06,03

Флексоэлектрический эффект в GeTe

© В.Г. Кузнецов[1,3], А.О. Якубов[2], Д.Ю. Терехов[2], П.И. Лазаренко[2], В.А. Трепаков[1], А.В. Колобов[3]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Национальный исследовательский университет „Московский институт электронной техники“,
Москва, Россия
[3] Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Институт физики,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: akolobov@herzen.spb.ru

Поступила в Редакцию 21 ноября 2024 г.
В окончательной редакции 24 ноября 2024 г.
Принята к публикации 28 ноября 2024 г.

Теллурид германия (GeTe) является химически и структурно простым, но при этом многофункциональным материалом. Это и полупроводник, который под давлением становится сверхпроводником, и высокотемпературный сегнетоэлектрик, и фазопеременный материал, и один из лучших термоэлектриков, и материал с рекордно большим эффектом Рашбы. В данной работе мы демонстрируем посредством первопринципных расчетов и электрических измерений, что у GeTe есть еще одно фундаментальное свойство: тонкие пластины теллурида германия могут проявлять флексоэлектрический эффект. Полученные результаты, в сочетании с эффектом Рашбы, открывают возможность механического управления спиновыми свойствами, создавая предпосылки для реализации принципиально новых устройств спинтроники.

Ключевые слова: теллурид германия, сегнетоэлектрик, первопринципные расчеты, флексоэлектрический эффект, спинтроника.

DOI: 10.61011/FTT.2024.12.59612.317

1. Введение

Материаловедение — одна из наиболее интенсивно развивающихся областей науки и техники, при этом особое внимание уделяется исследованиям многофункциональных материалов. На первый взгляд, для обеспечения многофункциональности материал должен обладать сложным составом и структурой. Бинарный теллурид германия (GeTe) убедительно опровергает эту парадигму, являясь уникальным материалом, который, несмотря на крайне простой состав, обладает целым рядом свойств, привлекательных для практического использования, многие из которых нашли применения в приборных структурах и различных устройствах.

Во-первых, GeTe является полупроводником, который под давлением становится сверхпроводником [1]. Во-вторых, это высокотемпературный сегнетоэлектрик с температурой Кюри $T_c = 630-670$ K, у которого всего лишь два атома в примитивной ячейке [2–9]. В-третьих, это эффективный термоэлектрик [10–14]. В-четвертых, это так называемый фазопеременный материал, способный быстро и стабильно переключаться между кристаллическим и аморфным состояниями под действием коротких импульсов тока или света [15]. Термоэлектрические свойства GeTe и его фазопеременная способность широко используются в термоэлектрических преобразователях, устройствах оптической и энергонезависимой электронной памяти, а также в реконфигурируемой фотонике. Несколько лет назад было показано, что GeTe обладает рекордно большим эффектом Рашбы [16–19], что открывает возможности его использования в спинтронике. При этом в пленках GeTe выделяют как объемный, так и поверхностный эффект Рашбы [20,21].

Такому изобилию полезных функциональных свойств у такого простого, казалось бы, материала могут „позавидовать“ многие многокомпонентные составы [22,23]. В данной работе мы демонстрируем, что у теллурида германия есть еще одно функциональное качество: этот материал обладает еще и выраженным флексоэлектрическим эффектом (поляризационный отклик на градиент деформации) [24–32]. Такая „новая“ возможность управления поляризацией представляет собой большое прикладное значение, расширяя возможности применений GeTe в ряду практически важных сегнетоэлектриков, сегнетоэлектриков-мультиферроиков, сегнетоэлектриков-сверхпроводников, родственных полярных материалов в разнообразных приборах и устройствах современной электроники, оптики и спинтроники [33–37].

В отличие от большинства сегнетоэлектриков, в которых направление дипольного момента можно контролировать с помощью внешнего электрического поля, в GeTe такой способ управления поляризацией затруднен из-за высокой электропроводности материала, хотя возможность переворота дипольного момента в тонких эпитаксиальных пленках GeTe была продемонстрирована с применением силовой микроскопии пьезоэлектрического отклика [38]. В связи с этим возникает вопрос об аль-

тернативных методах воздействия на тонкие пластины GeTe, которые могут привести к перевороту дипольного момента.

Ковалентные радиусы теллура (1.36 Å) и германия (1.21 Å) заметно различаются, в связи с чем естественно вспоминается эффект Горского [39], предсказанный еще в 1935 г. Суть этого эффекта заключается в том, что при неоднородной деформации кристалла, например, при изгибе, на атомы (ионы) материала действуют силы, зависящие от размеров атомов, так что атомы с большим радиусом смещаются в область растяжения кристалла, а атомы с меньшим радиусом — в область сжатия, причем данный эффект является обратимым. Логично предположить, что в случае полярных связей такие смещения атомов могут приводить к формированию дипольного момента (индуцированной поляризации) в изначально центросимметричном кристалле за счет флексоэлектрического эффекта, представляющего собой поляризационный отклик на градиент деформации.

Целью настоящей работы является проверка данной гипотезы (существование флексоэлектрического эффекта в GeTe) и его комплексное исследование посредством выполнения *ab initio* расчетов поляризации и оптических свойств изогнутых и недеформированных пластин GeTe и проведения электрических измерений.

2. Метод расчета и методика эксперимента

Исследуя теоретически флексоэлектрический эффект в тонких пластинах GeTe посредством выполнения *ab initio* расчетов поляризационного отклика на градиент деформации мы сталкиваемся с задачей вычисления индуцированной макроскопической поляризации [40].

Ab initio расчеты поляризации выполнялись нами методом фазы Берри [41–47], имплементированным в плосковолновой код CASTEP [48,49]. Расчеты проводились с обобщенным градиентным обменно-корреляционным функционалом в форме PBEsol [50] и двумя типами скалярно-релятивистских псевдопотенциалов, описывающих взаимодействие валентных электронов с ионными остовами. В расчетах спонтанной поляризации объемной ромбоэдрической фазы GeTe и $LiTaO_3$ использовались предложенные Хаманном в работе [51] оптимизированные сохраняющие норму пседопотенциалы Вандербильта ONCV (Optimized Norm-Conserving Vanderbilt), обеспечивающие высокую точность расчета, которые брались из базы данных Шлипф–Гиги (вып. 2020-02-06) [52]. В расчетах индуцированной поляризации квазидвумерных модельных пластин GeTe — так называемые ультрамягкие (ultrasoft) псевдопотенциалы из базы самого кода CASTEP, сгенерированные с градиентным обменно- корреляционным функционалом в форме PBE [53]. Дополнительно были проведены существенно более ресурсоемкие расчеты с ONCV псевдопотенциалами, численные результаты которых приведены в работе.

Экспериментальная верификация полученных результатов проводилась на тонкопленочных образцах GeTe. Образцы представляли собой планарные структуры с вольфрамовыми электродами, между которыми методом магнетронного распыления наносился слой GeTe с толщиной 130 nm. В качестве подложки использовался гибкий полиимид (каптон). После напыления пленка была подвергнута отжигу при температуре 250°C, и закристаллизована в ромбоэлрическую структуру с пространственной группой $R3m$, что было подтверждено рентгеноструктурным анализом.

Образец закреплялся неподвижно на специальной форме. При помощи вольфрамовых зондов осуществлялось продавливание краев образца для осуществления изгиба, а также обеспечивалось электрическое подключение к источнику питания Agilent E3647A и пикоамперметру Keithley 6485. Измерялось сопротивление образца при разных степенях изгиба. Поскольку зонная структура полупроводника (а значит и его сопротивление) изменяется при его деформации, что лежит в основе стрейнтроники, изменения сопротивления при изгибе могут служить косвенным подтверждением наличия флексоэлектрического эффекта.

3. Результаты и обсуждение

Низкотемпературная (сегнетоэлектрическая) фаза GeTe, стабильная до температур порядка 630–670 K [3,8,9], является ромбоэдрической, и условно ее можно представить как искаженную решетку типа поваренной соли, в которой атомы одного сорта несколько смещены от центросимметричных позиций, так что образуются подрешетки коротких (2.82 Å) и длинных (3.15 Å) связей Ge–Te. Кроме этого, несколько искажаются валентные углы, так что решетка перестает быть кубической. Структура ромбоэдрического теллурида германия (с пространственной группой $R3m$) показана на рис. 1, *a*. Короткие (более сильные) связи показаны более толстыми двухцветными цилиндрами, длинные (более слабые) связи не показаны. Наличие в структуре чередующихся коротких и длинных связей Ge–Te приводит к появлению в материале дипольного момента (спонтанной поляризации). Заметим, что при повышении температуры распределение длинных и коротких связей становится стохастическим и материал становится параэлектриком [54]).

Вернемся к рассмотрению тонкой пластины GeTe, состоящей из нечетного числа атомных плоскостей и ограниченной с обеих сторон, например, атомными плоскостями теллура. Такая структура является симметричной и после релаксации методом функционала плотности принимает вид, показанный на рис. 1, *b*. Здесь сплошными двухцветными линиями показаны пары Ge–Te, расположенные на расстоянии < 3 Å друг

от друга. Более длинные связи Ge–Te, как и ранее, не показаны. Видно, что в данной структуре формируются два слоя (верхний и нижний), с противоположно направленными электрическими диполями, образованными за счет разности электроотрицательностей двух элементов таким образом, что суммарный дипольный момент (поляризация) пластины равен нулю.

На рис. 1, *c* показана структура такой пластины, изогнутой с радиусом кривизны 130 Å. Видно, что, в то время как диполи в нижнем слое сохраняются, часть атомов Ge верхнего слоя начинают взаимодействовать с изначально центральным слоем атомов теллура, изначально находящимся на большем расстоянии, таким образом, что за счет резонансных связей образуются неполярные фрагменты Te–Ge–Te так, что суммарный дипольный момент верхнего слоя уменьшается, а значит результирующий дипольный момент пластины становится отличным от нуля. Качественные рассуждения, приведенные выше, подтверждаются результатами расчетов поляризации.

В то время как дипольный момент (спонтанная поляризация) недеформированной пластины GeTe равен нулю, после изгиба появляется индуцированная поляризация равная $\sim 1.0\,\mu$C/cm^2. Много это или мало? Для сравнения нами была рассчитана спонтанная поляризация тонкой пластины GeTe в ромбоэдрической фазе, состоящей из четырех атомных плоскостей Ge–Te–Ge–Te. Рассчитанная поляризация такой пластины составила $\sim 0.9\,\mu$C/cm^2. Иными словами, величина флексоэлектрической поляризации, возникающей при изгибе симметричной пластины Te–Ge–Te–Ge–Te, оказывается того же порядка, что и рассчитанная спонтанная поляризация пластины (Ge–Te–Ge–Te) ромбоэдрического GeTe аналогичной толщины.

Вследствие отмеченной выше выраженной проводимости, корректное экспериментальное определение диэлектрической поляризации (разности поляризаций) GeTe стандартными методами измерений петель диэлектрического гистерезиса (hysteresis loop-method) или импульсного поля (pulsed-field method) затруднено. Расчеты позволяют обойти эту проблему. Первопринципный расчет спонтанной поляризации объемной ромбоэдрической фазы GeTe, дал значение $49\,\mu$C/cm^2. Эта величина сопоставима с экспериментальными величинами спонтанной поляризации таких сегнетоэлектрических материалов как $BaTiO_3$ ($26\,\mu$C/cm^2), $KNbO_3$ ($30\,\mu$C/cm^2), $LiNbO_3$ ($71\,\mu$C/cm^2), $LiTaO_3$ ($50\,\mu$C/cm^2) [45]. Экспериментальное значение спонтанной поляризации для объемной ромбоэдрической фазы GeTe нам неизвестно, поэтому для верификации ее теоретического значения, полученного в данной работе, в тех же приближениях нами была рассчитана спонтанная поляризация кристалла $LiTaO_3$, для которой было получено значение $46\,\mu$C/cm^2, хорошо согласующееся с экспериментальным значением $50\,\mu$C/cm^2.

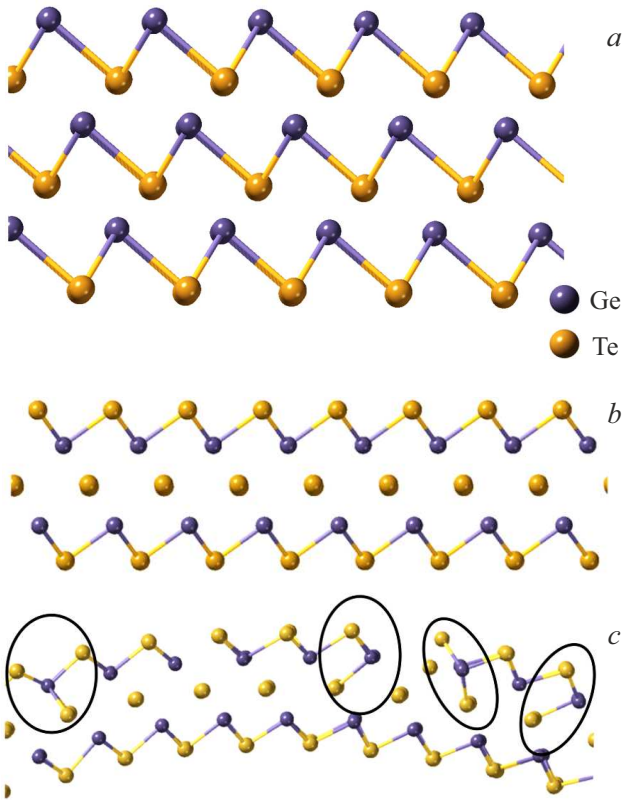


Рис. 1. (*a*) Структура ромбоэдрической фазы GeTe. Короткие связи (< 2.9 A) показаны двухцветными цилиндрами, длинные (~ 3.3 A) связи не показаны. Отрелаксированная структура прямого (*b*) и изогнутого (*c*) пятислойника Te–Ge–Te–Ge–Te. Короткие связи показаны двухцветными цилиндрами. Видно, что в недеформированном пятислойнике диполи в верхней и нижней областях полностью компенсируют друг друга, в то время, как в изогнутой структуре диполи Ge–Te сохраняются только в нижней области. В верхней области частично образуются структурные единицы Te–Ge–Te, не имеющие дипольного момента, в результате чего общий дипольный момент пластины становится отличным от нуля.

В дополнение к первопринципным расчетам индуцированной поляризации изогнутых пластин GeTe, результаты которых прямо указывают на наличие флексоэлектрического эффекта, мы выполнили также расчеты оптических констант. Оказалось, что рассчитанные нами „из первых принципов“ коэффициенты преломления и экстинции изогнутых пластин значительно отличаются от таковых для недеформированных пластин (рис. 2), что говорит о резком контрасте их оптических свойств, характерном для фазопеременных материалов. На наш взгляд, это можно также рассматривать и как дополнительное косвенное свидетельство наличия флексоэлектрического эффекта.

Для экспериментальной верификации флексоэлектрического эффекта тонкая пленка GeTe (~ 130 nm) была сформирована магнетронным распылением. Пленка подвергалась изгибу, при этом измерялось электрическое

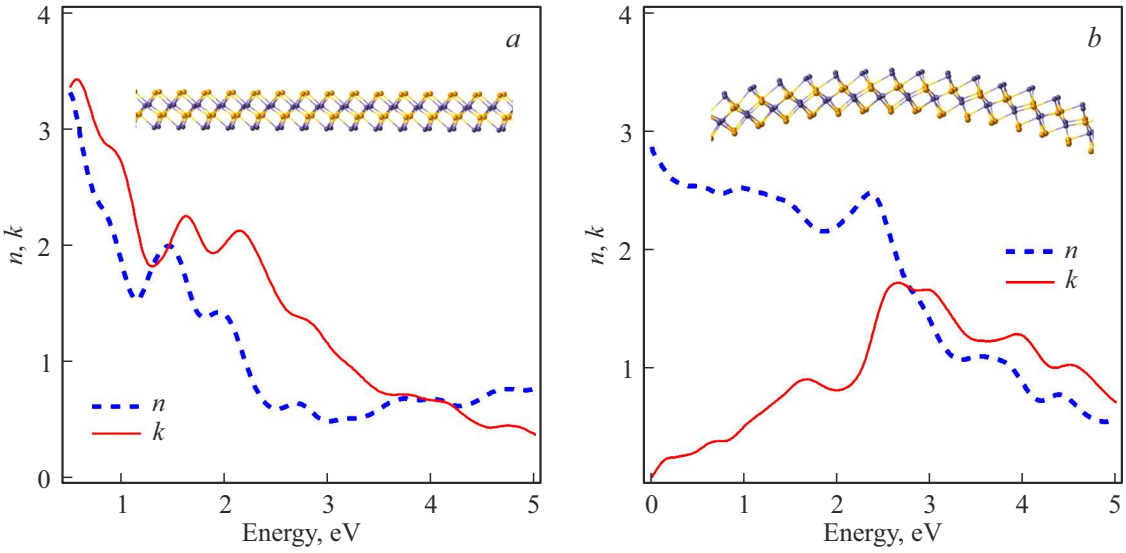


Рис. 2. Оптические константы прямой (a) и изогнутой (b) пластины Ge–Te–Ge–Te.

сопротивление пленки. Результат, приведенный на рис. 3 показывает, что сопротивление пленки обратимым образом изменяется при изгибе, причем в интервале изгибов 20–50 градусов, величина сопротивления при нагрузке больше, чем без нее.

Несмотря на то, что прямой анализ результата в рамках флексоэлектрического эффекта затруднен тем обстоятельством, что закристаллизованная пленка является поликристаллической, эксперимент однозначно

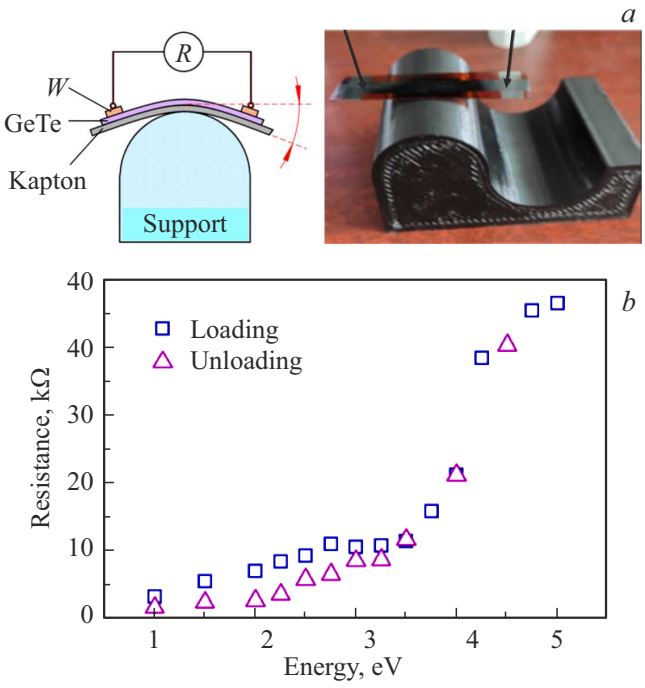


Рис. 3. Схема эксперимента (a) и обратимое изменение проводимости при изгибе закристаллизованной пленки GeTe на подложке из каптона (b).

демонстрирует, что изгиб слоя GeTe приводит к обратимому изменению его электрических свойств. Полученное можно связать с явлениями „strain engineering“, при которых однородные деформации сопровождаются изменениями ширины запрещенной зоны и структуры зоны проводимости, и которые естественно полагать так же происходят и выражены при неоднородной деформации в условиях флексоэлектрического эффекта, особенно в ускозонном GeTe.

Обнаруженный флексоэлектрический эффект в GeTe представляется особенно интересным в связи с наличием в GeTe гигантского эффекта Рашбы [16–19]. Величина расщепления Рашбы в GeTe составляет $k_R = 0.14\,\text{Å}^{-1}$, что существенно больше, чем в других материалах, демонстрирующих эффект Рашбы. Было предсказано, что в полупроводниках с эффектом Рашбы существует органическая связь между сегнетоэлектрической поляризацией и хиральностью спина в Рашбовских состояниях, что позволяет управлять спиновым транспортом за счет манипулирования сегнетоэлектрической поляризацией. Преобразование спинового тока в зарядовый была продемонстрирована экспериментально [55], также было продемонстрировано, как теоретически, так и экспериментально, переворот спина в GeTe за счет изменения сегнетоэлектрической поляризации [56,57], что позволяет контролировать состояние спина путем приложения электрического поля. Результаты, полученные в настоящей работе, позволяют предложить новый — механический — способ управления спиновыми свойствами.

4. Заключение

В настоящей работе с помощью расчетов из первых принципов показано возникновение в изогнутой тонкой

пластине GeTe флексоэлектрической поляризации порядка $1.0\,\mu C/cm^2$, что по порядку величины сравнимо с величиной спонтанной поляризации в ромбоэдрическом GeTe аналогичной толщины. Эффект представляется особо интересным в связи с наличием в GeTe гигантского эффекта Рашбы, так как создает возможность механического контроля спиновых свойств, что представляет несомненный интерес для разработки новых устройств спинтроники.

Полученная первопринципная оценка величины спонтанной поляризации объемной ромбоэдрической фазы GeTe, дает значение $\sim 49\,\mu C/cm^2$, что сопоставимо с экспериментальными величинами спонтанной поляризации модельных сегнетоэлектрических материалов таких как $BaTiO_3$ ($26\,\mu C/cm^2$), $KNbO_3$ ($30\,\mu C/cm^2$), $LiNbO_3$ ($71\,\mu C/cm^2$), $LiTaO_3$ ($50\,\mu C/cm^2$).

Продемонстрировано также, что деформация изгиба приводит к существенному изменению оптических параметров кристаллического GeTe, что, в сочетании с выраженным оптическим контрастом свойств между кристаллическим и аморфным состояниями, открывает новые функциональные возможности теллурида германия при разработке ячеек памяти и элементов активной фотоники на основе фазопеременных материалов, а также для применений в гибкой электронике.

Наблюдавшаяся экспериментально зависимость сопротивления от изгиба пленки, связанная с ее деформацией, может быть обусловлена как однородными напряжениями, возникающими в пленке, так и их градиентами. Для выделения вклада флексоэлектрического эффекта требуются дополнительные эксперименты, в частности, по измерению переходных токов.

Финансирование работы

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (грант 22-19-00766); часть расчетов проводилась на суперкомпьютере ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] H. Cheng, H. Yao, Y. Xu, J. Jiang, Y. Yang, J. Wang, X. Li, Y. Li, J. Shao. Chem. Mater. **36**, 3764 (2024).
[2] Н.Х. Абрикосов, Л.Е Шелимова. Полупроводниковые материалы на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$. Наука, М. (1975). 195 с.
[3] J.N. Bierly, L. Muldawer, O. Beckman. Acta Metallurgica **11**, 447 (1963).
[4] J. Goldak, C.S. Barrett, D. Innes, W. Youdelis. J. Chem. Phys. **44**, 3323 (1966).
[5] G.S. Pawley, W. Cochran, R.A. Cowley, G. Dolling. Phys. Rev. Lett. **17**, *14*, 753 (1966).
[6] Т.Б. Жукова, А.И. Заславский. Кристаллография **12**, 37 (1967).
[7] E.F. Sreigmeier, G. Harbeke. Solid. St. Comm. **8**, 1275 (1970).
[8] T. Chattopadhyay, J.X. Boucherle, H.G. Von Schnering. J. Phys. C **20**, 1431 (1987).
[9] U.D. Wdowik, K. Parlinski, S. Rols, T. Chatterji. Phys. Rev. B **89**, 224306 (2014).
[10] J. Li, X. Zhang, X. Wang, Z. Bu, L. Zheng, B. Zhou, F. Xiong, Y. Chen, Y. Pei. J. Am. Chem. Soc. **140**, *47*, 16190 (2018).
[11] J. Li, X. Zhang, Z. Chen, S. Lin, W. Li, J. Shen, I.T. Witting, A. Faghaninia, Y. Chen, A. Jain, L. Chen, G.J. Snyder, Y. Pei1. Joule **2**, 1 (2018).
[12] M. Hong, J. Zou, Z.G. Chen. Adv. Mater. 1807071 (2019).
[13] X. Zhang, Z. Bu, S. Lin, Z. Chen, W. Li, Y. Pei1. Joule **4**, 1 (2020).
[14] M. Li, X.L. Shi, Z.G. Chen. Adv. Funct. Mater. **34**, 2403498 (2024).
[15] A.V. Kolobov, J. Tominaga. Chalcogenides: metastability and phase-change phenomena. Springer, London. (2012). 284 p.
[16] D. Di Sante, P. Barone, R. Bertacco, S. Picozzi. Adv. Mater. **25**, *4*, 509 (2013).
[17] M. Liebmann, C. Rinaldi, D. Di Sante, J. Kellner, C. Pauly, R.N. Wang, J.E. Boschker, A. Giussani, S. Bertoli, M. Cantoni, L. Baldrati, M. Asa, I. Vobornik, G. Panaccione, D. Marchenko, J. Sánchez-Barriga, O. Rader, R. Calarco, S. Picozzi, R. Bertacco, M. Morgenstern. Adv. Mater. **28**, *3*, 560 (2016).
[18] L. Ponet, S. Artyukhin. Phys. Rev. B **98**, 174102 (2018).
[19] X. Yang, X.M. Li, Yang Li, Yan Li, R. Sun, J.N. Liu, X. Bai, N. Li, Z.K. Xie, L. Su, Z.Z. Gong, X.Q. Zhang, W. He, Z. Cheng. Nano Lett. **21**, *1*, 77 (2021)
[20] H.J. Elmers, R. Wallauer, M. Liebmann, J. Kellner, M. Morgenstern, R.N. Wang, J.E. Boschker, R. Calarco, J. Sanchez-Barriga, O. Rader, D. Kutnyakhov, S.V. Chernov, K. Medjanik, C. Tusche, M. Ellguth, H. Volfova, St. Borek, J. Braun, J. Minar, H. Ebert, G. Schonhense. Phys. Rev. B **98**, 201403(R) (2016).
[21] J. Krempaský, H. Volfová, S. Muff, N. Pilet, G. Landolt, M. Radović, M. Shi, D. Kriegner, V. Holý, J. Braun, H. Ebert, F. Bisti, V.A. Rogalev, V.N. Strocov, G. Springholz, J. Minár, J.H. Dil. Phys. Rev. B **94**, 205111 (2016).
[22] J.E. Boschker, R. Wang, R. Calarco. CrystEngComm. **19**, 5324 (2017).
[23] C.M. Acosta, A. Fazzio, G.M. Dalpian, A. Zunger, Phys. Rev. B **102**, 144106 (2020)
[24] А.К. Таганцев. ЖЭТФ **88**, 2108 (1985).
[25] А.К. Таганцев. УФН **152**, 423 (1987).
[26] A.K. Tagantsev. Phase Transit. **35**, 119 (1991).
[27] P. Zubko, G. Catalan, A.K. Tagantsev. Annu. Rev. Mater. Res. **43**, 387 (2013).
[28] P.V. Yudin, A.K. Tagantsev. Nanotechnology **24**, 432001 (2013).
[29] A.K. Tagantsev, P.V. Yudin. In: Flexoelectricity in solids: from theory to applications. / Eds. A.K. Tagantsev, P.V. Yudin. New Jersey: World Scientific. (2016). P. 1.
[30] B. Wanga, Y. Gua, S. Zhanga, L.-Q. Chen. Progr. Mat. Sci. **106**, 100570 (2019).
[31] Q. Deng, S. Lv, Z. Li, K. Tan, X. Liang, S. Shen. J. Appl. Phys. **128**, 080902 (2020).
[32] J. Ji, G. Yu, C. Xu, H.J. Xiang. Nat. Commun. **15**, 135 (2024).
[33] А.К. Звездин, А.А. Мухин. Письма в ЖЭТФ **89**, 385 (2009).

[34] А.И. Александров, И.А. Александров, В.Г. Шевченко. Письма в ЖЭТФ **104**, 581 (2016).
[35] V. Garcia, M. Bibes, Nature **483**, 279 (2012).
[36] F. Bernardini. In: Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation. Wiley-VCH, Berlin. (2007). part. 3, P. 49.
[37] H.Y. Hwang, Y. Iwasa, M. Kawasaki, B. Keimer, N. Nagaosa, Y. Tokura. Nat. Mater. **11**, 103 (2012).
[38] A.V. Kolobov, D.J. Kim, A. Giussani, P. Fons, J. Tominaga, R. Calarco, A. Gruverman. APL Mater. **2**, 066101 (2014).
[39] W.S. Gorsky. Phys. Zeitschr. Sowjet. **8**, 457 (1935).
[40] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Физматлит, М. (1992). 656 с.
[41] Р. Реста, Д. Вандербильт. В сб.: Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд. / Под ред. К.М. Рабе, Ч.Г. Ана, Ж.-М. 3-е издание, Бином, М. (2015). С. 43.
[42] R.D. King-Smith, D. Vanderbilt. Phys. Rev. B **47**, 1651(R) (1993).
[43] R. Resta. Rev. Mod. Phys. **66**, 899 (1994).
[44] R. Resta, D. Vanderbilt. Physics of Ferroelectrics. Topics in Applied Physics. **105**, Springer, Berlin, Heidelberg (2007).
[45] М. Лайнс, А. Гласс. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. Мир., М. (1981). 736 с.
[46] D. Vanderbilt. Berry Phases in Electronic Structure Theory. Cambridge, University Press. (2018). 384 p.
[47] D. Xiao, M.C. Chang, Q. Niu. Rev. Mod. Phys. **82**, *3*, 1959 (2010).
[48] M.D. Segall, P.J.D. Lindan, M.J. Probert, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, S.J. Clark, M.C. Payne. J. Phys: Cond. Matter. **14**, 2717 (2002).
[49] S.J. Clark, M.D. Segall, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, M.J. Probert, K. Refson, M. Payne. Z. Kristallogr. Cryst. Mater. **220**, 567 (2005).
[50] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke. Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008).
[51] D.R. Hamann. Phys. Rev. B **88**, 085117 (2013).
[52] M. Schlipf, F. Gygi. Comp. Phys. Commun. **196**, 36 (2015).
[53] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, *18*, 3865 (1996).
[54] P. Fons, A.V. Kolobov, M. Krbal, J. Tominaga, K.S. Andrikopoulos, S.N. Yannopoulos, G.A. Voyiatzis, T. Uruga. Phys. Rev.B **82**, *15*, 155209 (2010).
[55] C. Rinaldi, J.C. Rojas-Sánchez, R.N. Wang, Y. Fu, S. Oyarzun, L. Vila, S. Bertoli, M. Asa, L. Baldrati, M. Cantoni, J.-M. George, R. Calarco, A. Fert, R. Bertacco. APL Mater. **4**, 032501 (2016).
[56] C. Rinaldi, S. Varotto, M. Asa, J. Sławińska, J. Fujii, G. Vinai, S. Cecchi, D. Di Sante, R. Calarco, I. Vobornik, G. Panaccione, S. Picozzi, R. Bertacco. Nano Lett. **18**, *5*, 2751 (2018).
[57] Y.H. Meng, W. Bai, H. Gao, S.J. Gong, J.Q. Wang, C.G. Duan, J.H. Chu. Nanoscale **9**, *45*, 17957 (2017).

Редактор Ю.Э. Китаев