

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 МАХ-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 С-срез (0001), S-срез (01 $\bar{1}\bar{1}$), N-срез (11 $\bar{2}\bar{3}$), и R-срез (0 $\bar{1}\bar{1}\bar{2}$). С помощью метода функционала электронной плотности рассчитаны возможные магнитные свойства сплошных ультратонких пленок Mn_2GaC при условии сохранения однородных растяжений/сжатий решетки МАХ-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 МАХ-фазы Mn_2GaC наиболее вероятен на подложках $Al_2O_3(0001)$, $Al_2O_3(11\bar{2}\bar{3})$ и $Al_2O_3(0\bar{1}\bar{1}\bar{2})$.

DOI: 10.31857/S1234567822170098, EDN: jtczql

Введение. Известные с 1960-х гг. соединения бескислородной керамики, так называемые МАХ-фазы, в последнее десятилетие переживают настоящее второе рождение. Это семейство фаз, с общей формулой $M_{n+1}AX_n$, где М – переходный металл, А – элементы подгруппы А 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 МАХ-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 МАХ-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 МАХ-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 МАХ-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 МАХ-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 МАХ-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 парамет-

ры метода поиска интерфейсов. В качестве критерия совпадения близкорасположенных узлов решеток было выбрано расстояние 0.46 \AA , которое эквивалентно смещениям атомов до 0.23 \AA , что соответствует примерно 12 % от длин связей Mn-C и Al-O. Для толщины интерфейсного слоя было взято значение 2.8 \AA , что полностью исключает взаимодействие атомов, находящихся по разную сторону от интерфейсного региона, так как наибольший атомный радиус не превышает 1.4 \AA (марганец). В качестве критерия плотной упаковки кристаллографических направлений, как и в прошлых работах, было выбрано относительно невысокое значение $(6 \text{ \AA})^{-1}$. Максимальное рассогласование векторов трансляций на рассматриваемых интерфейсах было ограничено по величине деформации интерфейса $\tilde{\epsilon} = (\epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{xx}\epsilon_{yy} + \epsilon_{xy}^2)^{0.5}$, где $\epsilon_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора деформации. Все интерфейсы-кандидаты с деформацией $\tilde{\epsilon}$ более 5 % отбрасывались. Поскольку величина $\tilde{\epsilon}$ 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 МАХ-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 ($01\bar{1}1$), 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 $\text{Mn}_2\text{GaC}/\text{Al}_2\text{O}_3$

#	NCS	(hkil) MAX	(hkil) Al_2O_3	Срез Al_2O_3	[uvw] MAX	[uvw] Al_2O_3	$\bar{\epsilon}$,	$\delta S/S_0$, %
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 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 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 $\text{MgO}(111)$. В свою очередь формирование тонких пленок МАХ-фаз, содержащих атомы хрома ($\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x$) $_2\text{GaC}$, наблюдалось на различных подложках, в том числе на $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ [10]. Преимущественная ориентация таких пленок наблюдается на плоскость ($\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x$) $_2\text{GaC}(0001)$. Однако текстурирование МАХ-фазы обнаруживается и на плоскости (01 $\bar{1}$ 3) и (10 $\bar{1}$ 0). При этом кристаллиты данных ориентаций не имеют интерфейса с поверхностью $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. 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 МАХ-фазы (0001) на подложке $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. Однако нельзя не отметить большую величину сжатия, которому подвергается фаза Mn_2GaC при таком варианте синтеза. Даже при высокой степени пластичности, присущей МАХ-фазам [1, 12], это препятствует росту сплошной монокристаллической пленки и способствует формированию кристаллитов других ориентаций на боковых гранях МАХ-фазы (0001) для понижения полной энергии. Стоит отметить, что для этой подложки имеется другое ориентационное соотношение, # 4 $\text{Mn}_2\text{GaC}(1\bar{1}02)/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$, 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 соответствуют пространственным типам сапфировых подложек, $\text{Al}_2\text{O}_3(10\bar{1}0)$ М-срез и $\text{Al}_2\text{O}_3(11\bar{2}0)$ А-срез, они также

обладают достаточно низкими показателями деформации. Вследствие того, что пленка МАХ-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, $\text{Mn}_2\text{GaC}(11\bar{2}\bar{3})/\text{Al}_2\text{O}_3(01\bar{1}\bar{1})$ 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 металла в МАХ-фазе Mn_2GaC [18] даже без применения дополнительных коррекций типа GGA + U, и то, что данное приближение в целом хорошо применимо к семейству МАХ-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 свободы 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-

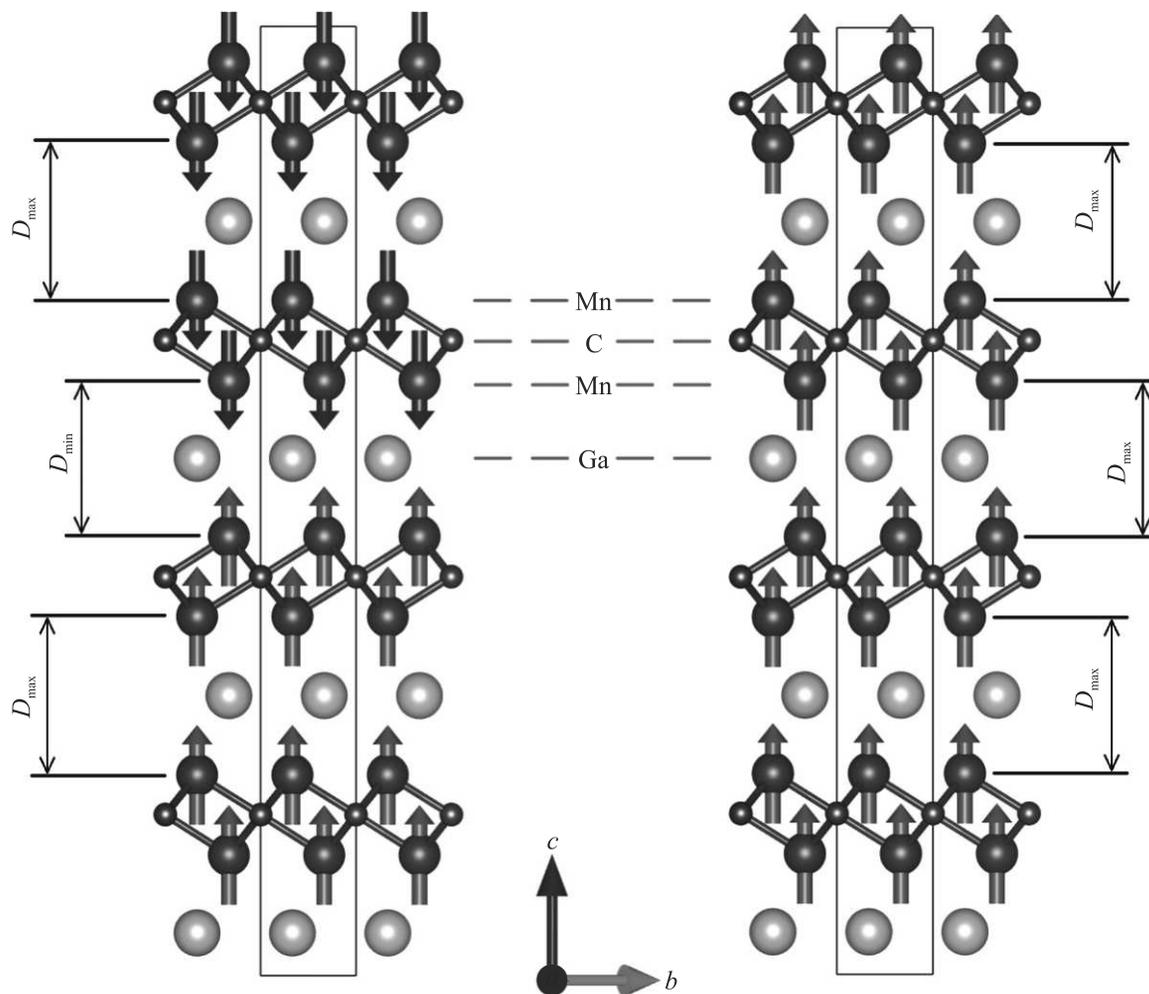


Рис. 1. (Цветной онлайн) Расчетные ячейки АФМ и ФМ фаз Mn_2GaC

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 МАХ-фазы Mn_2GaC .

После определения равновесного состояния Mn_2GaC исследовалась зависимость магнитных свойств от сжатия/растяжения решетки МАХ-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 Mn_2GaC на Al_2O_3 . Для теоретического исследования магнитных свойств МАХ-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 МАХ-фазы: основное состояние

Таблица 2. Магнитные свойства напряженного Mn_2GaC на различных подложках Al_2O_3 : ΔE – разница энтальпии с равновесной фазой; $\Delta E(\text{ФМ-АФМ})$ – 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)

#	$\text{Mn}_2\text{GaC}/\text{Al}_2\text{O}_3$	ΔE , мэВ/f.u.	$\Delta E(\text{ФМ-АФМ})$, 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	(112 $\bar{3}$)//(011 $\bar{1}$) 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)//(112 $\bar{3}$) 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	(112 $\bar{6}$)//(011 $\bar{2}$) 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	(1 $\bar{0}$ 14)//(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)//(112 $\bar{0}$) 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	(112 $\bar{0}$)//(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 ρ_{\uparrow} и ρ_{\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 МАХ-фазы, однако может привести к увеличению магнитного момента, как, например, в случае $\text{Mn}_2\text{GaC}(1\bar{1}02)/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$.

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 МАХ-фаз (за исключением $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$), а также рассчитаны магнитные свойства таких пленок и показана возможность управления магнитным упорядочением в системе $\text{Mn}_2\text{GaC}/\text{Al}_2\text{O}_3$, что крайне актуально для применения данных гетероструктур в спинтронике.

Обнаружено, что предсказанный как наиболее вероятный интерфейс действительно соответствует экспериментально наблюдаемой ориентации пленки МАХ-фазы (0001) на подложке $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. Дру-

гие 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 $Mn_2GaC(11\bar{2}\bar{6})//Al_2O_3(0\bar{1}1\bar{2})$ превышает спиновую поляризацию ФМ-фазы объемного Mn_2GaC и достигает 28 %.

В целом, результаты предсказания интерфейсов МАХ-фазы с сапфиром указывают на то, что большой интерес могут представлять подробные исследования по синтезу на новых типах подложек, $Al_2O_3(1\bar{1}00)$ М-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).