) указывают на гибридизацию перечисленных выше орбиталей. Из рис. 5в видно, что энергия $2p$ -орбиталей атомов кисло-

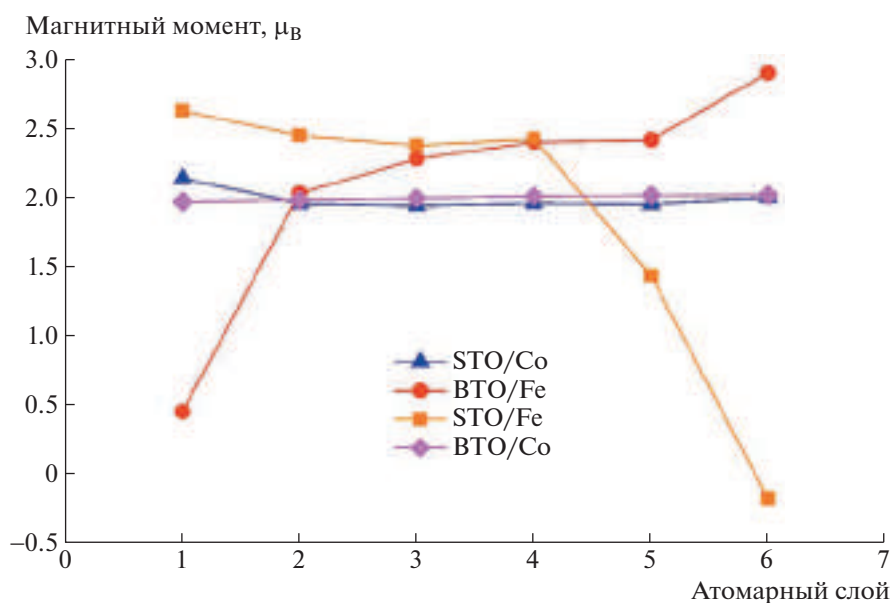
**Рис. 4.** Средний магнитный момент, приходящийся на атом железа или кобальта, в каждом слое ферромагнетика: слой 1 — ближайший к границе раздела, слой 6 — поверхностный.

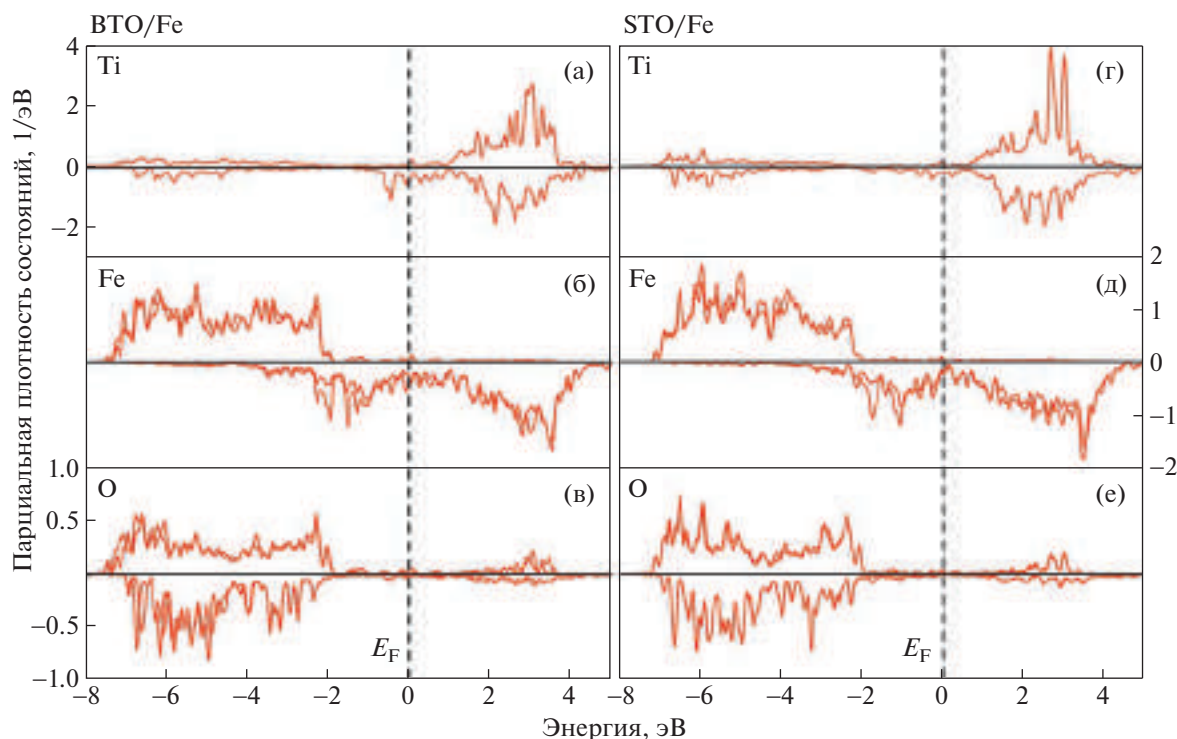
Таблица 3. Значения магнитного момента, приходящегося на атом железа, в зависимости от параметра a тетрагональной решетки гетероструктуры ВТО/Fe

a , Å	4.0	3.9	3.8	3.7	3.6	3.5
Магнитный момент, приходящийся на атом Fe, μ_B	3.18	2.08	2.97	3.02	2.03	2.55

рода значительно меньше энергии Ферми, и $2p$ -орбитали мало перекрываются с орбиталями Fe $3d$ (рис. 5б). Середина области, соответствующей состояниям Ti $3d$ (рис. 5а), расположена примерно на 3 эВ выше энергии Ферми, и Ti $3d$ -орбитали значительно перекрываются с орбиталями Fe $3d$ (рис. 5б). Гибридизация $3d$ -орбиталей Fe и Ti создает связь между состояниями, которые смещаются вниз по энергии и достигают пика чуть ниже уровня Ферми. Таким образом, неосновные спиновые состояния связи Fe–Ti $3d$ вызывают перераспределение заряда между основными и неосновными спинами, что приводит к большему заполнению неосновных спиновых состояний Ti. Это означает наличие индуцированного магнитного момента атомов Ti, направленного антипараллельно магнитному моменту Fe, где состояния с основным спином (по определению) больше заняты, чем состояния с неосновным спином. В случае графиков плотности состояний STO/Fe наблюдается схожая ситуация: энергия $2p$ -орбиталей атомов кислорода (рис. 5е) расположена ниже энергии Ферми, и также нет

хорошего перекрытия $2p$ -орбиталей с орбиталями Fe $3d$ (рис. 5д) и Ti $3d$ (рис. 5г). Плотности состояний атомов Ti $3d$, Fe $3d$ и O $2p$ гетероструктур STO/Co и ВТО/Co показаны на рис. 6. В случае STO/Co электронные взаимодействия атомов, находящихся на границе, характеризуются сильной связью между $3d$ -орбиталями Co (рис. 6б) и $2p$ -орбиталями O (рис. 6в). Из графика также видно, что связь между Co $3d$ и O $2p$ намного сильнее, чем перекрытие Ti $3d$ - (рис. 6а) и Co $3d$ -орбиталей. Для плотности состояний атомов Ti $3d$ (рис. 6г), Fe $3d$ (рис. 6д) и O $2p$ (рис. 6е) гетероструктуры ВТО/Co аналогичны утверждения, указанные выше. Также связь между Co $3d$ - и O $2p$ -орбиталями намного сильнее, чем между Ti $3d$ - (рис. 6а) и Co $3d$ -орбиталями. Это и является причиной того, что в случае кобальта не наблюдается изменения намагниченности в различных атомарных слоях, в отличие от гетероструктур с железом.

Для изучения эффекта обратной магнитострикции была выбрана гетероструктура ВТО/Fe. Начиная с 4 Å, соответствующих параметру ре-

**Рис. 5.** Разрешенный по атомам спектр плотности состояний для а – Ti, б – Fe, в – O в гетероструктуре ВТО/Fe, г – Ti, д – Fe, е – O в гетероструктуре STO/Fe (г–е). Пунктиром обозначен уровень Ферми.

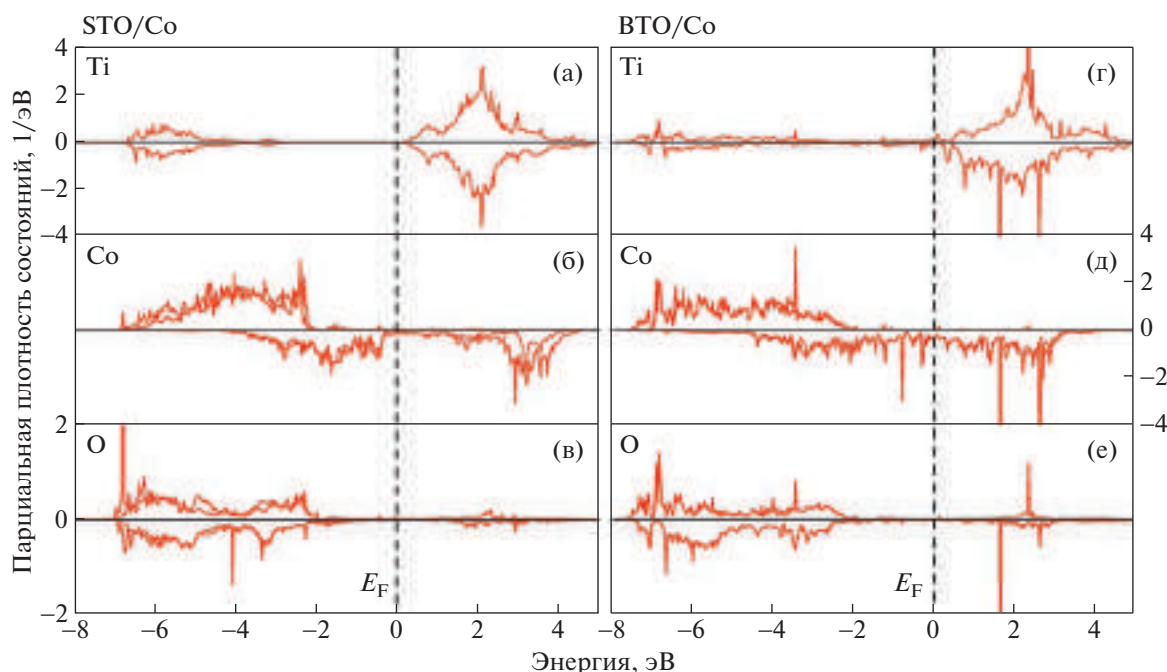


Рис. 6. Разрешенный по атомам спектр плотности состояний для а – Ti, б – Fe, в – O в гетероструктуре BTO/Co, г – Ti, д – Fe, е – O в гетероструктуре STO/Co (г–е). Пунктиром обозначен уровень Ферми.

шетки объемного BaTiO₃, решетка сжималась с шагом 0.1 Å в плоскости *xy* и подвергалась структурной оптимизации с сохранением параметров. Результаты представлены в виде табл. 3. Видно, что незначительно уменьшается средний магнитный момент, приходящийся на атом ферромагнетика, однако очевидной зависимости обнаружено не было. Более того, поскольку вычисления происходили при дополнительных напряжениях в структуре, хорошей сходимости и, соответственно, полностью релаксировавших структур получено не было. Этот факт может сказываться на результатах вычислений. Таким образом, требуется более детальное изучение этого вопроса, что будет проделано в дальнейшем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованы строение, электронные и магнитные свойства гетероструктур ферромагнетик/сегнетоэлектрик на примере Fe/BaTiO₃, Fe/SrTiO₃, Co/BaTiO₃, Co/SrTiO₃. Было выявлено, что строение зависит от типа ферроэлектрика, используемого в гетероструктуре. Так, например, кобальт вызывает сильные структурные искажения, связанные со смещением бария и титана. В совокупности эти искажения приводят к возникновению поляризации, направленной от границы раздела вглубь сегнетоэлектрика. Было показано, что магнитные свойства гетероструктур также различны: гетероструктуры с кобальтом не

проявили никаких особенностей — магнитные моменты распределены однородно по толщине ферромагнетика; в гетероструктурах BTO/Fe и STO/Fe они нетривиально распределены, что требует дальнейшего изучения. Наконец, было обнаружено, что приложенное напряжение и, как следствие, магнитострикция в плоскости, параллельной границе раздела, не изменяют значительно образом распределение намагниченности в гетероструктуре BTO/Fe. Полученные результаты согласуются с имеющимися в литературе данными и будут использованы в дальнейшем.

Исследования структур на основе титаната бария выполнены при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-10178), структур на основе титаната стронция — в рамках госзадания ФИЦ КазНЦ РАН. Вычислительные ресурсы предоставила Лаборатория компьютерного дизайна новых материалов и машинного обучения Казанского федерального университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ota S., Ando A., Chiba D. // Nat. Electron. 2018. V. 1. P. 124.
<https://doi.org/10.1038/s41928-018-0022-3>
2. Makarov D., Melzer M., Karnaushenko D., Shmidt O.G. // Appl. Phys. Rev. 2016. V. 3. P. 011101.
<https://doi.org/10.1063/1.4938497>
3. Jia C., Zhao X., Lai Y.H. et al. // Nano Energy. 2019. V. 60. P. 476.
<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2019.03.053>

4. *Liy Y., Yang T., Zhang Y. et al.* // Adv. Mater. 2019. V. 31. P. 1902783.
<https://doi.org/10.1038/s41928-018-0022-3>
5. *Won S.S., Seo H., Kawahara M. et al.* // Nano Energy. 2019. V. 55. P. 182.
<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.10.068>
6. *Yao J., Song X., Gao X. et al.* // ACS Nano. 2018. V. 12. P. 6767.
<https://doi.org/10.1021/acsnano.8b01936>
7. *Lu N., Zhang P., Zhang Q. et al.* // Nature. 2017. V. 546. P. 124.
<https://doi.org/10.1038/nature22389>
8. *Cao D., Wang F., Jiang Z. et al.* // J. Mater. Sci. 2016. V. 51. P. 3297.
<https://doi.org/10.1007/s10853-015-9656-y>
9. *Leksin P.V., Garif'yanov N.N., Garifullin I.A. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97. P. 102505.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.1007.2511>
10. *Тихомирова Н.А., Баранов А.И., Гинзберг А.В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 38. С. 365.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.1007.2511>
11. *Тихомирова Н.А., Донцова Л.И., Гинзберг А.В. и др.* // ФТТ. 1988. Т. 30. С. 724. https://www.math-net.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=ftt&paperid=4418&option_lang=rus
12. *Zhao Y., Peng R., Guo Y. et al.* // Adv. Functional Mater. 2021. V. 31. P. 2009376.
<https://doi.org/10.1002/adfm.202009376>
13. *Tsymbal E.Y., Duan C.G., Jaswal S.S.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. P. 047201.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.047201>
14. *Duan C.G., Jaswal S.S., Tsymbal E.Y.* // Phys. Rev. 2006. V. 97. P. 047201.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.047201>
15. *Sahoo S., Srinivas P., Duan C.G. et al.* // Phys. Rev. 2007. V. 76. P. 092108.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.092108>
16. *Muller K.A., Burkard H.* // Phys. Rev. 1979. V. 19. P. 3593.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.3593>
17. *Hohenberg P., Kohn W.* // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. P. 864.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
18. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
19. *Kohn W., Sham L.J.* // Phys. Rev. A. 1965. V. 140. P. 1133.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
20. *Blöchl P.E.* // Phys. Rev. 1994. V. 50. P. 17953.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
21. *Kresse G., Furthmüller J.* // Comp. Mater. Sci. 1996. V. 6. P. 15.
[https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
22. *Kresse G., Furthmüller J.* // Phys. Rev. 1996. V. 54. P. 11169.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
23. *Kresse G., Joubert D.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
24. Medea, version 3.6; Inc. San Diego, USA.
25. *Monkhorst H.J., Pack J.D.* // Phys. Rev. 1976. V. 13. P. 5188.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
26. *Blöchl P.E., Jepsen O., Andersen O.K.* // Phys. Rev. 1994. V. 49. P. 16223.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.16223>
27. *Methfessel M., Paxton A.T.* // Phys. Rev. 1989. V. 40. P. 3616.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.3616>
28. *Dudarev S.L., Botton G.A., Savrasov S.Y. et al.* // Phys. Rev. 1998. V. 57. P. 1505.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.1505>
29. *Calderon C.E., Plata J.J., Toher C.* // Comp. Mater. Sci. 2015. V. 108. P. 233.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.019>
30. *Oleinik I.I., Tsymbal E.Y., Pettifor D.G.* // Phys. Rev. 2001. V. 65. P. 020401.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.115503>