

05,13

Первопринципные расчеты магнитной анизотропии пленок Fe и Co, разделенных прослойкой немагнитных металлов

© М.В. Мамонова, М.Ю. Макеев, Д.С. Калинин, А.А. Зенова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,
Омск, Россия

E-mail: mamonovamv@omsu.ru

Поступила в Редакцию 8 июля 2021 г.

В окончательной редакции 13 июля 2021 г.

Принята к публикации 16 июля 2021 г.

Представлены результаты численных расчетов магнитных характеристик монослойных пленок Co и Fe на поверхности Cu и Pt с использованием пакета программ VASP. Рассчитаны значения разности полной энергии антиферромагнитной и ферромагнитной конфигураций в зависимости от параметров сходимости и толщины немагнитного материала. Определены значения магнитной анизотропии и магнитного момента атомов в структурах Co/Cu/Co, Fe/Pt/Fe, Co/Pt/Co, Pt/Co/Cu/Co/Pt в зависимости от ориентации поверхностной грани. Для граней (110) и (111) подтверждено явление переориентации в структуре Co/Cu/Co, когда анизотропия пленок кобальта, параллельная плоскости поверхности, сменяется перпендикулярной анизотропией из-за внедрения в структуру ультратонкой пленки платины.

Ключевые слова: Магнитная анизотропия, ультратонкие магнитные пленки.

DOI: 10.21883/FTT.2021.11.51577.03s

1. Введение

В последнее время изучение свойств тонких магнитных пленок вызывает большой интерес у исследователей. Магнитные тонкие пленки используют в качестве основного материала для создания магнитных записывающих устройств. В связи с быстрым прогрессом, происходящим в индустрии магнитной записи, расчет магнитных характеристик в пленках Co и Fe, стал важным вопросом в области физики твердого тела.

Одной из актуальных проблем является исследование магнитных свойств многослойных структур [1], в которых реализуется эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС), из-за их широкого применения в качестве считывающих головок жестких дисков, запоминающих устройств и устройств спинтроники, свойства которых сильно зависят от величины магнитной анизотропии. Многослойные структуры с эффектами ГМС состоят из ферромагнитных слоев, разделенных немагнитными слоями. Осциллирующее РККИ-взаимодействие приводит к тому, что постоянная межслоевого обмена колеблется с изменением расстояния между ферромагнитными слоями. Регулируя толщину немагнитного материала между двумя магнитными слоями, можно изменить взаимодействие с ферромагнитного на антиферромагнитное. Поэтому важно теоретически предсказать, при какой толщине немагнитного слоя антиферромагнитная конфигурация будет более энергетически выгодной.

Поскольку текущая плотность магнитного накопителя приближается к суперпарамагнитному пределу, считается, что более высокие поверхностные плотности могут быть достигнуты посредством перпендикулярной записи из-за более низкого суперпарамагнитного предела в

магнитных средах с перпендикулярной анизотропией [2]. В то время как большинство систем обладают магнитной анизотропией в плоскости пленок, в последние годы многослойные структуры, состоящие из структур Co/Pt, привлекают внимание из-за их перпендикулярной магнитной анизотропии и, следовательно, потенциала для приложений записи данных сверхвысокой плотности [3–6]. Перпендикулярная анизотропия в этих системах пропорциональна площади границы раздела [7]. Если толщина слоя Co меньше критического значения (1 нм), анизотропия поверхности превышает анизотропию формы, и многослойная система становится перпендикулярно намагниченной [8].

Чтобы рассчитать энергию магнитной анизотропии (МАЭ), мы должны оценить разницу между полными энергиями магнитного материала для различных ориентаций намагниченности. Численно это очень сложная задача из-за более сильной зависимости от параметров расчета. Для систем Co/Pt(111) и Fe/Pt(111) опубликован ряд исследований магнитных моментов и МАЭ [9,10]. Все эти расчеты основаны на подходе функции Грина в рамках экранированного полностью релятивистского метода Кона–Корринги–Ростокера и приближениях локальной плотности и идеализированной геометрии, воспроизводящей объемную структуру подложки.

Настоящая работа посвящена исследованию МАЭ монослойных пленок Fe и Co на Cu и Pt с использованием формализма SDFT и расчета самосогласованной зонной структуры с помощью программного пакета VASP. Различия в результатах расчетов МАЭ разными методами анализировались в статье [11]. Мы исследовали не только ферромагнитные состояния, как в статьях выше,

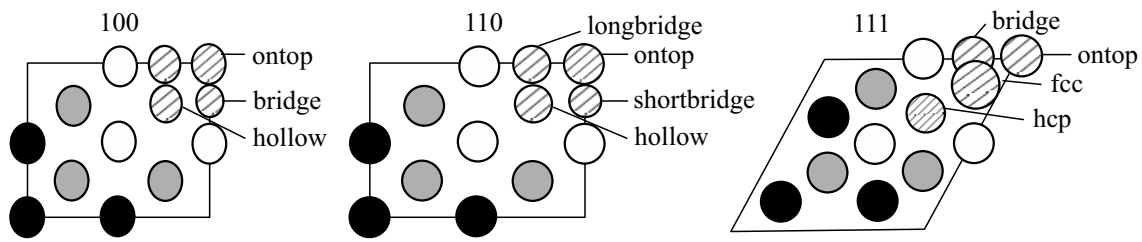


Рис. 1. Конфигурация положений адатомов в зависимости от ориентации поверхностной грани.

но и антиферромагнитные конфигурации с полной релаксацией всей системы, состоящей из адатома и подложки. Кроме того, в отличие от наиболее распространенных расчетов для поверхностной грани (111), мы исследовали остальные ориентации поверхностных граней, в частности (100), поскольку она дает квадратную ячейку поверхности, которая используется в наших расчетах Монте-Карло.

Результаты эксперимента [12] и наших расчетов методом Монте-Карло [13,14] показали, что случай перпендикулярной анизотропии приводит к полезному увеличению магнитосопротивления в структуре с толщиной ферромагнитных пленок в $N < 11$ монослоев. Поэтому в настоящей работе ставилась задача, исследовать первопринципными расчетами экспериментально наблюдаемое на примере структуры Co/Cu/Co явление переориентации для пленок кобальта с анизотропией в плоскости, которая изменяется на анизотропию перпендикулярно плоскости из-за напыления поверх структуры сверхтонкой пленки из платины.

2. Модель и методы

В основе расчетов из первых принципов электронной и кристаллической структуры магнитных материалов лежит теория функционала спиновой плотности.

Таблица 1. Значения полной энергии E , eV для Fe/Pt/Fe и Co/Pt/Co

Грань	Положение адатома	Fe/Pt	Co/Pt
100	ontop	-42.7	-39.60
	hollow	-45.1	-42.34
	bridge	-44.0	-41.23
110	ontop	-41.3	-37.20
	hollow	-45.3	-42.71
	longbridge	-43.6	-40.56
	shortbridge	-42.1	-39.24
111	ontop	-44.2	-41.21
	hcp	-45.3	-42.00
	fcc	-44.8	-42.61
	bridge	-45.3	-42.60

Мы использовали для моделирования мультислойных структур программный пакет VASP [15] с помощью метода PAW с PBE версией обобщенного градиентного приближения (GGA). Намагниченность учитывалась в двух вариантах: коллинеарном, когда магнитный момент задается скалярной величиной, и неколлинеарном, когда магнитный момент задается вектором. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводилось с использованием k -сетки, построенной по методу Монкхорста-Пака. Энергия обрезания базиса плоских волн была выбрана равной $E_{cut} = 500$ eV при толщине слоя вакуума 5 \AA . Размер k -сетки варьировался от $5 \times 5 \times 1$ до $55 \times 55 \times 1$.

Атом пленки может адсорбироваться на подложке в различных положениях, представленных на рис. 1. Поэтому были проведены расчеты полной энергии суперъячейки в зависимости от поверхностной грани и положения адатома для монослойных пленок Fe и Co на подложке Pt толщиной в 5 монослоев, результаты которых представлены в табл. 1.

Можно сделать вывод, что наиболее энергетически выгодным положением атомов как Fe, так и Co на подложке Pt является положение адатомов в междоузлии (hollow для граней 100 и 110 и hcp или fcc для 111). В дальнейших исследованиях система представляла собой пластину из немагнитного металла с ориентацией поверхностной грани с низкими значениями индекса Миллера, с адсорбированными в положении междоузлий на ней ферромагнитными пленками с двух сторон для сохранения инверсионной симметрии.

Для моделирования многослойной структуры использовалась периодическая суперъячейка с постоянной решетки, соответствующей подложке, полученной в результате расчетов с учетом оптимизации параметров решетки. Рассчитанные равновесные параметры решетки $a = 3.6367(5) \text{ \AA}$ для Cu и $a = 3.87125(3) \text{ \AA}$ для Pt близки к экспериментальным значениям — для Cu $a = 3.6153 \text{ \AA}$ [16] и для Pt $a = 3.9158 \text{ \AA}$ [17].

2.1. Исследование выгоды различных спиновых конфигураций

Сначала были проведены расчеты для монослойной ферромагнитной пленки на поверхности Pt(100) в зависимости от параметров сходимости и толщины немагнитной прослойки. Проводилась полная релаксация всех слоев суперъячейки.

Мы рассчитали полную энергию для ферромагнитной (ФМ) и антиферромагнитной (АФМ) спиновых конфигураций (рис. 2). Введем величину $\Delta E = E_{\text{afm}} - E_{\text{fm}}$ — разность полной энергии систем, когда магнитные моменты атомов в пленках по обе стороны от пластины направлены противоположно (антиферромагнитная конфигурация) и сонаправленно (ферромагнитная конфигурация). При $\Delta E < 0$ антиферромагнитная ориентация более энергетически выгодна. При $\Delta E > 0$ более энергетически выгодна ферромагнитная ориентация.

Изучение сходимости по количеству k -точек, точек разбиения сетки при интегрировании в первой зоне Бриллюэна, показало, что для ΔE сходимость (рис. 4) намного хуже, чем для полной энергии (рис. 3). И мы должны использовать большие значения количества

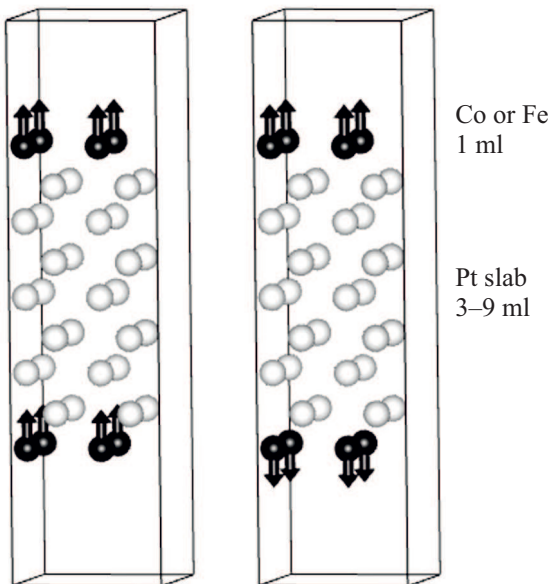


Рис. 2. Кристаллическая структура суперъямки и ориентация магнитных моментов атомов в пленке.

k -точек, размер сетки порядка $50 \times 50 \times 1$, в то время как для расчета энергии адсорбции и магнитных моментов обычно достаточно размера сетки около $15 \times 15 \times 1$. Использование недостаточного количества k -точек может даже привести к изменению знака ΔE , так как показано на рис. 6, а.

Однако, стоит заметить, что такое значительное увеличение числа k -точек приводит к резкому увеличению ресурсов компьютера: времени вычислений и, самое главное, памяти (рис. 5).

Результаты расчетов ΔE для пленок Fe и Co адсорбированных с двух сторон пластины Pt(100) в зависимости от толщины пластины приведены на рис. 6.

Расчеты показали, что для пленки Co с толщиной в 1 и 2 монослоя ферромагнитная ориентация более энергетически выгодна для всех рассматриваемых толщин пластины Pt, и сменяется антиферромагнитной только для трехслойной пленки Co при толщине Pt большей 5 монослоев.

Для монослойной пленки Fe выгодна антиферромагнитная ориентация для всех рассматриваемых толщин Pt. Но значение ΔE для Fe намного меньше, чем для Co, около 1 meV.

Таким образом, можно сделать вывод, что возникновение антиферромагнитного взаимодействия между двумя магнитными слоями зависит не только от толщины немагнитного материала, но и от толщины магнитных слоев.

2.2. Расчеты магнитной анизотропии

Далее мы рассмотрим многослойные структуры с толщиной каждого слоя 3 ml (рис. 7) в зависимости от направления намагниченности и ориентации поверхностной грани.

Энергия магнитной анизотропии (МАЭ) $E_{\text{MA}} = E_{\perp} - E_{\parallel}$ представляет собой разность полной энергии систем с намагниченностью, направленной перпенди-

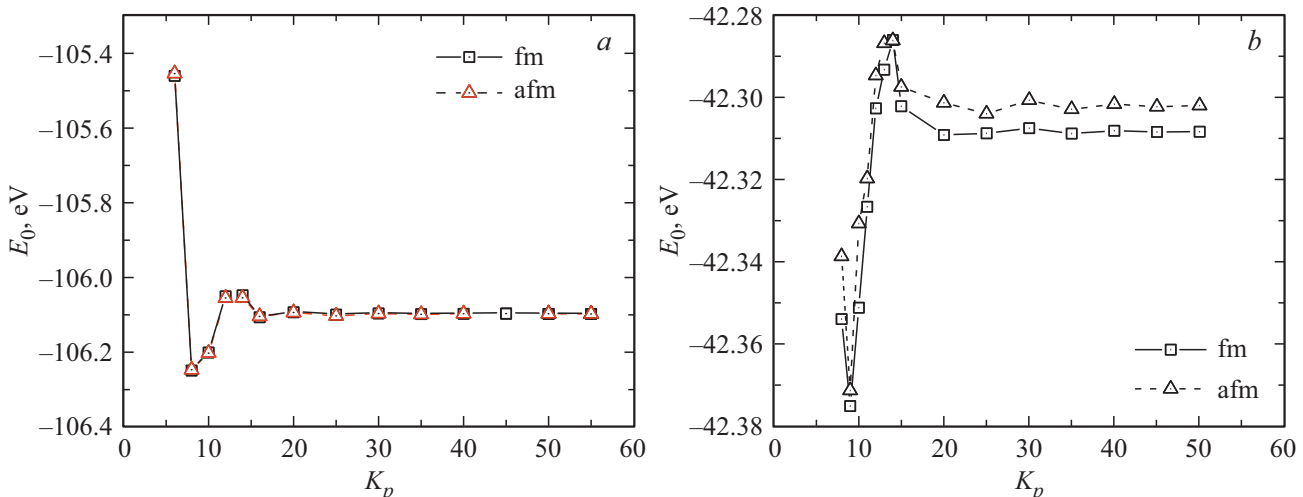


Рис. 3. Сходимость полной энергии от числа k -точек (K_p) для Fe/Pt/Fe (а) и Co/Pt/Co (б).

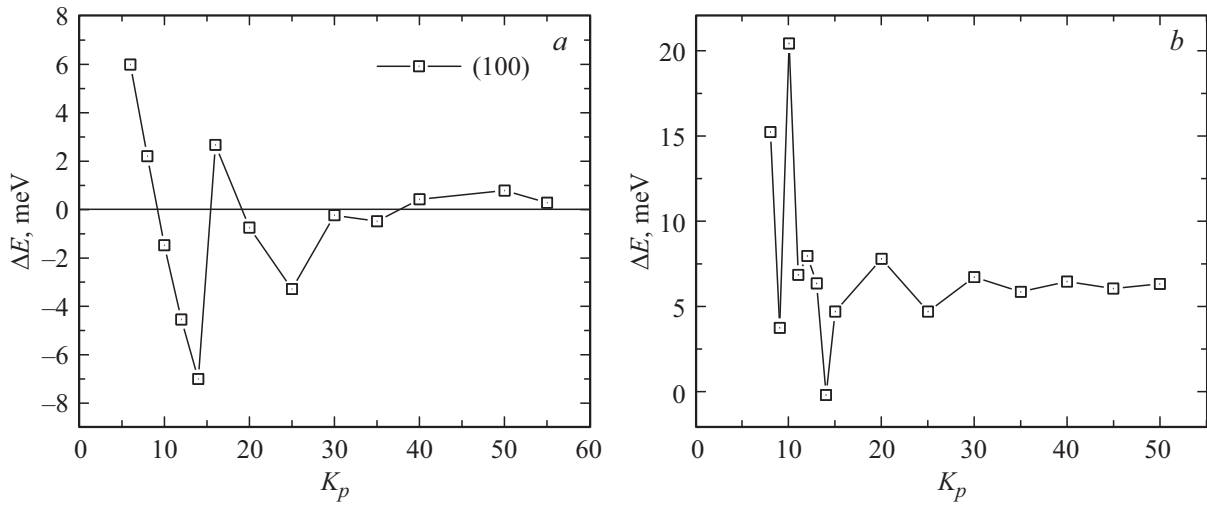


Рис. 4. Сходимость разности энергий АФМ и ФМ конфигураций от числа k -точек (K_p) для Fe/Pt/Fe (a) Co/Pt/Co (b).

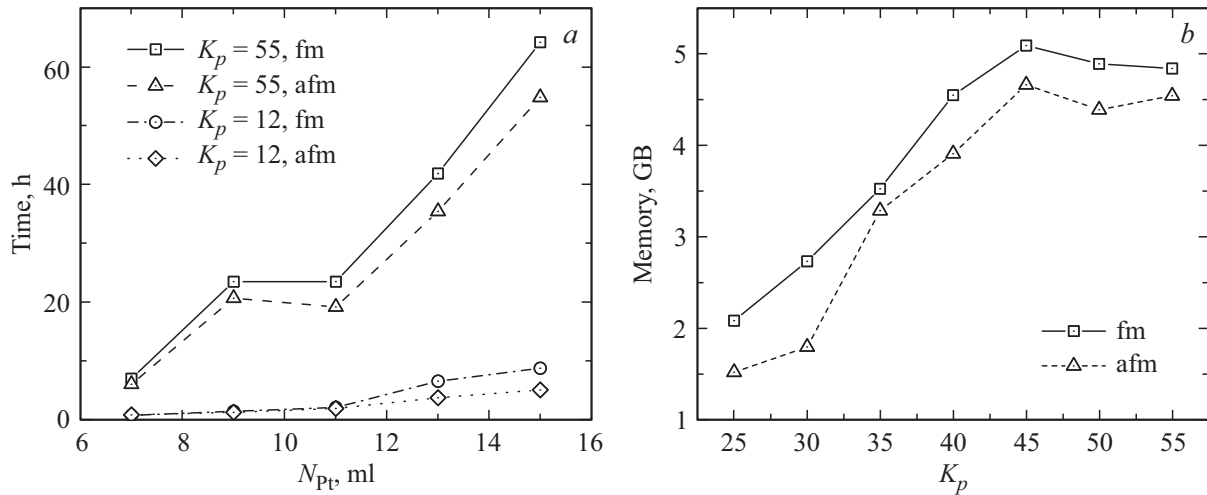


Рис. 5. Зависимость (a) времени счета от толщины пластины Pt при размере сетки $12 \times 12 \times 1$ и $55 \times 55 \times 1$ (b) требуемой памяти на ядро от количества k -точек (K_p) АФМ и ФМ конфигураций для Fe/Pt/Fe.

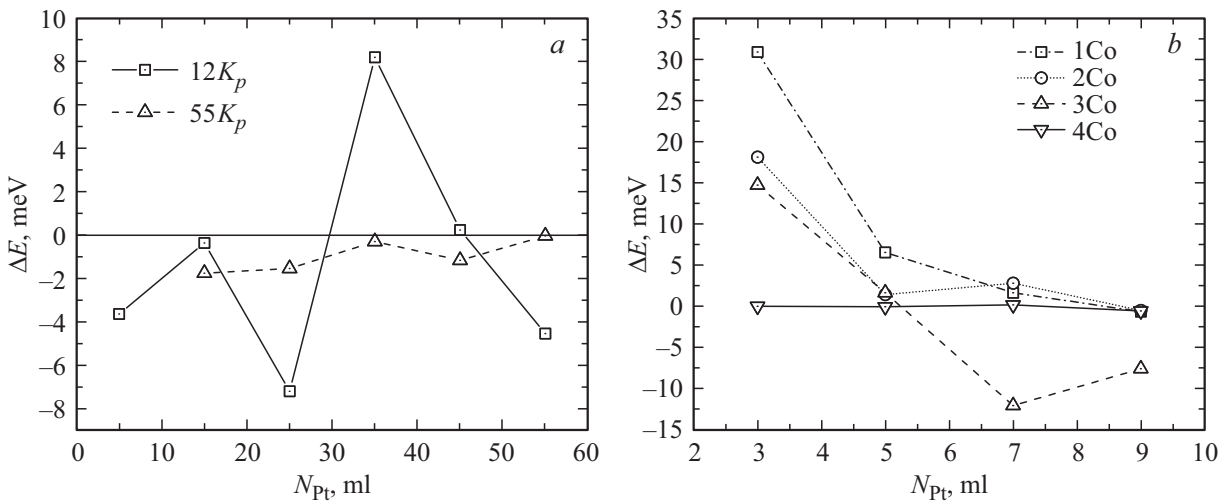


Рис. 6. Зависимость разности энергий АФМ и ФМ конфигураций от толщины пластины Pt для Fe/Pt/Fe (a) и Co/Pt/Co (b) при различной размерности сетки.

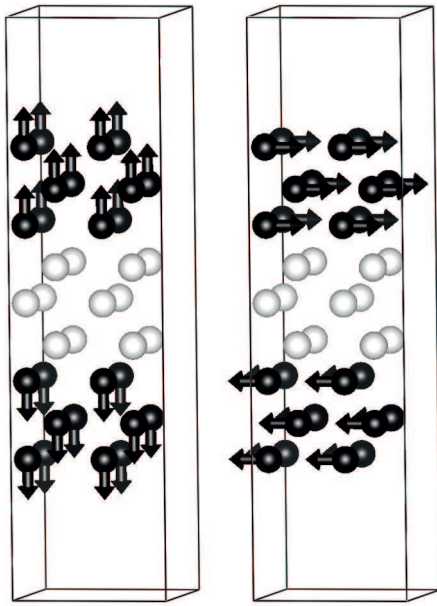


Рис. 7. Кристаллическая структура суперрешетки и ориентация магнитных моментов атомов в пленке.

кулярно и параллельно плоскости поверхности. При $E_{MA} < 0$ более энергетически выгодна ориентация магнитных моментов перпендикулярно поверхности, что соответствует анизотропии легкая ось. При $E_{MA} > 0$ ориентация магнитных моментов параллельно поверхности более энергетически выгодна, что соответствует анизотропии легкая плоскость.

Результаты расчетов разности полной энергии для различных спиновых конфигураций структур на основе пленок кобальта, с немагнитной прослойкой платины и меди, а также с нанесенной поверх структуры Co/Cu/Co пленки из платины представлены в табл. 2 и 3.

Результаты расчетов разности энергий АФМ- и ФМ-конфигураций ΔE показали, что для пленок кобальта с медной прослойкой ФМ-конфигурация более выгодна для грани (100), а АФМ для остальных. Нанесение дополнительного верхнего слоя Pt меняет знак ΔE только для грани (111). Для пленок кобальта с прослойкой из платины ФМ-конфигурация более выгодна почти для все рассмотренных случаев.

Из эксперимента известно [12], что структура Co/Cu характеризуется слабой магнитной анизотропией типа легкая плоскость с намагниченностью, ориентированной в плоскости пленки. Однако если на пленки кобальта нанести ультратонкие пленки платины, полученная структура Pt/Co/Cu/Co/Pt уже будет характеризоваться анизотропией типа легкая ось с ориентацией намагниченности, перпендикулярной плоскости пленки. Это подтверждается нашими расчетами. Для структуры Co/Cu/Co $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} > 0$, что соответствует магнитной анизотропией типа легкая плоскость, кроме очень маленьких значений $E_{MA} = -0.05 \text{ eV}$ при энергетически невыгодных ФМ-конфигураций граней (110)

и (111). Как приводится в [12] дополнительные измерения Kohlhepp et al. (1992) и den Broeder et al (1991) подтвердили, что система Co/Cu(111) действительно демонстрирует слабую анизотропию перпендикулярную границе раздела порядка 0.1 mJ/m^2 .

В то время как анизотропия типа легкая ось с ориентацией намагниченности, перпендикулярной плоскости пленки возникает для структуры Pt/Co/Cu/Co/Pt для грани ФМ-конфигурации грани (110), а для структуры Co/Pt/Co для АФМ конфигурации грани (111), что подтверждается экспериментально [12], так как в этих структурах перпендикулярная магнитоанизотропия наблюдается именно для грани (111).

Результаты расчета энергии магнитной анизотропии показали, что для ориентации поверхностной грани (100) все рассмотренные структуры на основе пленок кобальта, с немагнитной прослойкой платины и меди, а также с нанесенной поверх структуры Co/Cu/Co пленки из платины характеризуются магнитной анизотропией типа легкая плоскость с намагниченностью, ориентированной в плоскости пленки.

Результаты расчетов магнитного момента атомов Co для рассматриваемых систем приведены в табл. 4. Наибольшим магнитным моментом обладает атом кобаль-

Таблица 2. Результаты расчетов разности энергий АФМ- и ФМ-конфигураций ΔE в зависимости от ориентации поверхностной грани и направления намагниченности

Грань	Тип упорядочения	ΔE , meV		
		Co/Pt/Co	Co/Cu/Co	Pt/Co/Cu/Co/Pt
100		12.344	9.466	16.000
	⊥	12.889	6.631	17.034
110		5.592	-31.784	-30.755
	⊥	8.426	-31.585	-28.443
111		4.965	-7.160	3.448
	⊥	-1.406	-6.854	3.077

Таблица 3. Результаты расчетов энергии магнитной анизотропии $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel}$ в зависимости от ориентации поверхностной грани

Грань	Спин. конфигурация	E_{MA} , meV		
		Co/Pt/Co	Co/Cu/Co	Pt/Co/Cu/Co/Pt
100	ФМ	0.965	3.204	1.961
	АФМ	1.510	0.369	2.995
110	ФМ	0.993	-0.050	-2.205
	АФМ	3.827	0.149	0.107
111	ФМ	0.463	-0.044	-0.034
	АФМ	-5.908	0.262	-0.405

Таблица 4. Результаты расчетов среднего магнитного момента атомов Co μ, μ_B и магнитного момента атома Co μ_1, μ_B наиболее близкого к немагнитной срединной прослойки

Грань	Тип упорядочения		Co/Pt/Co		Co/Cu/Co		Pt/Co/Cu/Co/Pt	
			μ, μ_B	μ_1, μ_B	μ, μ_B	μ_1, μ_B	μ, μ_B	μ_1, μ_B
100	ФМ		1.765	1.851	1.724	1.885	1.751	1.836
		⊥	1.764	1.850	1.721	1.871	1.753	1.835
	АФМ		1.766	1.847	1.721	1.870	1.752	1.834
		⊥	1.765	1.847	1.722	1.872	1.751	1.831
110	ФМ		1.854	1.889	1.732	1.871	1.833	1.884
		⊥	1.850	1.893	1.732	1.867	1.834	1.892
	АФМ		1.848	1.896	1.721	1.854	1.835	1.893
		⊥	1.847	1.894	1.721	1.855	1.835	1.893
111	ФМ		1.814	1.853	1.701	1.773	1.805	1.858
		⊥	1.814	1.854	1.701	1.775	1.805	1.856
	АФМ		1.812	1.850	1.702	1.780	1.805	1.856
		⊥	1.812	1.852	1.701	1.774	1.806	1.857

Таблица 5. Результаты расчетов μ, μ_B монослойной пленки Fe при толщине пластины Pt 9 ml в сравнении с результатами расчетов полученных с помощью формализма (KKR) при толщине подложки Pt в 37 ml [19] и на полубесконечной поверхности Pt [10]

Тип	(111)	(110)	(100)
	2.98 3.018 [10]	3.15	3.06
⊥	2.97 2.92 [19] 3.016 [10]	3.15	3.05

та в структуре Co/Pt/Co, а наименьшим для системы Co/Cu/Co. Значения среднего магнитного момента атомов Co (табл. 4) больше для структуры со срединным слоем платины и слабо зависят от спиновых конфигураций, разница составляет около 0.01 μ_B .

Далее мы исследуем структуры на основе пленки железа в зависимости ориентации поверхностной грани. Результаты расчетов энергии магнитной анизотропии и магнитных моментов для монослойных пленок железа, разделенных прослойкой платины приведены на рис. 8 и в табл. 5. Можно увидеть, что перпендикулярная анизотропия для монослойных пленок железа с прослойкой платины возникает только для грани (100) для всех толщин пластины Pt и для грани (110) для толщины пластины Pt в 5 монослоев. А для грани (111) для всех толщин немагнитной прослойки более энергетически выгодна анизотропия типа легкой плоскость со значениями $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} \approx 0.5-1.0 \text{ meV}$.

Для грани (111) наши расчеты подтверждаются расчетами других авторов. В статье [19] исследовали адсорбцию кластеров железа разной геометрии вплоть до монослоя на поверхностной грани Pt(111). Расчеты выполнялись с помощью формализма Корринги–Кона–Ростокера (KKR) [18], при толщине подложки Pt в 37 ml без учета релаксации системы, размерность k -сетки $100 \times 100 \times 1$. Для всех исследуемых кластеров, системы Fe/Pt(111), преобладает МАЕ типа легкая ось, однако при расчете монослоя преобладает анизотропия типа легкая плоскость со значением

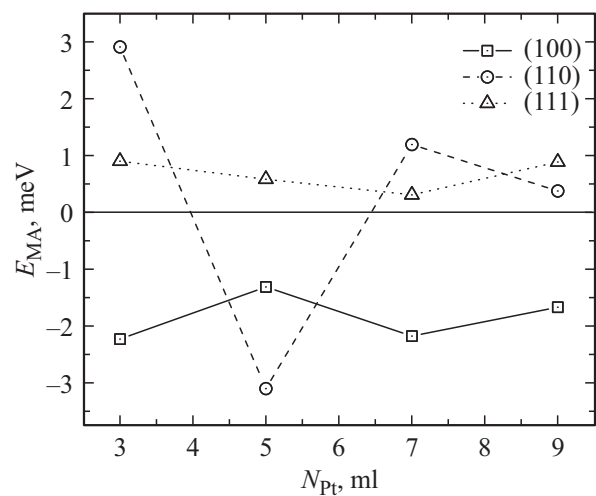


Рис. 8. Значение магнитной анизотропии для системы 1Fe/Pt/1Fe в зависимости от толщины прослойки платины для разной ориентации поверхностной грани.

Таблица 6. Результаты расчетов для системы 3Fe/3Pt/3Fe магнитной анизотропии E_{MA} , meV и магнитных моментов μ , μ_B атомов Fe и приповерхностного слоя Pt для разной ориентации поверхностной грани

Грань		E_{MA} , meV	μ_{Pt}	μ_{Fe1}	μ_{Fe2}	μ_{Fe3}
100	\perp	-1.57	0.293	2.752	2.399	2.906
	\parallel		0.283	2.748	2.402	2.893
110	\perp	-1.10	0.358	2.842	2.800	2.848
	\parallel		0.357	2.842	2.801	2.848
111	\perp	-1.45	0.273	2.833	2.588	2.852
	\parallel		0.266	2.835	2.592	2.859

$E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} = 0.26$ meV. В статье [10] расчеты одиночного монослоя Fe на Pt(111) демонстрирует плоскую магнитную анизотропию $E_{MA} = 0.71$ meV, в то время как одиночный адатом Fe на Pt(111) ориентирован строго перпендикулярно.

Результаты расчетов энергии магнитной анизотропии и магнитных моментов для пленок железа, разделенных прослойкой платины с толщиной каждого из материалов в 3 моноатомных слоя приведены в табл. 6.

Расчеты показали, что перпендикулярная анизотропия для пленок железа с толщиной в 3 моноатомных слоя возникает для всех ориентаций поверхностной грани, в то время как для моноатомной пленки только для грани (100).

3. Заключение

В заключение отметим, что в настоящей статье проведены первопринципные расчеты магнитной анизотропии пленок Co и Fe разделенных пластиной Cu и Pt в зависимости от параметров сходимости и толщины пластины. Исследование сходимости по количеству k -точек показало, что для ΔE сходимость намного хуже, чем для полной энергии. И мы должны использовать большие значения количества k -точек, размер сетки примерно $50 \times 50 \times 1$.

Для пленки Co с толщиной 1 и 2 монослоя ферромагнитная ориентация более энергетически выгодна для всех рассматриваемых толщин пластины Pt, и сменяется антиферромагнитной только для трехслойной пленки с толщиной Pt, начиная с 7 монослоев. Для монослойной пленки Fe выгодна антиферромагнитная ориентация для всех рассматриваемых толщин Pt.

Были определены значения МАЭ и магнитного момента атомов в структурах Fe/Pt/Fe, Co/Cu/Co, Co/Pt/Co и Pt/Co/Cu/Co/Pt с толщиной каждого металла в 3 монослоя в зависимости от ориентации поверхностной грани. Структура Co/Cu/Co характеризуется магнитной анизотропией легкая плоскость, кроме очень слабой перпендикулярной анизотропии при энергетически невыгодных ФМ-конфигураций граней (110) и (111).

Однако, если на пленки кобальта для грани (111) и ФМ-конфигурации грани (110) нанести ультратонкие пленки платины, полученная структура Pt/Co/Cu/Co/Pt уже будет характеризоваться анизотропией типа легкая ось. Для структуры Co/Pt/Co перпендикулярная анизотропия оказалась более энергетически выгодна для АФМ-конфигурации грани (111).

Для ориентации поверхностной грани (100) все рассмотренные структуры на основе пленок кобальта, с немагнитной прослойкой как платины, так и меди, а также с нанесенной поверх структуры Co/Cu/Co пленки из платины характеризуются магнитной анизотропией типа легкая плоскость.

Перпендикулярная анизотропия для пленок железа с толщиной в 3 моноатомных слоя возникает для всех ориентаций поверхностной грани, в то время как для моноатомной пленки только для грани (100).

Наши выводы, соответствуют результатам эксперимента, представленным в обзоре [12] и расчетам других авторов [19,10]. Полученные нами результаты могут быть применены при численном моделировании методами Монте-Карло неравновесного поведения многослойных магнитных сверхструктур [20].

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ. Были использованы вычислительные ресурсы Центра совместного пользования ДВО РАН (Хабаровск).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

Список литературы

- [1] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. УФН **187**, 8, 817 (2017).
- [2] A. Moser, K. Takano, D.T. Margulies, M. Albrecht, Y. Sonobe, Y. Ikeda, S.H. Sun, E.E. Fullerton. J. Phys. D **35**, R157 (2002).
- [3] S. Hashimoto, Y. Ochiai, K. Aso. J. Appl. Phys. **66**, 4909 (1989).
- [4] B.N. Engel, C.D. England, R.A. Van Leeuwen, M.H. Wiedmann, C.M. Falco. Phys. Rev. Lett. **67**, 1910 (1991).
- [5] Z. Celinski, B. Heinrich. JMMM **99**, L25 (1991).
- [6] E.E. Fullerton, D. Stoeffler, K. Ounadjela, B. Heinrich, Z. Celinski, J.A.C. Bland. Phys. Rev. B **51**, 6364 (1995).
- [7] P.F. Carcia, A.D. Meinhaldt, A. Suna. Appl. Phys. Lett. **47**, 178(1985).
- [8] R.L. Stamps, S. Breitkreutz, J. Akerman, A.V. Chumak, Y. Otani, G.E.W. Bauer, J.-U. Thiele, M. Bowen, S.A. Majetich, M. Klau, I.L. Prejbeanu, B. Dieny, N.M. Dempsey, B. Hillebrands. J. Phys. D **47**, 333001 (2014).
- [9] O. Sipi, S. Bornemann, J. Minar, H. Ebert. Phys. Rev. B **82**, 17, 174414 (2010).

- [10] C. Etz, J. Zabloudil, P. Weinberger, E.Y. Vedmedenko. Phys. Rev. B **77**, 18, 184425 (2008).
- [11] P. Blonski, J. Hafner. J. Phys.: Condens. Matter **21**, 42, 426001 (2009).
- [12] M.T. Johnson, P.J.H. Bloemen, F.J.A. den Broeder, J.J. de Vries. Rep. Prog. Phys. **59**, 1409 (1996).
- [13] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.V. Mamonova, N.I. Piskunova. JMMM **470**, 201 (2019).
- [14] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова, И.А. Черкащенко. Вестн. Омского ун-та **893**, 82 (2018).
- [15] P.G. Kresse, J. Furthmuller. Phys. Rev. B **54**, 16, 11169 (1996).
- [16] C.F. Smura, D.R. Parker, M. Zbiri, M.R. Johnson, Z.A. Gal, S.J. Clarke. J. Am. Chem. Soc. **133**, 8, 2691 (2011).
- [17] E.A. Owen, E.L. Yates. Phil. Mag. **15**, 98472 (1933).
- [18] H. Ebert. In: Electronic Structure and Physical Properties of Solids. Springer, Berlin, Heidelberg (2000). P. 191.
- [19] S. Bornemann, O. Sipr, S. Mankovsky, S. Polesya, J.B. Staunton, W. Wurth, H. Ebert, J. Minar. Phys. Rev. B **86**, 10, 104436 (2012).
- [20] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, A.N. Purtov, M.V. Mamonova, N.I. Piskunova. JMMM **470**, 143 (2019).

Редактор Ю.Э. Китаев