Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 1, с. 44 – 50 © 2025 г. 10 января

# Исследование стабильности, структурного и магнитного упорядочения в магнитном MXене $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$

*А. С. Шинкоренко*[+], *В. С. Жандун*[+*1)], *Н. Г. Замкова*[+]

[+]*Институт физики им. Л. В. Киренского – обособленное подразделение "Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской Академии наук", 660036 Красноярск, Россия*

[*]*Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого, 660022 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 9 октября 2024 г.
После переработки 8 ноября 2024 г.
Принята к публикации 13 ноября 2024 г.

В данной работе в рамках первопринципных расчетов и кластерного приближения проведен анализ термодинамической стабильности, магнитных и электронных свойств нового 2D магнитного соединения $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$ из семейства MXенов. Предложена наиболее стабильная структура и магнитная конфигурация $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$, в том числе с учетом функционализации поверхности фтором и кислородом. Впервые обнаружен стабильный и перспективный для синтеза ферримагнитный MXен $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2$ с большим магнитным моментом на ячейку, как в чистом виде, так и при функционализации его поверхности фтором.

DOI: 10.31857/S0370274X25010079, EDN: ERUASZ

**1. Введение.** С момента своего открытия в 2011 г., семейство двумерных материалов MXенов вызывает большой интерес благодаря своим уникальным физическим свойствам. MXены представляют собой двумерные материалы с общей формулой $M_{n+1}X_nT_x$ (M – переходной металл, X – углерод или азот, T – функциональная группа F, O, OH и т.п., $n = 1{-}3$). В зависимости от состава выделяют MXены двух типов. Первый тип – моно-MXены,где M-слои состоят из одного и того же переходного металла ($Ti_2CT_x$, $V_2CT_x$, $Ti_3C_2T_x$, $Nb_4C_3T_x$) [1]. Во втором типе MXенов в слое смешаны два (или более) переходных металла $(M1,M2)_{n+1}X_nT_x$. При этом различные переходные металлы M1 и M2 могут как упорядочиваться в одной плоскости, так и образовывать целые плоскости, занятые одним типом переходного металла [2]. Второй тип более характерен для MXенов 2-го порядка $M_{n+1}X_nT_x$, где $n = 2$ ($M_3X_2T_x$), тогда как в MXенах 1-го порядка $M_{n+1}X_nT_x$, где $n = 1$ ($M_2XT_x$) скорее наблюдается упорядочение в плоскости [1, 2].

В последнее время особое внимание уделяется магнитным MXенам [3–7]. Двумерные магнитные материалы привлекают к себе внимание благодаря их потенциальному использованию в электронных устройствах, использующих манипуляцию спиновой степенью свободы носителей. Однако несмотря на то, что семейство MXенов обладает большим разнообразием возможного химического состава, в настоящее время экспериментально получены лишь несколько магнитных MXенов [8–12]. Основной причиной является фазовая нестабильность магнитных MXенов. Большинство синтезированных на сегодня MXенов имеют в своем составе ранние переходные металлы, такие как Ti, Mo, W, и являются немагнитными [3, 13, 14]. Для получения магнитных MXенов в их состав необходимо включить поздние переходные металлы такие как Cr, Mn или Fe. В работах [12–18] в рамках теории функционала плотности (ТФП) было предсказано существование ферромагнетизма в ряде MXенов на основе Cr, Mn и Fe. Особый интерес представляют железосодержащие MXены, поскольку наличие атома Fe позволяет ожидать, что такие соединения будут обладать высокими значениями магнитных моментов, что обеспечит сильный результирующий магнетизм. Так, в [17, 18] авторы теоретически показали, что MXены первого порядка $Fe_2C$ обладают термодинамической стабильностью и высокими значениями локальных магнитных моментов при высокой температуре Кюри. Также показано, что MXен первого порядка $Fe_2C$ является хорошим кандидатом для создания двумерного ферромагнетика с XY-анизотропией [18].

Однако, несмотря на обилие теоретических работ, MXены остаются в значительной степени не изученными экспериментально. Для прогнозиро-

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

вания новых стабильных структур с желаемыми свойствами оказались весьма полезными расчеты из первых принципов. Подобные расчеты могут предсказать структурные параметры, энергию образования соединения, его электронную структуру и магнитные свойства, и, в общем, находятся в хорошем согласии с доступными экспериментальными данными. К сожалению, в первопринципных расчетах требуемый вычислительный ресурс быстро увеличивается при увеличении числа атомов в элементарной ячейке, поэтому применение этих расчетов для прогнозирования стабильности сплавов сильно ограничены. Преодолеть эту сложность можно с помощью модельных подходов. Одним из них является метод кластерного разложения [19, 20], который доказал свою эффективность при исследовании структурной и фазовой стабильности различных соединений, а также в прогнозировании новых сплавов. Так, на основе данного метода в работе [16] была исследована и предсказана стабильность большой группы MXенов второго порядка $(\mathrm{M1,M2})_{n+1}\mathrm{C}_n$: $(\mathrm{V}_{1-x}\mathrm{Mo}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Nb}_{1-x}\mathrm{Mo}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Ta}_{1-x}\mathrm{Mo}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Ti}_{1-x}\mathrm{Mo}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Ti}_{1-x}\mathrm{Nb}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Ti}_{1-x}\mathrm{Ta}_x)_3\mathrm{C}_2$, $(\mathrm{Ti}_{1-x}\mathrm{V}_x)_3\mathrm{C}_2$, и $(\mathrm{Nb}_{1-x}\mathrm{V}_x)_3\mathrm{C}_2$. В этой группе MXенов особый интерес представляет возможность упорядочения атомов M1 и M2 в разных плоскостях, а также условия, необходимые для образования такого внеплоскостного упорядочения и его влияния на магнитные свойства MXенов. Следует отметить, что в MXенах первого порядка внеплоскостное упорядочение атомов M1 и M2 не наблюдается. Как было показано [21, 22], наиболее стабильными MXенами, содержащими переходные $d$-металлы, являются хромсодержащие соединения. В то же время магнитный порядок, обеспечиваемый атомами железа, наряду с упорядочением атомов Cr и Fe в разных плоскостях позволяет контролировать состав, структуру и магнитные свойства MXенов, что является уникальным в области дизайна магнитных 2D-материалов и предлагает новый путь для прикладного проектирования функциональных наноматериалов. Поэтому в данной работе в рамках кластерного разложения и первопринципных расчетов рассматриваются стабильность, магнитные и электронные свойства новых магнитных MXенов второго порядка $(\mathrm{Cr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x)_3\mathrm{C}_2$.

**2. Детали расчета.** Расчеты проводились с использованием пакета Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [23, 24] с использованием псевдопотенциалов PAW-PBE [25, 26]. Конфигурация валентных электронов для атомов Cr, Fe и C бралась: $3p^63d^54s^1$, $3p^63d^64s^2$, $2s^22p^2$ соответственно. Обменно-корреляционный функционал учитывался с использованием приближения обобщенного градиента (GGA). Число плоских волн было ограничено энергией 600 эВ. Поскольку MXены представляют собой квазидвумерные тонкие пленки, то расчет проводился в рамках приближения, в котором пленки представлялись в виде периодических повторяющихся пластин, разделенных в направлении с оси слоем вакуума толщиной 12 Å. При оптимизации кристаллических структур использовалась сетка $21 \times 21 \times 1$ Монкхорста–Пака [27]. Параметры ячейки и координаты атомов оптимизировались до тех пор, пока силы на ионах не станут меньше 1 мэВ/A. Для учета магнитной анизотропии все расчеты проводились с учетом спин-орбитального взаимодействия [28].

В методе кластерного разложения (CE) [19, 20] энергия любой атомной конфигурации сплава $\sigma$ может быть выражена через кластерные корреляционные функции $\xi_\alpha(\sigma)$ в виде

$$E_{CE}(\sigma) = \Sigma_\alpha J_\alpha \xi_\alpha(\sigma). \tag{1}$$

$J_\alpha$ – константа эффективного кластерного взаимодействия. Имея набор констант $\{J_\alpha\}$ можно определить энергию любой атомной конфигурации сплава (1).

Мерой фазовой стабильности данной атомной конфигурации сплава служит энергия образования $E_f(\sigma)$ по отношению к чистым соединениям

$$E_f(\sigma) = E_{CE}(\sigma) - (1 - x(\sigma))E_{CE}(M1_3C_2) - \\ - x(\sigma)E_{CE}(M2_3C_2), \tag{2}$$

где $x(\sigma)$ – концентрация атома M2. В рамках метода кластерного разложения можно построить карту структура–фазовая стабильность и с ее помощью найти наиболее стабильные сплавы, упорядоченные или разупорядоченные, по всему интервалу концентрации $x$. Для расчета эффективной энергии сплава (1) в кластерное разложение были включены одно-, двух- и трехчастичные кластеры. Таким образом, имеется 15 констант эффективного кластерного взаимодействия: J0 соответствует пустому кластеру, J1 и J2 – одночастичным кластерам, J3–J10 – парным кластерам, J11–J14 – трехчастичным кластерам. Для определения констант эффективного кластерного взаимодействия были построены соответственно 15 базовых структур сплава с различной концентрацией $x$ на ячейках $2\times2\times1$ и $3\times3\times1$. Проверка точности расчета энергий в кластерном приближении (1) показала, что метод воспроизводит энергии, полученные из первых принципов, с точностью до $10^{-3}$ эВ.

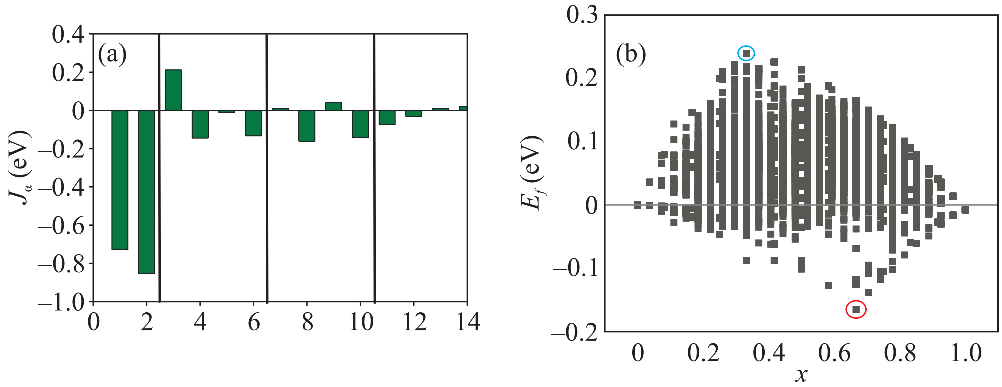


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Константы эффективного кластерного взаимодействия $\{J_\alpha\}$. Индексы по оси абсцисс соответствуют порядковому номеру константы (см. детали расчета); (b) – энергия образования ($E_f$) для разных концентраций атомов железа ($x$), рассчитанная в кластерном приближении. Красным и синим кружками отмечены наиболее стабильная и нестабильная структуры, соответственно

**3. Структура, стабильность, электронные и магнитные свойства $(\mathrm{Cr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x)_3\mathrm{C}_2$.** Первым шагом было определение стабильности $(\mathrm{Cr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x)_3\mathrm{C}_2$ в рамках кластерного приближения. Для этого были рассчитаны константы эффективного взаимодействия $\{J_\alpha\}$, которые показаны на рис. 1a.

Полученные константы эффективного взаимодействия были использованы для расчета энергии образования $E_f(\sigma)$ более чем $10^4$ различных возможных атомных конфигураций в $(\mathrm{Cr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x)_3\mathrm{C}_2$. Для построения различных атомных конфигураций использовались ячейки, содержащие от 5 до 45 атомов. Полученная карта, отображающая соотношение структура–стабильность, приведена на рис. 1b. Каждая точка представляет определенную атомную конфигурацию сплава, чья относительная стабильность определяется энергией образования $E_f(\sigma)$, рассчитанной согласно (2). Более стабильными являются атомные конфигурации, обладающие более низким значением энергии образования $E_f(\sigma)$.

Как видно из рис. 1b, наиболее стабильной оказывается полностью упорядоченная структура с концентрацией атомов Fe $x = 2/3$. В данной структуре атомы Fe занимают поверхностные слои, как это показано на рис. 2a, атомы хрома занимают центральный внутренний слой. Наиболее нестабильной является структура при концентрации атомов железа $x = 1/3$, где атомы Fe, наоборот, полностью занимают внутренний слой (рис. 2b). Таким образом, можно сделать вывод о наличии стабильного 2D сплава $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$, с полностью упорядоченными по слоям атомами переходных металлов. Отметим, что расчеты энергии родительских MAX фаз также указывают, что атомам металлов энергетически выгодно упорядочиваться по слоям.

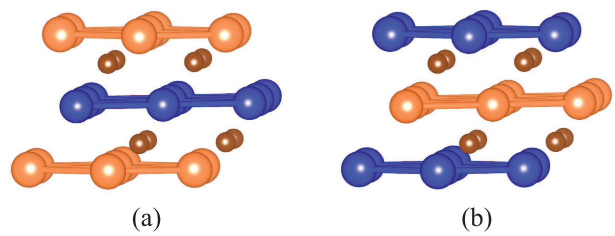


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Наиболее стабильная $((\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2)$ и (b) нестабильная $((\mathrm{Cr}_{2/3}\mathrm{Fe}_{1/3})_3\mathrm{C}_2)$ структуры для $(\mathrm{Cr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x)_3\mathrm{C}_2$, соответствующие отмеченным кружками на рис. 1b. Синими шарами показаны атомы хрома, оранжевыми шарами – атомы железа. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода

Для наиболее стабильной структуры $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ (рис. 2a), в рамках ТФП было определено основное магнитное состояние. Для этого были рассчитаны энергии различных возможных магнитных конфигураций. Анализ показал, что из рассмотренных конфигураций наиболее энергетически выгодными являются две магнитные конфигурации с ферромагнитным упорядочением магнитных моментов атомов железа и хрома в отдельных плоскостях: (1) ферромагнитное (ФМ) упорядочение плоскостей; (2) ферримагнитное (ФиМ) упорядочение, при котором плоскости, занятые атомами железа упорядочены ферромагнитно, а магнитные моменты атомов хрома в центральной плоскости направлены противоположно; а также магнитное упорядочение, где магнитные моменты атомов железа и хрома упорядочены антиферромагнитно (АФМ) как в одной, так и в разных плоскостях. Энергии этих трех магнитных конфигураций приведены в табл. 1 вместе с параметрами

**Таблица 1.** Параметр решетки в плоскости (a), намагниченность на ячейку и магнитные моменты на атомах железа и хрома (M), энергии,рассчитанные относительно энергии ФиМ состояния ($\Delta E = E - E_{\rm FiM}$) в "чистом" $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ и при функционализации поверхности фтором и кислородом, где NM означает НМ состояние, FM – ФМ состояние, FiM – ФиМ состояние, AFM – АФМ состояние

| | $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ | $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ O | $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ F |
|---|---|---|---|
| $a$, Å | 5.82 | 5.56 | 5.69 |
| M, $\mu_{B/\rm f.u.}$ | 2.10 | 0.10 | 5.9 |
| MCr, $\mu_B$ | 0.62 | 0.00 | 1.00 |
| $\mathrm{M_{Fe}}$, $\mu_B$ | 1.35 | 0.00 | 2.40 |
| $\Delta E_{\rm NM}$, эВ/ф.е. | 0.14 | 0.00 | 0.27 |
| $\Delta E_{\rm FM}$, эВ/ф.е. | 0.015 | 0.005 | 0.00 |
| $\Delta E_{\rm FiM}$, эВ/ф.е. | 0.00 | 0.002 | 0.21 |
| $\Delta E_{\rm AFM}$, эВ/ф.е. | 0.10 | 0.05 | 0.25 |

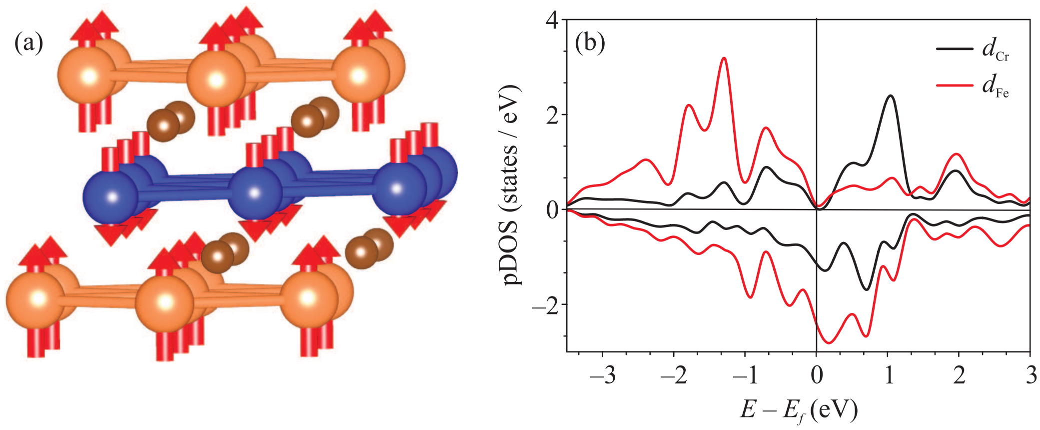


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Магнитное упорядочение в $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$. Синими шарами показаны атомы хрома, оранжевыми шарами – атомы железа. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода. Стрелки показывают направление магнитных моментов; (b) – Парциальные плотности состояний в MXене $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$. Черная линия соответствует $d$-состояниям хрома, красная линия – $d$-состояниям железа. Отрицательные значения на шкале энергий отвечают состояниям со спином вниз. Ноль на шкале энергий соответствует энергии Ферми

решетки и магнитными моментами атомов железа и хрома в основном состоянии. Кроме того, в табл. 1 приведена энергия немагнитного состояния (НМ).

Как видно из табл. 1 в $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ наиболее энергетически выгодным является ФиМ состояние (рис. 3а), при котором атомы железа, расположенные в поверхностных слоях, имеют магнитные моменты $\mu \approx 1.35\,\mu_B$, тогда как на атомах хрома, расположенных в центральном слое, магнитный момент направлен противоположно моментам железа и имеет меньшую величину ($\mu \approx 0.62\,\mu_B$). Отметим, учет спин-орбитального взаимодействия показал, что наиболее энергетически выгодным является направление магнитных моментов вдоль оси $c$.

Как видно из рис. 3b, где приведены рассчитанные парциальные плотности состояний, $(\mathrm{Cr}_{1/3}\mathrm{Fe}_{2/3})_3\mathrm{C}_2$ является металлом. Электронные состояния вблизи энергии Ферми занимают $d$-электроны железа и хрома, образуя $d$-зоны. $d$-электроны железа занимают преимущественно состояния со спином вверх, тогда как состояния со спином вниз заняты лишь частично, что приводит к формированию положительного магнитного момента на атоме железа (табл. 1). В атоме хрома все $d$-орбитали со спином вверх и вниз частично заполнены с небольшим преобладанием состояний со спином вниз, что формирует небольшой отрицательный момент на атоме хрома. Такое распределение электронов в результате приводит к наблюдаемой ФиМ структуре.

**4. Влияние функционализации поверхности на магнитные свойства MXенов.** В процессе синтеза к поверхностным слоям MXенов могут присоединяться функциональные группы T = F, O, OH и т.д .Состав этих групп определяется химией среды во время травления и последующей обработки MXенов. Такая функционализация поверхности может привести к изменениям свойств MXенов, в том

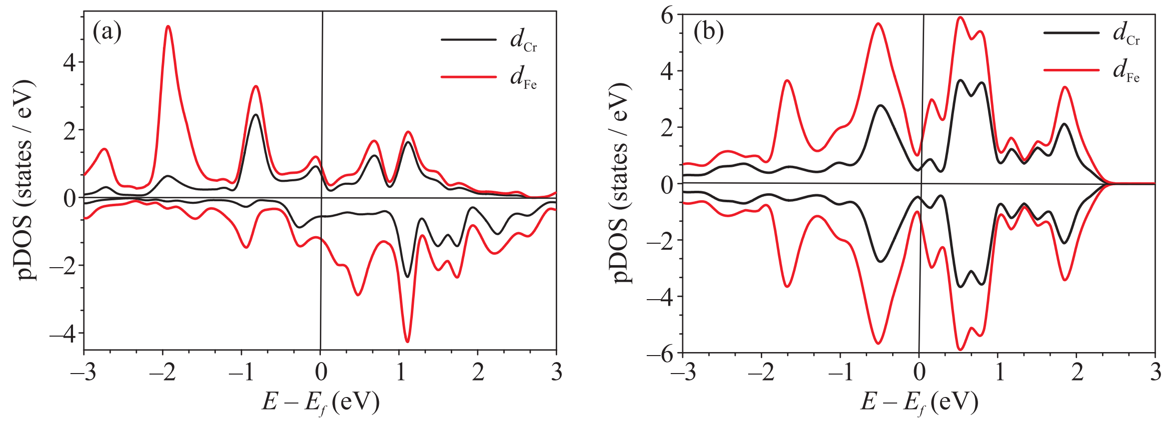


Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальные плотности состояний $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2$ при функционализации его поверхности: (a) – фтором и (b) – кислородом. Черная линия соответствует $d$-состояниям хрома, красная линия – $d$-состояниям железа. Отрицательные значения на шкале энергий отвечают состояниям со спином вниз. Ноль на шкале энергий соответствует энергии Ферми

числе магнитных [16, 21, 29]. На поверхностях MXенов есть несколько позиций, где могут располагаться функциональные группы [21, 29]. Как показывают наши предварительные оценки и анализ литературы, наиболее энергетически выгодной является структура, в которой функциональные группы локализованы выше октаэдрических междоузлий поверхностных слоев атомов переходных металлов над атомами углерода.

Для анализа влияния поверхностных функциональных групп на структурные и магнитные свойства рассматриваемых MXенов были определены энергетически выгодные магнитные упорядочения при функционализации поверхности MXенов фтором и кислородом. При функционализации поверхности как фтором,так и кислородом, $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2T_2$ остается металлом (рис. 4). Однако, функционализация поверхности влияет на магнитные свойства рассматриваемого MXена. При функционализации поверхности MXена кислородом $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2O$ магнитные моменты на поверхностных и внутренних атомах исчезают, и соединение становится немагнитным (табл. 1). В случае же функционализации поверхности MXена фтором, $(Cr_{1/3}3Fe_{2/3})_3C_2F$ остается магнитным, но его магнитное состояние меняется с ФиМ на ФМ состояние (рис. 5, табл. 1). Магнитные моменты, как на поверхностных атомах железа, так и на внутренних атомах хрома увеличиваются по сравнению с их величинами в MXене со свободной поверхностью. Изменение магнитного состояния и увеличение магнитных моментов связано с перестройкой плотности занятых состояний $d$-электронов атомов железа и хрома вблизи энергии Ферми (рис. 4). Пики от $d$–электронов железа и хрома со спином вверх смещаются ниже по энергии и локализуются ниже энергии Ферми, тогда как пики, соответствующие $d$-электронам со спином вниз смещаются выше энергии Ферми. В результате на атомах, как железа, так и хрома формируются положительные магнитные моменты, и магнитное состояние становится ФМ (рис. 4a). Наоборот, в случае функционализации поверхности кислородом на плотности состояний, как для спинов вверх, так и спинов вниз образуется ярко выраженная двухпиковая структура ниже энергии Ферми, причем все состояния оказываются заполненными, в результате магнитный момент на атомах железа и хрома исчезают (рис. 4b).

Возможный механизм влияния функциональной группы на магнитные свойства MXена заключается в следующем. У атома кислорода имеется две незаполненные $p$-орбитали, в отличие от фтора, у которого не заполнена только одна $p$-орбиталь. Поэтому в случае функционализации поверхности фтором для образования связи Fe–F единственное $d$-состояние со спином вниз опустошается (рис. 4a), и в результате формируется магнитный момент (табл. 1) с большим значением, чем для MXена со свободной поверхностью и при функционализации поверхности MXена кислородом. И, наоборот, при функционализации поверхности кислородом два состояния со спином вверх отдают свои электроны для образования связи Fe–O. Это приводит к наблюдаемому смещению плотности электронных состояний со спином вверх вправо к энергии Ферми и состояний со спином вниз влево к энергии Ферми (рис. 4b). Результатом этого является исчезновение магнитного момента при функционализации поверхности кислородом.

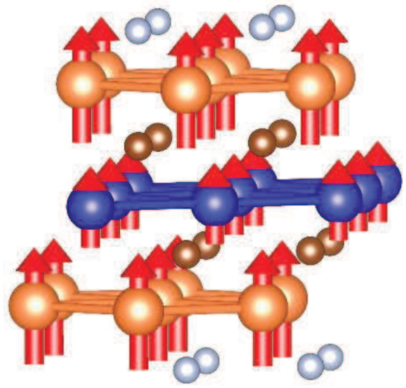

Рис. 5. (Цветной онлайн) Магнитное упорядочение в MXене $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2$ при функционализации его поверхности фтором. Синими шарами показаны атомы железа, оранжевыми шарами – атомы хрома. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода. Стрелки показывают направление магнитных моментов. Функциональные группы на поверхности MXена показаны красными и белыми шарами для кислорода и фтора, соответственно

**5. Заключение.** Расчет в рамках ТФП и метода кластерного разложения стабильности, магнитных и электронных свойств 2D сплава $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$ из семейства MXенов показывает, что данное соединение является перспективным 2D магнитным материалом. Обнаружено, что при концентрации железа $x = 2/3$ сплав $(Cr_{2/3}Fe_{1/3})_3C_2$ обладает фазовой стабильностью и является ферримагнетиком с намагниченностью $M = 2.1\,\mu_B$/ф.е. Функционализация поверхности фтором приводит к формированию ФМ-состояния, причем намагниченность увеличивается до $\approx 6\,\mu_B$/ф.е. Таким образом, мы показали принципиальную возможность получения двумерного ферромагнитного сплава, содержащего хром и железо для применения в электронной индустрии. Как уже упоминалось, большинство MXенов получают путем селективного травления слоя A-атомов из соответствующей MAX-фазы, в процессе которого к поверхностным слоям MXена присоединяются функциональные группы T = F, O, OH, определяемые химией среды во время травления. Поскольку наиболее интересный результат наблюдается при функционализации поверхности MXена фтором, то можно рекомендовать при синтезе использовать F-содержащие растворы, такие как плавиковая кислота HF или фторид лития LiF. Более того, можно ожидать, что функционализация поверхности других двумерных магнитных веществ также может привести к изменению магнитного упорядочения между слоями, что представляет интерес для дальнейших исследований.

Расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов "Комплекса исследовательских установок моделирования и обработки данных мегакласса" НИЦ "Курчатовский институт" (http://ckp.urcki.ru).

**Финансирование работы.** Исследование выполнено за счет гранта российского научного фонда # 23-22-10020 https://rscf.ru/project/23-22-10020/, Красноярского краевого фонда науки.

**Конфликт интересов.** Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Y. Gogotsi and B. Anasori, ACS Nano **13**, 8491 (2019).
2. W. Hong, B. C. Wyatt, S. K. Nemani, and B. Anasori, MRS Bull. **45**(10), 850 (2020); https://doi.org/10.1557/mrs.2020.251.
3. B. Anasori, Y. Xie, M. Beidaghi, J. Lu, B. C. Hosler, L. Hultman, P. R. C. Kent, Y. Gogotsi, and M. W. Barsoum, ACS Nano **9**, 9507 (2015).
4. B. Anasori, C. Shi, E. J. Moon, Y. Xie, C. A. Voigt, P. R. C. Kent, S. J. May, S. J. L. Billinge, M. W. Barsoum, and Y. Gogotsi, Nanoscale Horizons **1**, 227 (2016).
5. C. Si, J. Zhou, and Z. Sun, ACS Appl. Mater. Interfaces **7**, 17510 (2015).
6. M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, C. Y. Chung, N. S. Venkataramanan, M. Estili, Y. Sakka, and Y. Kawazoe, Adv. Function. Mater. **23**, 2185 (2013).
7. J. He, P. Lyu, and P. Nachtigall, J. Mater. Chem. C **4**, 11143 (2016).
8. J. Yang, M. Naguib, M. Ghidiu, L. M. Pan, J. Gu, J. Nanda, J. Halim, Y. Gogotsi, and M. W. Barsoum, J. Am. Ceram. Soc. **99**, 660 (2016).
9. Z. Shen, Z. Wang, M. Zhang, M. Gao, J. Hu, F. Du, Y. Liu, and H. Pan, Materialia **1**, 114 (2018).
10. D. Pinto, B. Anasori, H. Avireddy, C. E. Shuck, K. Hantanasirisakul, G. Deysher, J. R. Morante, W. APorzio, H. N. Alshareef, and Y. Gogotsi, J. Mater. Chem. A **8**, 8957 (2020).
11. S. Yazdanparast, S. Soltanmohammad, A. Fash-White, G. Tucker, and G. L. Brennecka, ACS Appl. Mater. Interfaces **12**, 20129 (2020).
12. M. Naguib, M. W. Barsoum, and Y. Gogotsi, Adv. Mater. **33**, 2103393 (2021).
13. L. Li, Comput. Mater. Sci. **124**, 8 (2016).
14. R. Meshkian, Q. Tao, M. Dahlqvist, J. Lu, L. Hultman, and J. Rosen, Acta Mater. **125**, 476 (2017).
15. K. Hantanasirisakul, B. Anasori, S. Nemsak, J. L. Hart, J. Wu, Y. Yang, R. V. Chopdekar, P. Shafer, A. F. May, E. J.Moon, J. Zhou, Q. Zhang, M. L. Taheri, S. J. May, and Y. Gogotsi, Nanoscale Horizons **5**, 1557 (2020).
16. T. L. Tan, H. M. Jin, M. B. Sullivan, B. Anasori, and Y. Gogotsi, ACS Nano **11**, 4407 (2017).
17. Y. Yue, Journ. Magn. Magn. Mater. **434**, 164 (2017).

18. E. M. Agapov, I. A. Kruglov, and A. A. Katanin, 2D Mater. **11**, 025001 (2024).
19. J. M. Sanchez, F. Ducastelle, snd D. Gratias, Physica **128A**, 334 (1984).
20. D. De Fontaine, Physics **47**, 33 (1994).
21. J. Yang, X. Zhou, X. Luo, S. Zhang, and L. Chen, Appl. Phys. Lett. **109**, 203109 (2016).
22. J. Yang, S. Zhang, A. Wang, R. Wang, C. .K. Wang, G. P. Zhang, and L. Chen, Nanoscale **10**, 19492 (2018).
23. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
24. P. E. Blochl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
25. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
26. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
27. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
28. S. Steiner, S. Khmelevskyi, M. Marsman, and G. Kresse, Phys. Rev. B **93**, 224425 (2016).
29. S. Bae, Y.-G. Kang, M. Khazaei, K. Ohno, Y.-H. Kim, M. J. Han, K. J. Chang, and H. Raebiger, Materials Today Advances **9**, 100118 (2021).