

Модификация топологических поверхностных состояний в новых синтетических топологических системах $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ($\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$)

Т. П. Естюнина¹⁾, А. В. Тарасов, А. В. Ерыженков, Д. А. Естюнин, А. М. Шикин

Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 ноября 2023 г.

После переработки 14 февраля 2024 г.

Принята к публикации 18 февраля 2024 г.

В данной работе с помощью *ab initio* расчетов была исследована возможность изменения энергетической запрещенной зоны в топологических поверхностных состояниях систем на основе собственного антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 . Системы получены путем замещения атомов магнитного металла (Mn) на атомы немагнитных элементов ($\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) в поверхностном семислойном блоке ($\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$). Результаты исследования показали значительную модуляцию величины энергетической запрещенной зоны в широком диапазоне от 60 мэВ до 0 мэВ при увеличении концентрации замещения x . Более того, было обнаружено, что выбор замещающего элемента влияет на характер изменения величины энергетической запрещенной зоны. Так, для Si и Ge была выявлена монотонная зависимость величины энергетической запрещенной зоны от x , в то время как для Sn и Pb минимальное значение энергетической запрещенной зоны наблюдалось при $x = 0.75$. Полученные в работе результаты позволяют предположить, что основным механизмом модуляции энергетической запрещенной зоны в исследованных системах является изменение локализации топологических поверхностных состояний.

DOI: 10.31857/S1234567824060065, EDN: OVJPFU

1. Введение. Магнитные топологические изоляторы (ТИ) – это материалы, в которых благодаря уникальному сочетанию топологических свойств и магнетизма наблюдается ряд экзотических эффектов [1]. Вследствие нарушения симметрии обращения относительно времени в топологических поверхностных состояниях (ТПС) магнитных ТИ образуется энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) в точке Дирака [2–4]. За счет этого в магнитных ТИ становится возможной реализация квантового аномального эффекта Холла [5–7] и магнитоэлектрического эффекта [8], что и обуславливает высокую перспективность использования магнитных ТИ в качестве материальной базы в квантовых устройствах нового поколения. При этом возможность управления величиной ЭЗЗ может иметь решающее значение для развития устройств на основе ТИ.

Одним из наиболее перспективных материалов является собственный антиферромагнитный ТИ MnBi_2Te_4 [9–14], который состоит из семислойных блоков (СБ), разделенных ван-дер-Ваальсовыми промежутками [9]. Каждый СБ состоит из 7 атомных слоев и имеет вид $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$.

СБ в MnBi_2Te_4 могут быть заменены блоками родственных ТИ с такой же пространственной группой симметрии $R\bar{3}m$, например, такими как Bi_2Te_3 или тройные соединения AM_2X_4 ($\text{A} = \text{Ge}, \text{Pb}, \text{Sn}; \text{M} = \text{Bi}, \text{Sb}; \text{X} = \text{Te}, \text{Se}$) [15–17]. Блоки MnBi_2Te_4 могут чередоваться с блоками Bi_2Te_3 , образуя семейство топологических материалов вида $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, где $m = 0, 1, 2$ [18–20]. Кроме того, MnBi_2Te_4 может образовывать твердые растворы с ABi_2Te_4 ($\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$) с любым уровнем замещения x . Заменяя атомы Mn на немагнитные атомы, можно управлять магнитными свойствами и электронной структурой материала, в частности, влиять на величину ЭЗЗ в точке Дирака и объемной ЭЗЗ. В работе [21] теоретически и экспериментально была показана возможность модуляции электронной структуры для системы $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$ во всем объеме кристалла. Аналогичные возможности модификации электронной структуры и величины ЭЗЗ в ТПС в точке Дирака были показаны в работе [22] при замене Mn на Sn, а в работе [23] – при замене Mn на Ge. Однако наряду с изменением величины ЭЗЗ в точке Дирака по мере увеличения концентрации замещающих атомов уменьшается величина объемной ЭЗЗ, и происходит топологиче-

¹⁾e-mail: i@tmakarova.ru

ский фазовый переход, приводящий к исчезновению ТПС и изменению топологической фазы материала.

В связи с этим в настоящее время одной из актуальных задач является поиск возможности и способа модификации электронной структуры ТИ без изменения его топологической фазы. В нашей предыдущей работе [24] было показано, что при замене Mn на Ge в поверхностном СБ MnBi_2Te_4 система остается в состоянии ТИ, при этом ТПС не исчезают при всех концентрациях замещения атомов Mn, что важно для практического использования в топологической спинтронике и квантовых вычислениях. Данная работа посвящена детальному анализу модификации электронной структуры и величины ЭЗЗ в точке Дирака при замещении Mn на элементы IV группы $A = \text{Si, Ge, Sn, Pb}$ в гетероструктуре $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, где $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$, и замещение производится только в поверхностном СБ.

2. Методы. Расчеты электронной структуры были проведены с использованием программного кода OpenMX, в котором реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциалов, сохраняющих норму [25], и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [26–28]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его РВЕ-версии [29]. Для расчетов гетероструктур использовались суперячейки 2×2 , позволяющие учитывать четыре неэквивалентных положения атомов Mn в каждом слое. Гетероструктуры с концентрациями $x = 0.25, 0.5, 0.75$ и 1.0 были получены путем замены одного, двух, трех и четырех атомов Mn на атомы Si, Ge, Sn или Pb соответственно. Критерий сходимости по полной энергии – $1 \cdot 10^{-6}$ эВ, энергия отсечки – 450 Ry, к-сетка задавалась как $3 \times 3 \times 1$. Базисные функции задавались следующим образом: $\text{Bi}8.0 \text{ } s3p2d2f1$, $\text{Te}7.0 \text{ } s3p2d2f1$, $\text{Mn}6.0 \text{ } s3p2d1$. Состояния Mn $3d$ рассматривались в рамках подхода DFT + U [30] в схеме Дударева с параметром $U = 5.4$ эВ [9]. Исследуемая в работе поверхность была построена в рамках модели периодических кристаллических пластин, состоящих из 6 СБ. Вакуумный промежуток составлял 12 Å. В качестве элементарной ячейки для всех концентраций примеси в поверхностном СБ была использована структура, представленная в работе [31].

3. Результаты и обсуждение. На рисунке 1a–d показана электронная структура, полученная методом теории функционала плотности, для гетероструктур $\text{Mn}_{0.75}\text{A}_{0.25}\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ($A = \text{Si, Ge, Sn, Pb}$). Для исходной системы MnBi_2Te_4 ве-

личина ЭЗЗ в точке Дирака составляла 58 мэВ [31]. При уровне замещения $x = 0.25$ величина ЭЗЗ уменьшается до 33–35 мэВ для всех типов замещающих атомов. Электронная структура $\text{Mn}_{0.5}\text{A}_{0.5}\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, представленная на рис. 1e–h, показывает дальнейшее уменьшение ЭЗЗ до значений, равных 8, 11, 13 и 15 мэВ для гетероструктур с замещением Mn на Si, Ge, Sn и Pb соответственно. При дальнейшем увеличении концентрации замещающих атомов до $x = 0.75$ величина ЭЗЗ составляет 8, 8, 0 и 3 мэВ для Si, Ge, Sn и Pb соответственно. Можно отметить, что при замещении $\text{Mn} \rightarrow \text{Si}$ в случае $x = 0.5$ и $x = 0.75$ (рис. 1i) не меняется величина ЭЗЗ. Однако при этом наблюдаются некоторые изменения в электронной структуре $\text{Mn}_{1-x}\text{Si}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ (показано зелеными стрелками на рис. 1i). Для всех остальных замещающих элементов зонная структура меняется похожим образом при увеличении уровня замещения. Следовательно, выбор типа замещающего атома не оказывает значительного влияния на положение зон, существенное влияние оказывает только уровень замещения. Однако важно отметить, что в наших расчетах не учитываются возможные структурные изменения, которые могут зависеть от типа замещающих атомов, что в реальных кристаллах может оказывать существенное влияние на свойства гетероструктуры, как было показано для систем с объемным замещением Mn на атомы IV группы [21, 32, 33]. Стоит обратить внимание на случай с уровнем замещения $x = 1.0$, т.е. контакт немагнитного СБ ABi_2Te_4 и магнитного ТИ MnBi_2Te_4 . В этом случае наблюдается уменьшение ЭЗЗ до 0 и 2 мэВ для гетероструктур с заменой Mn на Si и Ge соответственно. При этом для гетероструктур с заменой Mn на Sn и Pb наоборот, при $x = 1.0$ ЭЗЗ увеличивается до 9 и 6 мэВ соответственно.

На рисунке 2 показана зависимость величины ЭЗЗ от концентрации атомов замещающих элементов. Наблюдаемые изменения величины ЭЗЗ можно разделить на 2 группы в зависимости от атомного номера замещающего элемента. Так, для Si и Ge наблюдается уменьшение ЭЗЗ по мере увеличения уровня замещения x . При этом в случае замены $\text{Mn} \rightarrow \text{Si}$ наблюдается небольшое плато при концентрациях замещения от $x = 0.5$ до 0.75 , хотя при дальнейшем увеличении концентрации продолжается уменьшение величины ЭЗЗ вплоть до нулевых значений. В случае замещения атомов Mn элементами с более высоким атомным номером Sn и Pb значения ЭЗЗ достигают минимума при концентрации $x = 0.75$, а далее наблюдается увеличение ЭЗЗ. Такое поведе-

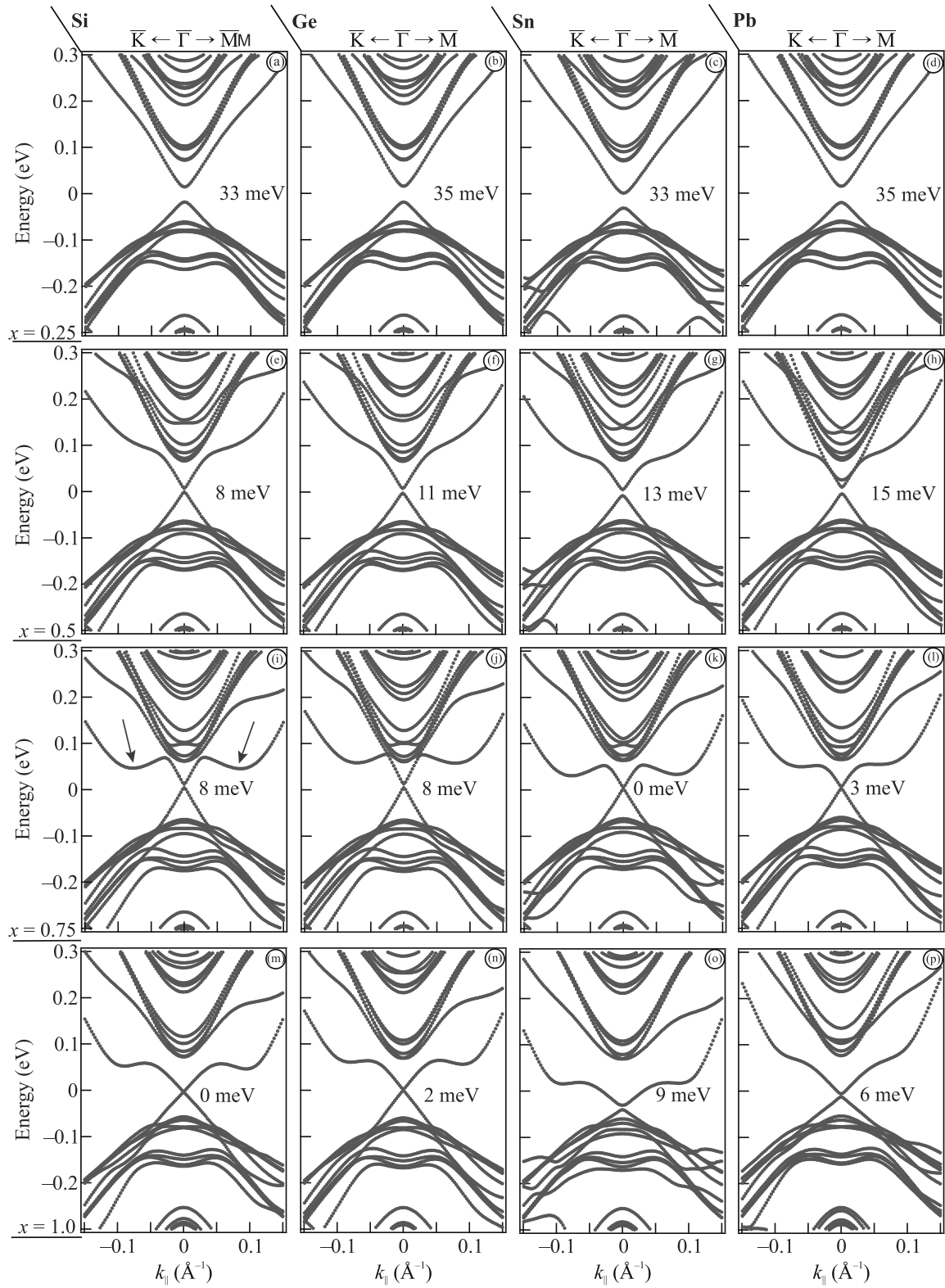


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассчитанная электронная структура гетероструктур $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ для $x = 0.25$ (a)–(d); 0.5 (e)–(h); 0.75 (i)–(l), 1.0 (m)–(p)

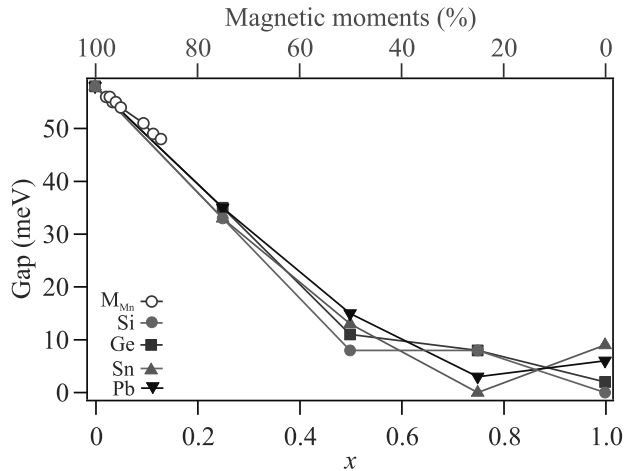


Рис. 2. (Цветной онлайн) Изменения величины ЭЗЗ при изменении концентрации Si, Ge, Sn и Pb. Величина ЭЗЗ в точке Дирака при уменьшении магнитного момента Mn в 1 СБ. (показана полыми кружками)

ние может быть связано с перераспределением ТПС вглубь кристалла при изменении концентрации замещения, что будет рассмотрено далее.

Магнитное разбавление, которое происходит при замене Mn на атомы немагнитных элементов IV группы, может приводить к уменьшению средней величины магнитного момента поверхностного СБ. В реальных (синтезированных) системах магнитное разбавление также приводит к изменению уровня дефектности и межслоевых расстояний внутри СБ [21]. Для более детального анализа влияния изменения магнитных свойств слоя Mn в 1 СБ на электронную структуру была проведена процедура уменьшения величин магнитных моментов атомов Mn в 1 СБ в пределах от 5 до $4.38 \mu_B$. Результаты расчетов представлены на рис. 2 и показаны полыми коричневыми кружками. При этом позиции магнитных атомов Mn не изменялись. Видно, что по мере уменьшения магнитного момента величина ЭЗЗ в точке Дирака также пропорционально уменьшается. При этом для гетероструктур $Mn_{1-x}A_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ при малых значениях x зависимость величины ЭЗЗ от x совпадает с теоретически рассчитанной зависимостью ЭЗЗ от величины магнитного момента Mn в 1 СБ. Таким образом, можно предположить, что по крайней мере вплоть до концентрации замещения $x = 0.5$ значительный вклад в изменение величины ЭЗЗ происходит вследствие уменьшения усредненного магнитного момента в поверхностном СБ (предполагается линейная зависимость величины ЭЗЗ от магнитного момента Mn). При этом в системах с замещением Mn $\rightarrow$ Sn и Pb в области большой концентрации x начи-

нается рост величины ЭЗЗ, что уже не может быть описано только уменьшением среднего значения магнитного момента СБ.

Связь пространственного распределения ТПС и величины ЭЗЗ в точке Дирака. Величина ЭЗЗ в точке Дирака существенно зависит от распределения ТПС между СБ с разными направлениями магнитных моментов [34]. В настоящей работе были проанализированы распределения ТПС по объему для всех замещающих элементов и рассчитываемых концентраций. На рисунке 3 показано распределение локализации ТПС по глубине слэба. На рисунке 3а показаны распределения для гетероструктуры $Mn_{1-x}Si_xBi_2Te_4/MnBi_2Te_4$ при всех рассчитанных x . Коричневый, красный, синий, черный и зеленый цвета отражают распределения для $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ соответственно. Относительный вклад атомов каждого СБ в ТПС показан на панели с рис. 3. На рисунке 3b,d показаны распределения для гетероструктур с замещением Mn на Ge; (e), (g) – Mn на Sn; (f), (h) – Mn на Pb.

Результаты показывают, что для каждого из замещающих элементов при значениях концентрации вплоть до $x = 0.75$ ТПС в основном локализованы в области 2 поверхностных СБ, и не происходит значительного перераспределения ТПС вглубь кристалла. Среди представленных результатов можно выделить случай полного замещения атомов Mn атомами немагнитных элементов в поверхностном СБ, а именно интерфейс тонкой немагнитной пленки на поверхности $MnBi_2Te_4$ (т. е. $ABi_2Te_4/MnBi_2Te_4$, где $A = Si, Ge, Sn, Pb$). Важно отметить, что для системы с замещением атомов Mn атомами Si и Ge по мере увеличения концентрации атомов замещающих элементов от $x = 0.75$ до $x = 1.0$ локализация ТПС наиболее ярко выражена в первом СБ и существенного перераспределения локализации ТПС в область третьего и четвертого СБ не происходит. На рисунке 3c,d показано, что в 1 СБ локализуется более 80 % ТПС (для сравнения в $MnBi_2Te_4$ – около 50 %). Таким образом, для $x = 1.0$ доля ТПС в СБ, содержащих магнитные атомы, становится незначительной.

Изменение пространственного распределения ТПС для гетероструктур с замещением Mn на Sn и Pb отличается от случаев замещения Mn на Si и Ge. ТПС перераспределяются в более глубоко лежащие СБ, а локализация в поверхностном СБ существенно не изменяется в сравнении с $MnBi_2Te_4$. Поскольку 2 соседних СБ связаны антиферромагнитно, на ТПС действуют обменные поля разных знаков [35]. Сдвиг плотности ТПС в область второго СБ наряду с уменьшением магнитного момента при

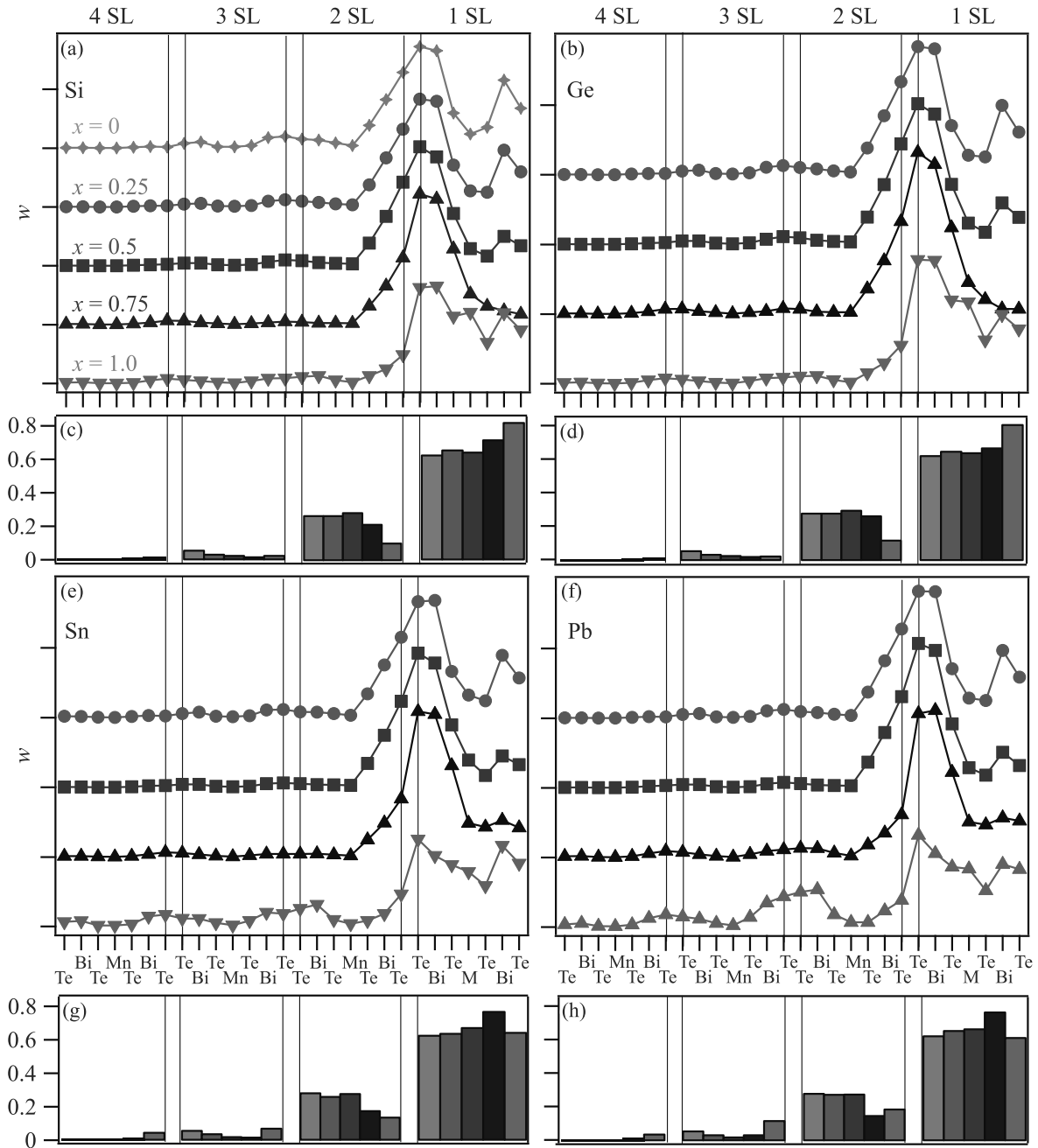


Рис. 3. (Цветной онлайн) Распределение локализации ТПС, взятых в области Γ -точки для: (a) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Si}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (b) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (e) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$; (f) – $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$. Вклады ТПС в каждый СБ для соответствующих гетероструктур показаны на панелях (c), (d), (g), (h) в виде столбчатой диаграммы в процентах. Значение x возрастает слева направо. На панели (a), (c) для сравнения приведены значения для системы MnBi_2Te_4 . $M=\text{Mn}_{1-x}A_x$; $A=\text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$; $w \sim |\psi(Z)|^2$

замене магнитных атомов Mn на атомы немагнитных элементов уменьшает также и величину ЭЗЗ. При перераспределении ТПС в область третьего СБ, который характеризуется той же ориентацией магнитных моментов, что и в первом СБ, величина ЭЗЗ в точке Дирака вновь может начать увеличиваться

[35]. Это является возможным механизмом увеличения ЭЗЗ при концентрациях замещения $x > 0.75$ в гетероструктурах $\text{Mn}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ и $\text{Mn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$.

Количественной характеристикой влияния магнитных моментов атомов Mn на ТПС с учетом того,

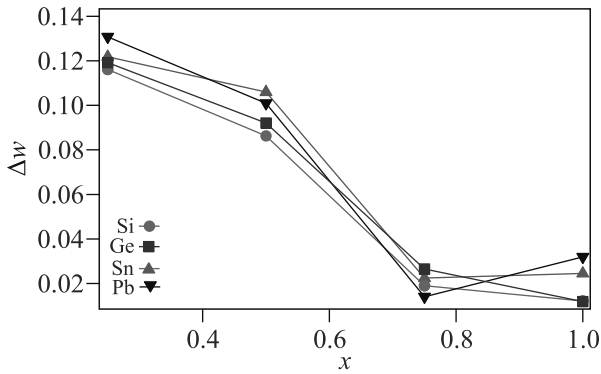


Рис. 4. (Цветной онлайн) Изменения эффективного магнитного момента, действующего на ТПС, в зависимости от концентрации замещения x

что их локализация может меняться вдоль слэба, может служить эффективный магнитный момент [35]. Следует отметить, что несмотря на то, что величина магнитного момента Mn значительно выше таковой для Te и Bi, именно в области атомов Te и Bi сосредоточена большая плотность ТПС. Таким образом, магнитные моменты Te и Bi также могут играть важную роль в формировании величины ЭЗЗ. Эффективный магнитный момент $\Delta w(z)$ вычислялся следующим образом: $\Delta w(z) \sim \sum_i |\psi_i|^2 \cdot M_i$, где $|\psi_i|^2$ — плотность ТПС на i -м атоме, M_i — величина магнитного момента на i -м атоме. На рисунке 4 показано, что значение Δw уменьшается для всех элементов при увеличении концентрации вплоть до $x = 0.75$. Такое поведение согласуется с изменениями величины ЭЗЗ от концентрации замещающих атомов (см. рис. 2). При дальнейшем увеличении концентрации до $x = 1.0$ для Si и Ge происходит уменьшение величины Δw , в то время как для Sn и Pb наблюдается увеличение Δw . Такое поведение согласуется с наблюдениями, сделанными ранее для зависимости величины ЭЗЗ от концентрации атомов замещающих элементов. При увеличении концентрации Sn и Pb происходит перераспределение ТПС между 2 и 3 СБ и появление локализации ТПС в третьем СБ, вследствие чего начинается рост ЭЗЗ. Полученные результаты дополнительно подтверждают связь изменения локализации ТПС с величиной ЭЗЗ в точке Дирака.

4. Заключение. В данной работе было проведено исследование изменений электронной структуры при замещении атомов Mn на немагнитные атомы элементов IV группы в поверхностном СБ для гетероструктур $\text{Mn}_{1-x}\text{A}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, где $\text{A} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ и Pb .

Было показано, что изменения зонной структуры зависят в большей степени от концентрации замеще-

ния x и практически не зависят от выбора замещающего элемента. Однако выбор замещающего элемента влияет на величину ЭЗЗ в точке Дирака. Так, для Si и Ge наблюдалось монотонное уменьшение величины ЭЗЗ от 58 мэВ при $x = 0$ до нулевых значений при $x = 1$. При замещении Mn на Sn и Pb минимум ЭЗЗ в точке Дирака достигался при $x = 0.75$, но при дальнейшем увеличении концентрации до $x = 1$ (т.е. контакт немагнитного СБ и MnBi_2Te_4) происходило небольшое увеличение ЭЗЗ. Подобное поведение величины ЭЗЗ можно объяснить ее связью с локализацией ТПС. В случае замещения Mn на Si, Ge локализация ТПС оказывается поверхностной: 80 % локализации ТПС находятся в 1 СБ, в котором отсутствуют атомы Mn. В случае полного замещения Mn на Sn или Pb ТПС перераспределяются в более глубоко лежащие СБ. В результате для данных гетероструктур ЭЗЗ в точке Дирака не закрывается. Показано, что замена поверхностных магнитных атомов Mn на немагнитные может быть использована для создания синтетических слоистых топологических структур с целенаправленно измененной ЭЗЗ в точке Дирака.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств гранта Российского научного фонда (# 23-12-00016) и гранта Санкт-Петербургского государственного университета (шифр проекта 95442847).

Конфликт интересов. Конфликт интересов отсутствует.

1. B. A. Bernevig, C. Felser, and H. Beidenkopf, *Nature* **603**, 41 (2022).
2. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
3. X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
4. A. Bansil, H. Lin, and T. Das, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 021004 (2016).
5. X. Kou, Y. Fan, M. Lang, P. Upadhyaya, and K. L. Wang, *Solid State Commun.* **215**, 34 (2015).
6. C.-Z. Chang and M. Li, *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 123002 (2016).
7. K. He and Q.-K. Xue, *Spin* **9**, 1940016 (2019).
8. T. Zhu, H. Wang, H. Zhang, and D. Xing, *npj Computational Materials* **7**, 121 (2021).
9. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
10. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
11. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).

12. P. Wang, J. Ge, J. Li, Y. Liu, Y. Xu, and J. Wang, *The Innovation* **2**, 100098 (2021).
13. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
14. Y. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 102001 (2013).
15. K. Okamoto, K. Kuroda, H. Miyahara, K. Miyamoto, T. Okuda, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, I. R. Amiraslanov, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, D. A. Samorokov, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov, and A. Kimura, *Phys. Rev. B* **86**, 195304 (2012).
16. K. Kuroda, H. Miyahara, M. Ye et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206803 (2012).
17. Y. Li, C. Huang, G. Wang, J. Hu, S. Duan, C. Xu, Q. Lu, Q. Jing, W. Zhang, and D. Qian, *Chin. Phys. B* **30**, 127901 (2021).
18. L. Ding, C. Hu, F. Ye, E. Feng, N. Ni, and H. Cao, *Phys. Rev. B* **101**, 020412 (2020).
19. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. Estyunin et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **5**, 54 (2020).
20. A. M. Shikin, N. L. Zaitsev, A. V. Tarasov, T. P. Makarova, D. A. Glazkova, D. A. Estyunin, and I. I. Klimovskikh, *JETP Lett.* **116**, 556 (2022).
21. T. Qian, Y.-T. Yao, C. Hu, E. Feng, H. Cao, I. I. Mazin, T.-R. Chang, and N. Ni, *Phys. Rev. B* **106**, 045121 (2022).
22. A. V. Tarasov, T. P. Makarova, D. A. Estyunin, A. V. Eryzhenkov, I. I. Klimovskikh, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, and A. M. Shikin, *Symmetry* **15**, 469 (2023).
23. A. S. Frolov, D. Y. Usachov, A. V. Tarasov et al. (Collaboration), *arXiv preprint arXiv:2306.13024* (2023).
24. T. P. Estyunina, A. M. Shikin, D. A. Estyunin, A. V. Eryzhenkov, I. I. Klimovskikh, K. A. Bokai, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, S. Kumar, K. Shimada, and A. V. Tarasov, *Nanomaterials* **13**, 2151 (2023).
25. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 8861 (1991).
26. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
27. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
28. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
29. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
30. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).
31. T. P. Makarova, A. M. Shikin, A. V. Eryzhenkov, and A. V. Tarasov, *JETP* **136**, 630 (2023).
32. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
33. D. A. Estyunin, A. A. Rybkina, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, M. V. Likholetova, I. I. Klimovskikh, and A. M. Shikin, *Magnetochemistry* **9**, 210 (2023).
34. A. M. Shikin, T. P. Makarova, A. V. Eryzhenkov, D. Yu. Usachov, D. A. Estyunin, D. A. Glazkova, I. I. Klimovskikh, A. G. Rybkin, and A. V. Tarasov, *Physica B: Condensed Matter* **649**, 414443 (2023).
35. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).