Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 5, с. 318 – 323

О возможных магнитных свойствах ультратонких пленок Mn_2GaC на подложках Al_2O_3

М. А. Высотин[+*1)], *И. А. Тарасов*[+], *А. С. Федоров*[+*], *С. Н. Варнаков*[+], *С. Г. Овчинников*[+*]

[+]*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия*

[*]*Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 22 июня 2022 г.
После переработки 18 июля 2022 г.
Принята к публикации 18 июля 2022 г.

Рассматривается вопрос о возможности роста и магнитных свойствах тонких пленок MAX-фазы Mn_2GaC на подложках Al_2O_3 различной ориентации. В рамках геометрического подхода спрогнозированы наиболее предпочтительные ориентационные соотношения и интерфейсные плоскости в системе $Mn_2GaC//Al_2O_3$, указывающие на возможность роста на подложках сапфира C-срез (0001), S-срез $(01\bar{1}\bar{1})$, N-срез $(11\bar{2}\bar{3})$, и R-срез $(0\bar{1}1\bar{2})$. С помощью метода функционала электронной плотности рассчитаны возможные магнитные свойства сплошных ультратонких пленок Mn_2GaC при условии сохранения однородных растяжений/сжатий решетки MAX-фазы,вызванных ростом на предсказанных подложках: определено влияние деформации решетки Mn_2GaC на магнитное упорядочение и величины магнитных моментов, оценена возможность перехода из антиферромагнитного состояния в ферромагнитное под действием внешних магнитных полей. Показано, что рост ферромагнитной пленки MAX-фазы Mn_2GaC наиболее вероятен на подложках $Al_2O_3(0001)$, $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ и $Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$.

DOI: 10.31857/S1234567822170098, EDN: jtczql

Введение. Известные с 1960-х гг. соединения бескислородной керамики, так называемые MAX-фазы, в последнее десятилетие переживают настоящее второе рождение. Это семейство фаз, с общей формулой $M_{n+1}AX_n$, где M – переходный металл, A – элементы подгруппы A групп III и IV (в основном, Al, Ga, Ge или Si), X – углерод или азот, сочетает в себе свойства керамики и металла, способность к самовосстановлению, а также стойкость к высокотемпературному окислению и растрескиванию при резком нагреве/охлаждении [1]. Благодаря слоистой высокоанизотропной структуре MAX-фаз возможен синтез ультратонких функциональных пленок вплоть до толщины в несколько нанометров, что делает их новым перспективным классом для применения в различных областях техники.

Долгое время считалось, что эти соединения не проявляют магнитных свойств, однако в 2013 г. была найдена первая MAX-фаза с дальним магнитным порядком: была синтезирована $(Cr_{0.75}Mn_{0.25})_2GeC$ в виде эпитаксиальной тонкой пленки на MgO(111) [2]. Последующие исследования обнаружили несколько тройных и четвертных MAX-фаз на основе Mn с конкурирующими ферро- и антиферромагнитными (внутри- и межплоскостными) взаимодействиями, приводящими к общему сложному магнитному отклику, зависящему от поля и температуры. Недавно детальное изучение магнитных свойств Mn_2GaC привело к открытию первой магнитокалорической MAX-фазы с высокой температурой упорядочения и инверсией знака магнитострикции и магнитосопротивления при фазовом переходе [3]. Эти новые свойства материалов предлагают новые функциональные возможности для интеллектуальных датчиков и актуаторов, которые востребованы для интернета вещей.

Тем не менее, синтез качественных пленок MAX-фаз на данный момент оказывается весьма сложным [4] и, тем самым, отражает общую проблему поиска подходящих технологических подложек для роста заданных кристаллических пленок. Ранее нами был предложен двухступенчатый кристаллогеометрический метод [5], который позволяет определить набор предпочтительных ориентационных соотношений между подложкой и эпитаксиально растущей на ней пленки. Однако свойства тонких пленок, образование которых может происходить на этих подложках, остаются за рамками такого метода и требуют отдельного изучения. В случае, если речь идет о новых малоизученных материалах, крайне выгодным представляется предварительное исследование ожидаемых свойств тео-

1)e-mail: mav@iph.krasn.ru

ретическими методами, например высокоточными квантово-химическими расчетами.

Таким образом, актуальной представляется задача нахождения наиболее предпочтительных ориентационных соотношений магнитных MAX-фаз, например, Mn_2GaC, с кристаллической структурой сапфира Al_2O_3 – технологически важного материала, из которого производятся качественные подложки произвольной ориентации. При этом особый интерес может представлять возможная деформация решетки растущей пленки при образовании интерфейса с подложкой, которая может существенно повлиять на магнитные свойства [6, 7]. Соответственно, в данной работе мы сначала проводим предсказание наиболее предпочтительных плоскостей подложек Al_2O_3, а затем исследуем методами квантово-химических расчетов магнитные свойства напряженных пленок Mn_2GaC.

Прогнозирование ориентационных соотношений. Учитывая большой размер и число неэквивалентных атомных позиций в ячейках Mn_2GaC и Al_2O_3, в данной работе оправдано использование чисто геометрического подхода к поиску возможных границ раздела между этими двумя фазами. Предложенный нами кристаллогеометрический подход, который достаточно прост для поиска по многочисленным вариантам, уже показал свою эффективность для задач эпитаксиального роста [5].

Предлагаемая методика использует систематическую комбинацию метода наложения ячеек ряд-к-ряду (*edge-to-edge matching*) [8], чтобы найти возможные ориентационные соотношения и потенциальные интерфейсы, и последующую максимизацию доли близко-совпадающих узлов (*Near-Coincidence Sites*, NCS) [9] для прогнозирования относительного положения фаз на границе раздела и для сравнения различных интерфейсов между собой. При этом концепция плотности атомных рядов переформулируется для учета небольших атомных смещений, которые лежат в основе метода NCS, и, таким образом, оба метода используются унифицированным образом. Полученная информация об узлах совпадений решеток позволяет построить простую атомистическую модель структуры интерфейса, которая может использоваться в качестве входных данных для более совершенных методов построения атомной структуры (методы Монте-Карло, эволюционные или другие эвристические алгоритмы) или непосредственно в молекулярной динамике или квантово-химических расчетах.

В первую очередь для заявленной пары кристаллических фаз были выбраны ключевые параметры метода поиска интерфейсов. В качестве критерия совпадения близкорасположенных узлов решеток было выбрано расстояние 0.46 Å, которое эквивалентно смещениям атомов до 0.23 Å, что соответствует примерно 12 % от длин связей Mn-C и Al-O. Для толщины интерфейсного слоя было взято значение 2.8 Å, что полностью исключает взаимодействие атомов, находящихся по разную сторону от интерфейсного региона, так как наибольший атомный радиус не превышает 1.4 Å(марганец). В качестве критерия плотной упаковки кристаллографических направлений, как и в прошлых работах, было выбрано относительно невысокое значение $(6\,\text{Å})^{-1}$. Максимальное рассогласование векторов трансляций на рассматриваемых интерфейсах было ограничено по величине деформации интерфейса $\tilde{\varepsilon} = (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xy}^2)^{0.5}$, где $\varepsilon_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора деформации. Все интерфейсы-кандидаты с деформацией $\tilde{\varepsilon}$ более 5 % отбрасывались. Поскольку величина $\tilde{\varepsilon}$ неотрицательна, она не отражает знак преимущественной деформации, т.е. будет ли растущая на подложке пленка сжиматься или растягиваться. Для отслеживания этого использовалась разность площадей примитивных ячеек трансляции в плоскости интерфейса, δS, приведенная к площади ячейки подложки Al_2O_3, далее обозначенной S_0.

Учитывая схожесть химических связей, которые могут образовывать входящие в обе фазы атомы, было выбрано, что совпадающими узлами считались пары Mn-Al, Ga-Al и C-O. Отдельно стоит отметить, что исключение пары Ga-Al приводит к незначительному изменению порядка интерфейсов по степени предпочтительности.

На первых этапах поиска было обнаружено,что выбранные критерии согласования решеток допускают огромное количество предварительных вариантов интерфейсов, включающих в основном высокоиндексные плоскости сапфира. Поскольку конечной целью поиска является выбор подложки для синтеза MAX-фазы, было решено отбросить интерфейсы с плоскостями Al_2O_3, которые не используются для изготовления подложек. В результате поиск был ограничен плоскостями Al_2O_3 R-срез $(0\bar{1}1\bar{2})$, A-срез $(11\bar{2}0)$, S-срез $(01\bar{1}\bar{1})$, M-срез $(10\bar{1}0)$, C-срез (0001), V-срез $(22\bar{4}3)$, N-срез $(11\bar{2}\bar{3})$ и срезы $(11\bar{2}9)$, $(11\bar{2}6)$ и $(10\bar{1}4)$. Это позволило снизить число анализируемых ориентационных соотношений до 12197 вариантов. Для каждого из них была рассчитана доля совпадающих узлов в интерфейсном регионе. В таблице 1 представлены варианты с долей NCS более 0.4.

Экспериментальные подтверждения роста фазы Mn_2GaC ограничены случаем роста на подлож-

Таблица 1. Наиболее вероятные ориентационные соотношения и интерфейсы $Mn_2GaC//Al_2O_3$

#	NCS	(hkil) MAX	(hkil) Al_2O_3	Срез Al_2O_3	[uvtw] MAX	[uvtw] Al_2O_3	$\tilde{\varepsilon}$,	$\delta S/S_0$, %
1	0.92	(0001)	(0001)	C	$[11\bar{2}0]$	$[1\bar{1}00]$	4.551	−11.40
2	0.46	$(11\bar{2}\bar{3})$	$(01\bar{1}\bar{1})$	S	$[1\bar{1}00]$	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	2.275	−2.86
3	0.44	$(1\bar{1}03)$	$(11\bar{2}\bar{3})$	N	$[11\bar{2}0]$	$[1\bar{1}00]$	2.375	−4.22
4	0.43	$(1\bar{1}02)$	(0001)	C	$[11\bar{2}0]$	$[10\bar{1}0]$	2.722	+0.07
5	0.43	$(11\bar{2}6)$	$(0\bar{1}1\bar{2})$	R	$[1\bar{1}00]$	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	2.461	−4.76
6	0.42	$(\bar{1}014)$	$(\bar{1}\bar{1}29)$	–	$[11\bar{2}0]$	$[1\bar{1}00]$	4.852	−1.61
7	0.42	$(1\bar{1}00)$	$(11\bar{2}0)$	A	$[11\bar{2}0]$	$[1\bar{1}00]$	2.318	−1.96
8	0.41	$(11\bar{2}0)$	$(1\bar{1}00)$	M	$[1\bar{1}00]$	$[11\bar{2}0]$	2.318	−1.96

ках MgO(111). В свою очередь формирование тонких пленок MAX-фаз, содержащих атомы хрома $(Cr_{1-x}Mn_x)_2GaC$, наблюдалось на различных подложках, в том числе на $Al_2O_3(0001)$ [10]. Преимущественная ориентация таких пленок наблюдается на плоскость $(Cr_{1-x}Mn_x)_2GaC(0001)$. Однако текстурирование MAX-фазы обнаруживается и на плоскости $(01\bar{1}3)$ и $(10\bar{1}0)$. При этом кристаллиты данных ориентаций не имеют интерфейса с поверхностью $Al_2O_3(0001)$. Их рост происходит на боковых гранях кристаллитов ориентации (0001) на этапе коалесценции [11].

Как видно из полученных результатов, предсказанный как наиболее вероятный интерфейс действительно соответствует экспериментально наблюдаемой ориентации пленки MAX-фазы (0001) на подложке $Al_2O_3(0001)$. Однако нельзя не отметить большую величину сжатия, которому подвергается фаза Mn_2GaC при таком варианте синтеза. Даже при высокой степени пластичности, присущей MAX-фазам [1, 12], это препятствует росту сплошной монокристаллической пленки и способствует формированию кристаллитов других ориентаций на боковых гранях MAX-фазы (0001) для понижения полной энергии. Стоит отметить, что для этой подложки имеется другое ориентационное соотношение, # 4 $Mn_2GaC(1\bar{1}02)//Al_2O_3(0001)$, причем это единственный вариант из числа лидеров, для которого пленка оказывается растянутой, $\delta S/S_0 = +0.07\,\%$. Однако величина деформации интерфейса (2.722 %) указывает на значительную анизотропию растяжения. Вместе с этим, такой интерфейс имеет вдвое меньшую долю NCS по сравнению с наилучшим вариантом, и поэтому рост таких пленок не наблюдается.

Отдельного внимания требуют варианты # 7 и # 8. Помимо того, что они соответствует распространенным типам сапфировых подложек, $Al_2O_3(10\bar{1}0)$ M-срез и $Al_2O_3(11\bar{2}0)$ A-срез, они также обладают достаточно низкими показателями деформации. Вследствие того, что пленка MAX-фазы оказывается менее сжатой по сравнению с # 1, могут измениться ее электронные и магнитные свойства, а также степень их анизотропии. Данное обстоятельство может помочь получению новых материалов с заданными свойствами. Здесь же стоит отметить, что вариант # 2, $Mn_2GaC(11\bar{2}\bar{3})//Al_2O_3(01\bar{1}\bar{1})$ также показывает относительно небольшие показатели сжатия пленки, что также может представлять интерес для дальнейших исследований.

Методика расчета электронной структуры и магнитных свойств. Все расчеты проводились в спин-поляризованной версии теории функционала плотности в рамках пакета VASP 5.4 [13, 14] с использованием псевдопотенциалов по методу PAW [15, 16]. В качестве обменно-корреляционного потенциала было выбрано приближение GGA-PBE [17], поскольку ранее было показано, что в рамках данного приближения корректно описывается электронное состояние атомов переходного метала в MAX-фазе Mn_2GaC [18] даже без применения дополнительных коррекций типа GGA + U, и то, что данное приближение в целом хорошо применимо к семейству MAX-фаз [12, 19] и Al_2O_3 [20, 21]. Использовался базис плоских волн, размер которого определялся параметром обрезания по энергии, который был равен 520 эВ для всех расчетов. Первая зона Бриллюэна согласно процедуре Монхорста–Пака [22] разбивалась на сетку k-точек с размерами $12 \times 12 \times 4$ для удвоенной суперячейки. Критерий сходимости при минимизации электронных степеней свобод был установлен на уровне 10^{-7} эВ. Расчет полной энергии структуры при оптимизации геометрии проводился до тех пор, пока остаточные силы, действующие на атомы, не становились менее 0.01 эВ/Å.

Сначала были рассчитаны равновесные объемные антиферромагнитная (АФМ) и ферромагнит-

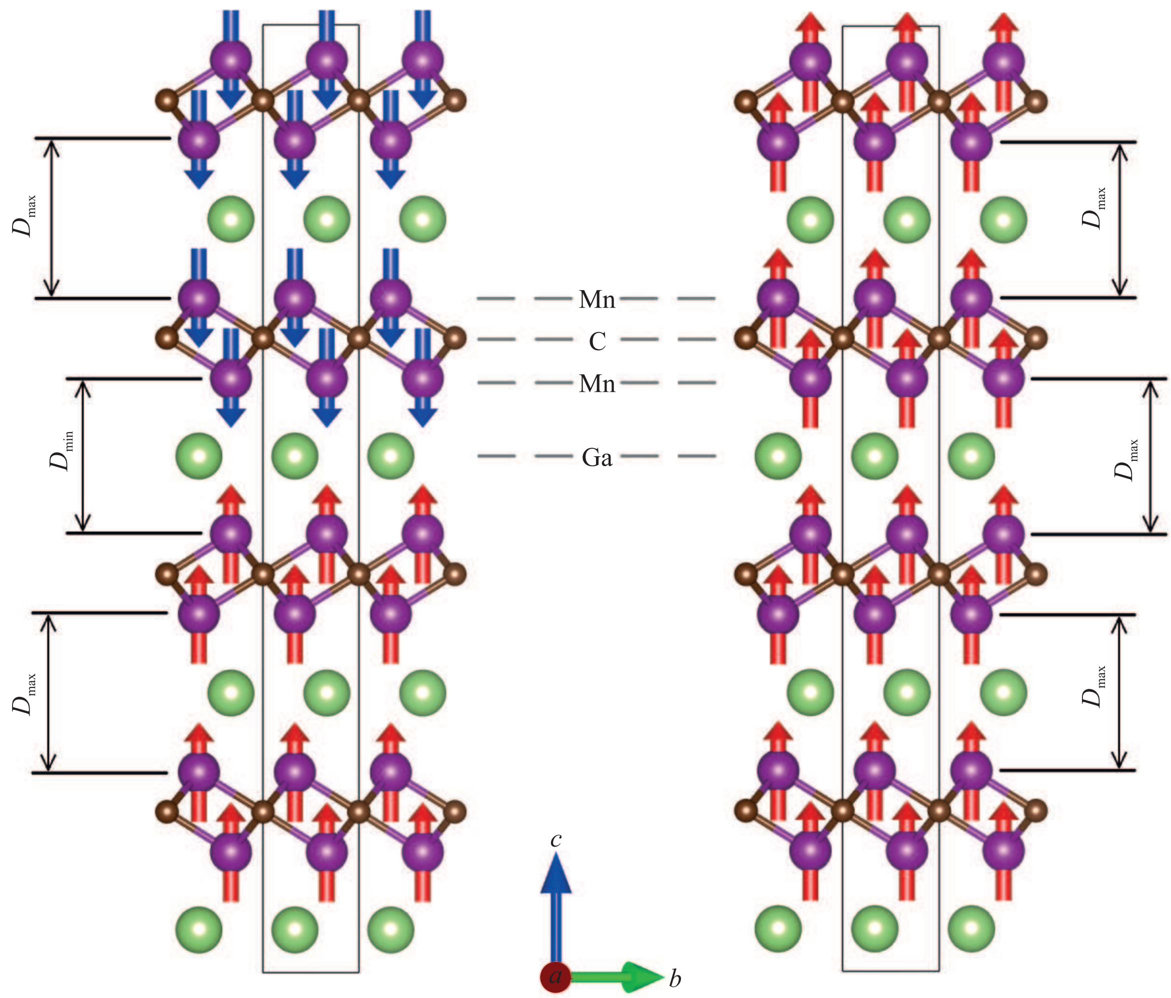

Рис. 1. (Цветной онлайн) Расчетные ячейки АФМ и ФМ фаз Mn_2GaC

ная (ФМ) фазы Mn_2GaC. Магнитное упорядочение и межатомные расстояния в этих двух случаях отличаются, это схематически отображено на рис. 1.

В соответствие с экспериментом, минимуму по энергии соответствует объемная АФМ-фаза. При этом параметры решетки также совпадают с экспериментальными данными, что подтверждает применимость выбранных методов и параметров для расчета электронных и магнитных свойств MAX-фазы Mn_2GaC.

После определения равновесного состояния Mn_2GaC исследовалась зависимость магнитных свойств от сжатия/растяжения решетки MAX-фазы согласно ориентационному соотношению в предположении, что вызванное подложкой механическое напряжение не релаксируется и сохраняется во всей толщине пленки. Для этого ячейки были подвергнуты соответствующей деформации в плоскости предполагаемого интерфейса, и затем проведена минимизация энергии ячейки с варьированием атомных позиций и компонентов векторов ячейки, перпендикулярными заданной плоскости, при этом компоненты векторов ячейки в заданной плоскости оставались фиксированными. Оптимизация геометрии проводилась отдельно для АФМ и для ФМ упорядочения магнитных моментов, что позволило определить, чему соответствует минимум энергии для каждой из рассмотренных деформаций.

Магнитные свойства напряженного $\mathbf{Mn_2GaC}$ на $\mathbf{Al_2O_3}$. Для теоретического исследования магнитных свойств MAX-фаз в тонких пленках, которые при росте на кристаллических подложках подвергаются деформации, были выбраны спрогнозированные ранее варианты ориентационных соотношений $Mn_2GaC//Al_2O_3$. Вследствие разного характера деформации ячеек в случаях разных ориентационных соотношений, по-разному меняются магнитные свойства MAX-фазы: основное состояние

Таблица 2. Магнитные свойства напряженного Mn_2GaC на различных подложках Al_2O_3: ΔE – разница энтальпии с равновесной фазой; ΔE(ФМ-АФМ) – энергия АФМ $\rightarrow$ ФМ переход $\min(\mu)$ и $\max(\mu)$ – минимум и максимум величины магнитного момента μ на ионах Mn; P – спиновая поляризация; $D_{\min}$, $D_{\max}$ – расстояния между слоями Mn_2C (см. рис. 1)

#	$Mn_2GaC//Al_2O_3$	ΔE, мэВ/f.u.	ΔE(ФМ-АФМ), мэВ/ион Mn	$\min(\mu)$, μ_B	$\max(\mu)$, μ_B	P, %	$D_{\min}$, Å	$D_{\max}$, Å
1	(0001)//(0001) АФМ	237.04		1.967	2.117	0	4.174	4.211
	ФМ	221.34	−7.85		1.948	−20.9	4.175	4.179
2	$(11\bar{2}\bar{3})//(01\bar{1}\bar{1})$ АФМ	103.31		2.054	2.211	0	4.202	4.264
	ФМ	110.71	3.70		2.051	−3.7	4.217	4.218
3	$(1\bar{1}03)//(11\bar{2}\bar{3})$ АФМ	92.05		2.016	2.181	0	4.142	4.202
	ФМ	94.37	1.16		1.987	−10.7	4.159	4.160
4	$(1\bar{1}02)//(0001)$ АФМ	168.22		2.148	2.264	0	4.324	4.376
	ФМ	179.61	5.69		2.150	−31.9	4.332	4.337
5	$(11\bar{2}6)//(0\bar{1}1\bar{2})$ АФМ	87.09		2.010	2.180	0	4.127	4.188
	ФМ	90.18	1.54		1.950	−27.8	4.143	4.144
6	$(\bar{1}014)//(\bar{1}\bar{1}29)$ АФМ	303.90		1.909	2.170	0	4.124	4.235
	ФМ	323.69	9.89	1.920	1.990	−50.8	4.133	4.202
7	$(1\bar{1}00)//(11\bar{2}0)$ АФМ	121.77		2.117	2.237	0	4.256	4.309
	ФМ	131.03	4.13		2.103	−34.2	4.267	4.269
8	$(11\bar{2}0)//(1\bar{1}00)$ АФМ	121.70		2.096	2.234	0	4.256	4.314
	ФМ	129.77	4.03		2.091	−24.4	4.266	4.272
	Mn_2GaC АФМ	0.00		1.992	2.185	0	4.069	4.137
	Mn_2GaC ФМ	5.27	2.63		1.951	−17.9	4.058	4.058

(АФМ или ФМ), разность энергии при магнитном переходе, величины магнитных моментов. Значения данных величин представлены в табл. 2. Поскольку магнитный обмен между слоями Mn_2C, а значит и магнитное упорядочение между ними, существенно зависит от расстояния между магнитными ионами марганца, находящимися в разных слоях, эти данные также приведены в табл. 2. Для сравнения, аналогичные значения для равновесных АФМ и ФМ фаз Mn_2GaC добавлены в нижние строки табл. 2. Также, для оценки перспективности применения данных тонких пленок в спинтронике, для соответствующих ФМ-фаз была рассчитана величина спиновой поляризации:

$$P = \frac{\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} \cdot 100\,\%,$$

где $\rho_{\uparrow}$ и $\rho_{\downarrow}$ – плотности состояний на уровне Ферми.

В первую очередь стоит отметить, что только три из семи рассмотренных варианта уменьшают стабильность АФМ фазы по отношению к ФМ, причем вариант # 1 – единственный, который приводит к образованию ФМ пленки. При этом разница в энергиях между АФМ и ФМ фазами для вариантов # 3 и # 5 оказывается достаточно мала и можно оценить величины магнитных полей, при которых возможен переход в ферромагнитную фазу, как 10 и 14 Тл, соответственно.

Отдельно стоит отметить, что величины межслоевых расстояний $D_{\min}$, $D_{\max}$ слабо коррелируют с относительной стабильностью АФМ и ФМ фаз, что указывает на нетривиальный характер обмена между магнитными моментами в слоях Mn_2C. В связи с этим замещение атомов А-элемента на элементы с другим атомным радиусом вряд ли позволит управлять магнитным состоянием MAX-фазы, однако может привести к увеличению магнитного момента, как, например, в случае $Mn_2GaC(1\bar{1}02)//Al_2O_3(0001)$.

В заключение стоит отметить, что в данной работе было проделано теоретическое предсказание возможных интерфейсов Mn_2GaC с различными подложками из сапфира, которые ранее не использовались для синтеза MAX-фаз (за исключением $Al_2O_3(0001)$), а также рассчитаны магнитные свойства таких пленок и показана возможность управления магнитным упорядочением в системе $Mn_2GaC//Al_2O_3$, что крайне актуально для применения данных гетероструктур в спинтронике.

Обнаружено, что предсказанный как наиболее вероятный интерфейс действительно соответствует экспериментально наблюдаемой ориентации пленки MAX-фазы (0001) на подложке $Al_2O_3(0001)$. Другие варианты взаимных ориентационных соотношений оказываются значительно ниже по доле NCS, что может означать наличие проблем для синтеза пленок Mn_2GaC другой ориентации. Однако найденные альтернативные интерфейсы могут оказаться более выгодными благодаря меньшей степени деформации растущей пленки, что также может оказать влияние на электронные и магнитные свойства, а также степень их анизотропии.

В рамках квантово-химических расчетов было определено, что деформация элементарных ячеек, возникающая вследствие действия подложки, может существенно повлиять на дальний магнитный порядок, причем пленки ориентации $Mn_2GaC(0001)//Al_2O_3(0001)$ соответствуют деформации, которая приводит к образованию ФМ-фазы. Подложки $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ и $Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$ уменьшают стабильность АФМ фазы по отношению к ФМ настолько, что можно ожидать магнитный переход под действием внешних магнитных полей величиной 10 и 14 Тл, соответственно. При этом величина спиновой поляризации в ФМ-фазе пленки $Mn_2GaC(11\bar{2}6)//Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$ превышает спиновую поляризацию ФМ-фазы объемного Mn_2GaC и достигает 28 %.

В целом, результаты предсказания интерфейсов MAX-фазы с сапфиром указывают на то, что большой интерес могут представлять подробные исследования по синтезу на новых типах подложек, $Al_2O_3(1\bar{1}00)$ M-срез и $Al_2O_3(01\bar{1}\bar{1})$ S-срез, а также $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ N-срез.

Исследования выполняются при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта # 20-42-240012, Правительства РФ в рамках гранта по созданию лабораторий мирового уровня (соглашение # 075-15-2019-1886).

1. A. S. Ingason, A. Petruhins, and J. Rosen, Mater. Res. Lett. **4**, 152 (2016).
2. A. S. Ingason, A. Mockute, M. Dahlqvist, F. Magnus, S. Olafsson, U. B. Arnalds, B. Alling, I. A. Abrikosov, B. Hjörvarsson, P. O. Å. Persson, and J. Rosen, Phys. Rev. Lett. **110**, 195502 (2013).
3. R. Salikhov, A. S. Semisalova, A. Petruhins, A. S. Ingason, J. Rosen, U. Wiedwald, and M. Farle, Mater. Res. Lett. **3**, 156 (2015).
4. M. Stevens, H. Pazniak, A. Jemiola, M. Felek, M. Farle, and U. Wiedwald, Mater. Res. Lett. **9**, 343 (2021).
5. M. A. Visotin, I. A. Tarasov, A. S. Fedorov, S. N. Varnakov, and S. G. Ovchinnikov, Acta Crystallogr. Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater. **76**, 469 (2020).
6. A. S. Botana, F. Bernardini, and A. Cano, JETP **132**, 618 (2021).
7. С. Г. Овчинников, О. А. Максимова, С. А. Лященко, И. А. Яковлев, С. Н. Варнаков, Письма в ЖЭТФ **114**, 192 (2021).
8. M.-X. Zhang, P. M. Kelly, M. Qian, and J. A. Taylor, Acta Mater. **53**, 3261 (2005).
9. Q. Liang and W. T. Reynolds, Metall. Mater. Trans. A **29**, 2059 (1998).
10. A. Petruhins, A. S. Ingason, J. Lu, F. Magnus, S. Olafsson, and J. Rosen, J. Mater. Sci. **50**, 4495 (2015).
11. P. Eklund, M. Bugnet, V. Mauchamp, S. Dubois, C. Tromas, J. Jensen, L. Piraux, L. Gence, M. Jaouen, and T. Cabioc'h, Phys. Rev. B **84**, 1 (2011).
12. I. R. Shein and A. L. Ivanovskii, Письма в ЖЭТФ **91**, 446 (2010).
13. G. Kresse and J. Furthmüller, Computational Materials Science **6**, 15 (1996).
14. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
15. P. E. Blöchl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
16. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
17. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
18. M. Dahlqvist and J. Rosen, Sci. Rep. **10**, 11384 (2020).
19. Н. И. Медведева, Физика твердого тела **55**, 500 (2013).
20. Т. В. Перевалов, А. В. Шапошников, В. А. Гриценко, Х. Вонг, Ж. Х. Хан, Ч. В. Ким, Письма в ЖЭТФ **85**, 197 (2007).
21. А. В. Бакулин, S. Hocker, С. Е. Кулькова, Физическая мезомеханика **24**, 26 (2021).
22. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).