

05,12

## Магнитные свойства одномерных цепочек Au–Co на поверхности меди(110)

© С.В. Колесников, К.М. Цысарь, А.М. Салецкий

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

E-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

(Поступила в Редакцию 5 марта 2015 г.)

В рамках теории функционала электронной плотности вычислены магнитные свойства атомов кобальта в цепочках Au–Co на поверхности Cu(110), такие как магнитный момент, энергия магнитной анизотропии, обменный интеграл. Обнаружено, при нулевой температуре бесконечно длинная цепочка Au–Co находится в ферромагнитном состоянии. Магнитоэлектронные и магнитодинамические свойства цепочек Au–Co конечной длины при отличной от нуля температуре исследованы в рамках модели Гейзенберга с помощью кинетического метода Монте-Карло. Получены зависимости температуры Кюри и времени спонтанного перемагничивания от длины цепочки, а также зависимости коэрцитивной силы цепочки от температуры, длины цепочки и скорости перемагничивания.

При выполнении работы использованы вычислительные ресурсы Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (НИВЦ МГУ).

### 1. Введение

Стремление к миниатюризации электронных приборов, датчиков и носителей информации стимулирует экспериментальные и теоретические исследования низкоразмерных объектов, таких как нанопровода [1–3], наноконтакты [4–6] и нанокластеры [7–9]. Среди перечисленных наноструктур особый интерес представляют нанопровода на поверхности металлов и полупроводников, поскольку они зачастую формируются в результате самоорганизации на ступенчатых подложках, образуя при этом хорошо упорядоченную систему одномерных объектов, обладающих необычными физическими свойствами. В последнее время все большее внимание уделяется исследованию нанопроводов, состоящих из равномерно распределенных атомов двух или нескольких элементов [10–12]. Было показано, что свободные нанопровода Au–Co и наноконтакты обладают механической устойчивостью [13,14] и „гигантской“ магнитной анизотропией [15].

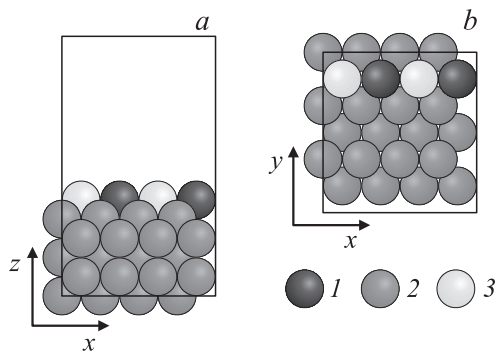
Предельным случаем нанопроводов являются одноатомные цепочки конечной длины. Исследование таких цепочек интересно как с теоретической, так и с практической точки зрения. Теоретический интерес к исследованию магнитных цепочек связан в первую очередь с тем, что, согласно известной теореме Мермина и Вагнера [6], в бесконечно длинных одномерных цепочках при отсутствии магнитной анизотропии фазовый переход второго рода невозможен. Однако, как показал ряд компьютерных исследований [17,18], в случае наличия магнитной анизотропии одномерные цепочки атомов могут переходить в ферромагнитное состояние. Практический же интерес к исследованию одномерных цепочек заключается в получении количественных магнитоэлектронных и магнитодинамических характеристик атомных

цепочек различного вида с целью оценки их возможного применения в нанoeлектронике. При этом особо важную роль играют методы компьютерного моделирования, позволяющие получать количественные характеристики различных атомных систем без проведения дорогостоящих экспериментов. Целью настоящей работы является компьютерное исследование магнитных свойств цепочек Au–Co на поверхности Cu(110) в зависимости от температуры, их длины и скорости перемагничивания.

### 2. Компьютерное моделирование

Расчет магнитных свойств одномерных цепочек Au–Co осуществлялся следующим комбинированным методом. На первом этапе в рамках теории функционала электронной плотности [19] были вычислены магнитные свойства отдельных атомов в бесконечно длинной цепочке. Затем эти данные использовались на втором этапе для моделирования магнитных свойств цепочек конечной длины кинетическим методом Монте-Карло (КМК) [17].

Магнитные свойства атомов в бесконечно длинной цепочке Au–Co были исследованы в хорошо зарекомендовавшем себя программном пакете Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [20], в котором реализована схема самосогласованного решения системы уравнений Кона–Шэма в базе плоских волн. Энергия обрезания плоских волн составляла 250 eV. При вычислениях мы использовали приближение обобщенных градиентов для функционала обменно-корреляционной энергии [21,22] и PAW-потенциалы (Projector Augmented-Wave) [23,24]. Поверхность меди(110) была смоделирована в виде периодически повторяющихся слоев, состоящих из пяти атомных плоскостей, разделенных вакуумными слоями толщиной  $\sim 10 \text{ \AA}$  (рис. 1). Горизонтальные размеры



**Рис. 1.** Схематическое изображение ячейки для моделирования бесконечной цепочки Au–Co на поверхности Cu(110). *a* — вид сбоку, *b* — вид сверху. 1 — атомы Co, 2 — атомы Cu, 3 — атомы Au. Границы ячейки изображены сплошными линиями. В направлениях *x*, *y*, *z* наложены периодические граничные условия.

модельной ячейки были выбраны равными  $\sim 10 \times 10 \text{ \AA}$ , что позволяет избежать взаимодействия цепочки Au–Co со своим образом в направлении *y*. Сначала положения атомов оптимизировались с помощью реализованной в VASP молекулярной динамики. Силы, действующие на атомы, вычислялись в скалярно-релятивистском приближении. Оптимизация проводилась до тех пор, пока силы, действующие на атомы, не становились меньше  $0.01 \text{ eV/\AA}$ . Вычисленные таким образом координаты атомов и электронная плотность использовались далее для вычисления магнитных моментов атомов, энергии обменного взаимодействия и энергии магнитной анизотропии с учетом спин-орбитального взаимодействия. При вычислении полной энергии системы проводилось интегрирование в импульсном пространстве по сетке *k*-точек  $3 \times 3 \times 1$ , сгенерированной по схеме Монкхорста–Пака [25]. Аналогичная методика использовалась для вычисления магнитных свойств атомов Co и Fe на поверхностях Pd(111), Rh(111) и Cu(100) [26,27].

Для моделирования магнитных свойств цепочек конечной длины был использован КММК, предложенный в работе [17]. Предполагая, что только атомы кобальта имеют ненулевые магнитные моменты, можем записать для одномерной цепочки атомов гамильтониан Гейзенберга в виде

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) - K \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e})^2 - \mu \sum_i (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{s}_i$  и  $\mathbf{e}$  — единичные векторы магнитных моментов атомов Co и оси легкого намагничивания соответственно,  $J_{ij}$  — обменный интеграл,  $K$  — энергия магнитной анизотропии. Мы предполагаем, что, во-первых, величины магнитных моментов  $\mu$  атомов кобальта не зависят ни от их направления, ни от положения атома в цепочке. Во-вторых, внешнее магнитное поле  $\mathbf{B}$  приложено вдоль оси легкого намагничивания  $\mathbf{e}$ . В-третьих, атомы кобальта взаимодействуют только с ближайшими соседями, и

величина этого взаимодействия не зависит от положения атома в цепочке, т.е.  $J_{ij} = J(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$ , где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера. При этих условиях единичные векторы  $\mathbf{s}_i$  имеют два метастабильных направления: параллельно и антипараллельно оси легкого намагничивания  $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = \pm 1$ .

Будем рассматривать магнитные моменты атомов Co как классические векторы. Тогда вращение *i*-го магнитного момента может происходить двумя различными способами. Если  $2K > |h_i|$ , где  $h_i = \sum_j J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) + \mu (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B})$ , то энергетический барьер для переориентации магнитного момента равен

$$\Delta E_i^D = \frac{(2K + h_i)^2}{4K}, \quad (2)$$

и частота переворотов магнитных моментов определяется выражением

$$\nu_i = \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_i^D}{k_B T}\right), \quad (3)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура медной подложки,  $\nu_0 = 10^9 \text{ Hz}$  [1] — частотный префактор. Если же  $2K \leq |h_i|$ , то энергетический барьер между состояниями  $(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}) = \pm 1$  отсутствует, и частота переворотов магнитных моментов может быть вычислена как

$$\nu = \nu_0 \frac{\exp(-\Delta E_i/k_B T)}{1 + \exp(-\Delta E_i/k_B T)}, \quad (4)$$

где  $\Delta E_i$  — разность энергий цепочки до и после переворота магнитного момента [28]. Вычисленные по формулам (3) и (4) частоты используются далее для вычисления приращения времени на одном КММК-шаге [29].

### 3. Результаты и обсуждение

Проведенные вычисления показали, что спиновый магнитный момент атомов Co в бесконечной цепочке Au–Co на поверхности Cu(110) практически не зависит от направления оси намагничивания и равен  $\mu_S = 1.76\mu_B$ , где  $\mu_B$  — магнетон Бора. Полученное значение спинового магнитного момента атомов Co меньше, чем в бесконечной свободной цепочке Au–Co [15]. Уменьшение магнитного момента атомов Co на поверхности связано с их взаимодействием с атомами меди. Аналогичный эффект был обнаружен для цепочек кобальта конечной длины на ступенчатой поверхности Cu(111) [30]. В работе [30] также показано, что спиновый магнитный момент атомов Co слабо зависит от положения атома в цепочке. Так, для цепочки из семи атомов кобальта магнитный момент крайнего атома превосходит магнитный момент центрального атома всего на 6%.

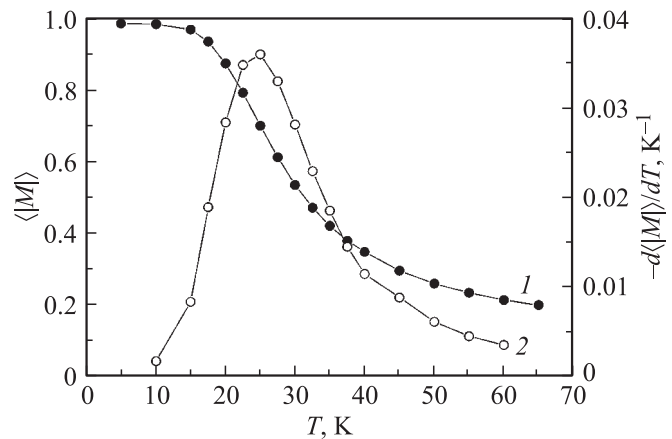
Энергия магнитной анизотропии  $K_{ix}$  (где  $i = y, z$ ) вычислялась как разность полных энергий всех атомов

в расчетной ячейке (деленная на 2, так как в ячейке два атома Co) в случае, когда магнитные моменты атомов Co направлены по осям  $i$  и  $x$ :  $K_{ix} = (E_i - E_x)/2$ . Направления осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  показаны на рис. 1. Согласно нашим расчетам,  $K_{yx} = 3$  meV и  $K_{zx} = 7$  meV. Таким образом, осью легкого намагничивания является ось  $x$ , направленная вдоль цепочки Au–Co, а вращение магнитных моментов происходит в плоскости  $xy$ , т.е. в плоскости поверхности Cu(110). Последнее утверждение, конечно, справедливо только при низких температурах  $T \lesssim (K_{zx} - K_{yx})/k_B \approx 46$  К. Далее показано, что для достаточно длинных цепочек температура Кюри удовлетворяет этому условию. Поэтому далее будем считать, что в гамильтониане (1)  $K = K_{yx}$ . Отметим, что ось легкого намагничивания для цепочек конечной длины из атомов Co на поверхности Cu(111) также направлена вдоль цепочки [30], при этом на концах цепочки наблюдаются небольшие осцилляции энергии магнитной анизотропии  $\Delta K \sim 1$  meV. Понятно, что для достаточно длинных цепочек и не очень низких температур  $T \gtrsim \Delta K/k_B \approx 11.6$  К такие осцилляции можно не учитывать.

Для определения обменного интеграла  $J$  мы вычислили полную энергию всех атомов в случае ферромагнитного  $E_{FM}$  и антиферромагнитного  $E_{AFM}$  упорядочения магнитных моментов атомов Co. В том случае, когда магнитные моменты атомов Co параллельны оси легкого намагничивания, разность  $E_{FM} - E_{AFM}$  оказывается равной  $-41$  meV. Отсюда обменный интеграл  $J$ , входящий в гамильтониан (1), равен  $J = -(E_{FM} - E_{AFM})/8 = 5.125$  meV. Таким образом, мы ожидаем появления ферромагнитного упорядочения магнитных моментов при низких температурах.

Таким образом, при КММК-моделировании будем использовать следующие параметры гамильтониана (1):  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mu = 1.76\mu_B$ . Для того чтобы минимизировать влияние краевых эффектов, будем рассматривать достаточно длинные цепочки Au–Co, содержащие свыше ста атомов кобальта  $N \geq 100$ .

Рассмотрим сначала свойства цепочек Au–Co на поверхности Cu(110) при отсутствии внешнего поля  $\mathbf{V} = 0$ . Наиболее интересными величинами, которые можно вычислить в этом случае, являются температура Кюри и среднее время спонтанного перемагничивания цепочки. Компьютерное моделирование позволяет вычислить температуру Кюри фактически по ее определению, т.е. как температуру, при которой параметр порядка обращается в нуль. Здесь необходимо отметить две особенности, которые возникают вследствие конечной длины цепочек Au–Co. Во-первых, основное состояние ферромагнитной цепочки конечной длины двукратно вырождено и время перехода из одного основного состояния в другое конечно, поэтому в качестве параметра порядка следует использовать не среднюю намагниченность цепочки  $\langle M \rangle$ , а средний модуль намагниченности  $\langle |M| \rangle$ . Во-вторых, в случае цепочек конечной длины параметр порядка не обращается в нуль ни при каких температурах,



**Рис. 2.** Зависимость среднего модуля намагниченности  $\langle |M| \rangle$  (1) и его первой производной  $-d\langle |M| \rangle/dT$  (2) для цепочки Au–Co, содержащей  $N = 100$  атомов кобальта, от температуры  $T$ . Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mathbf{V} = 0$ .

поэтому температурой фазового перехода принято считать температуру, при которой минимальна производная от параметра порядка по температуре, т.е. величина  $-d\langle |M| \rangle/dT$  максимальна.

В качестве примера на рис. 2 показаны зависимости  $\langle |M| \rangle^1$  и  $-d\langle |M| \rangle/dT$  от температуры  $T$  для цепочки Au–Co на поверхности Cu(110), содержащей  $N = 100$  атомов кобальта. Видно, что средняя намагниченность наиболее быстро меняется в интервале температур от 12.5 до 40 К, т.е. как раз в той области, в которой применение модели, описываемой гамильтонианом (1), наиболее обосновано. Температура Кюри, определенная по максимуму функции  $-d\langle |M| \rangle/dT$ , оказывается равной  $T_C = 25.2 \pm 2.5$  К. На рис. 3 приведена зависимость температуры Кюри цепочки Au–Co от числа атомов кобальта. Полученные значения температуры Кюри хорошо аппроксимируются следующей зависимостью

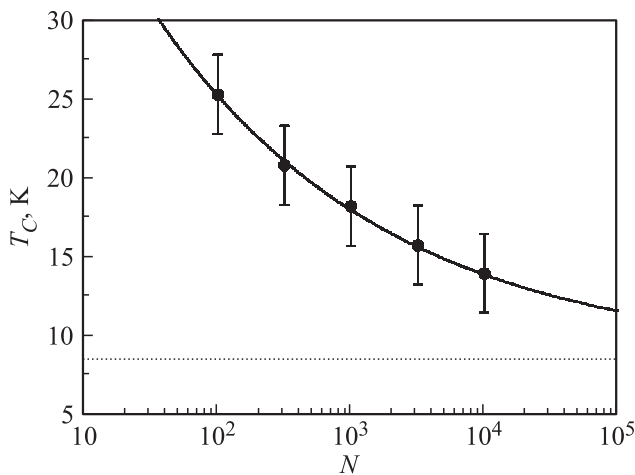
$$T_C(N) = \frac{A}{N^b} + T_\infty, \quad (5)$$

где  $A = 52.27$  К,  $b = 0.249$  и  $T_\infty = 8.47$  К — подгоночные параметры. Параметр  $T_\infty$  имеет простой физический смысл, это температура Кюри бесконечно длинной цепочки. Здесь следует отметить, что на первый взгляд ненулевое значение  $T_\infty$  противоречит теореме Мермина и Вагнера об отсутствии ферромагнетизма в одномерной и двумерной модели Гейзенберга [16]. Однако при доказательстве теоремы предполагалось, что энергия магнитной анизотропии  $K$  равна нулю. Можно показать [18], что температура Кюри бесконечно длинных атомных цепочек на поверхности меди действительно стремится к нулю в пределе  $K \rightarrow 0$ , поэтому никакого противоречия с теоремой Мермина–Вагнера не возникает. Наконец,

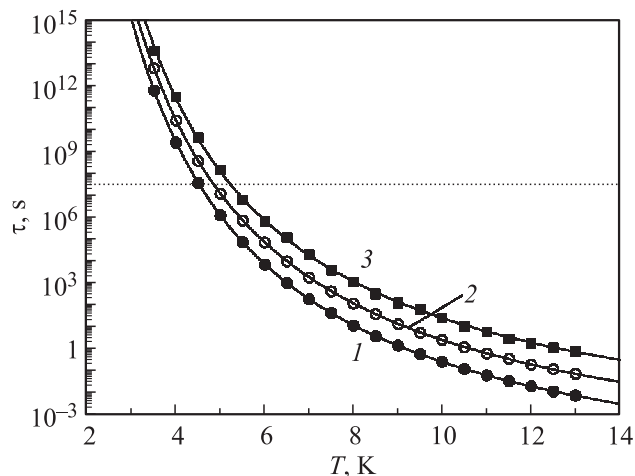
<sup>1</sup> Здесь и далее будем приводить значения  $\langle |M| \rangle$  в безразмерных единицах, т.е.  $\langle |M| \rangle \in [0, 1]$ .

подчеркнем, что зависимость (5) получена для достаточно длинных цепочек ( $N \gtrsim 100$  атомов кобальта), и ее использование для коротких цепочек ( $N \sim 10$ ) может привести к заведомо неправильным результатам.

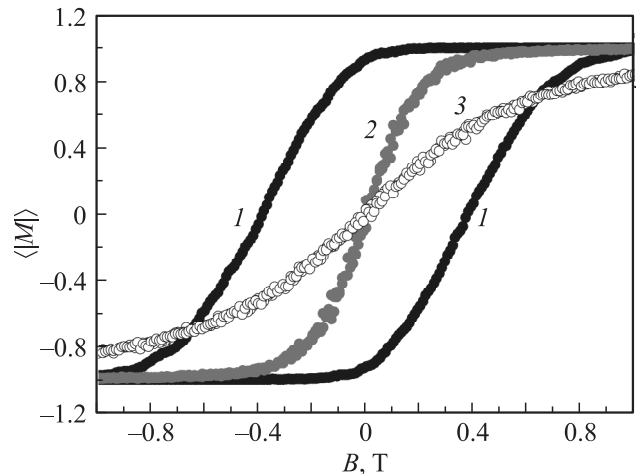
Среднее время спонтанного перемагничивания цепочки интересно в первую очередь с точки зрения перспектив создания компактных носителей информации. Например, в работе [7] показано, что двумерный кластер из 400 атомов кобальта на поверхности Pt(111) может быть использован при комнатной температуре как стабильный бит информации. Перспективы использования одномерных ферромагнитных цепочек в качестве стабильных битов, к сожалению, не столь оптимистичны. На рис. 4 показана зависимость времени спонтанно-



**Рис. 3.** Зависимость температуры Кюри цепочки Au–Co от числа  $N$  атомов кобальта. Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mathbf{B} = 0$ . Сплошная кривая построена по формуле (5). Пунктирной линией показано значение  $T_\infty = 8.47$  K.



**Рис. 4.** Зависимости времени спонтанного перемагничивания  $\tau$  от температуры  $T$  для цепочек Au–Co с различным числом атомов кобальта  $N$ : 100 (1), 1000 (2), 10000 (3). Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mathbf{B} = 0$ . Сплошные кривые построены по формуле (6). Пунктирной линией показано время  $\tau$ , равное одному году.



**Рис. 5.** Кривые намагничивания цепочки Au–Co, содержащей  $N = 100$  атомов кобальта при температурах 12 (1), 20 (2), 30 (3). Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mu = 1.76\mu_B$ . Точками обозначены значения  $|M|$ , усредненные по 1000 циклам перемагничивания.

го перемагничивания  $\tau$  от температуры для цепочек Au–Co с различным числом атомов кобальта. Если под стабильным битом понимать цепочку, спонтанное время перемагничивания  $\tau$  которой больше, чем, например,  $\tau_0 = 1$  год, то из представленного рисунка видно, что цепочка из 100 атомов кобальта может считаться стабильным битом при температуре меньше  $T_r = 4.5$  K, причем, увеличение длины цепочки до 10000 атомов кобальта приводит к увеличению температуры  $T_r$  всего до 5 K. Как уже упоминалось, модель (1) при температуре ниже  $\sim 11.6$  K может давать не совсем корректные результаты, поскольку не учитывает осцилляций энергии магнитной анизотропии на концах цепочки. Однако понятно, что учет этих осцилляций не может привести к существенному увеличению температуры  $T_r$ . Наконец, зависимость времени спонтанного перемагничивания от температуры может быть аппроксимирована следующей простой формулой:

$$\tau = \frac{N}{2\nu_0} \exp\left(\frac{2J + K}{k_B T}\right). \quad (6)$$

Таким образом, для того чтобы время спонтанного перемагничивания цепочки из 100 магнитных атомов Co при комнатной температуре превышало один год, необходимо выполнение условия  $2J + K \gtrsim 0.88$  eV.

Рассмотрим теперь поведение цепочки Au–Co на поверхности Cu(110) в переменном магнитном поле. Будем считать, что магнитное поле направлено вдоль оси легкого намагничивания (вдоль цепочки). Проекция вектора магнитной индукции на ось легкого намагничивания  $B_x$  меняется периодически в пределах от  $-5$  до  $+5$  T со скоростью  $|dB/dt| = 130$  T/s. Кривые намагничивания цепочки Au–Co из 100 атомов при различных температурах показаны на рис. 5. Коэрцитивная сила  $B_c$  быстро уменьшается с увеличением температуры. Так,

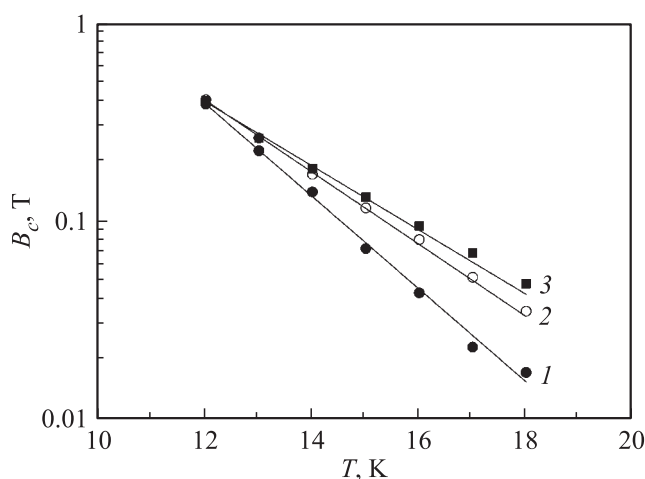
при повышении температуры от 12 до 20 К коэрцитивная сила цепочки уменьшается почти в 50 раз. При повышении температуры выше 30 К наклон кривой намагничивания резко уменьшается, как и должно быть при переходе цепочки в парамагнитную фазу.

Из кривых намагниченности для цепочек Au–Co в ферромагнитной фазе были получены коэрцитивные силы  $B_c$ . На рис. 6 представлены зависимости  $B_c$  от температуры  $T$  для цепочек с различным числом атомов кобальта. Эти зависимости хорошо аппроксимируются формулой

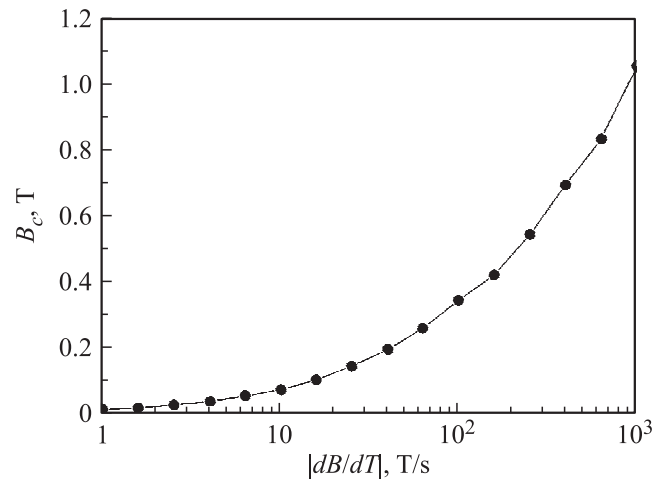
$$B_c = B_0 \exp\left(-\frac{T}{T_0}\right), \quad (7)$$

где  $B_0$  и  $T_0$  — подгоночные параметры, равные  $B_0 = 240 \pm 32$  Т и  $T_0 = 1.85 \pm 0.03$  К для цепочки из  $N = 100$  атомов кобальта;  $B_0 = 60 \pm 5$  Т и  $T_0 = 2.38 \pm 0.03$  К для цепочки из  $N = 10^{2.5} \approx 316$  атомов кобальта;  $B_0 = 33 \pm 6$  Т и  $T_0 = 2.69 \pm 0.09$  К для цепочки из  $N = 1000$  атомов кобальта. Таким образом, параметр  $B_0$  монотонно уменьшается с увеличением длины цепочки Au–Co, а параметр  $T_0$  монотонно увеличивается. При дальнейшем увеличении цепочки до  $N = 10000$  атомов кобальта параметры  $B_0$  и  $T_0$  не меняются. Отметим, что в литературе [17] встречается и другой вариант аппроксимации зависимости коэрцитивной силы от температуры  $B_c = B_0 \exp(-(T/T_0)^p)$ , где  $p$  также является подгоночным параметром. Однако зависимость параметров  $B_0$ ,  $T_0$  и  $p$  от длины магнитной цепочки оказывается немонотонной. Поэтому аппроксимация (7) является, по нашему мнению, более удачной.

В заключение рассмотрим зависимость коэрцитивной силы цепочки Au–Co на поверхности Cu(110) от скорости перемагничивания  $|dB/dt|$  (рис. 7). Коэрцитивная сила достаточно слабо зависит от скорости перемагни-



**Рис. 6.** Зависимости коэрцитивной силы  $B_c$  от температуры  $T$  для цепочек Au–Co, содержащих различное число атомов кобальта  $N$ : 100(1), 316 (2), 1000(3). Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mu = 1.76\mu_B$ . Точками обозначены значения  $B_c$ , усредненные по 1000 циклам перемагничивания. Сплошные линии построены по формуле (7).



**Рис. 7.** Зависимость коэрцитивной силы  $B_c$  цепочки Au–Co, содержащей  $N = 100$  атомов кобальта, от скорости перемагничивания  $|dB/dt|$ . Параметры гамильтониана Гейзенберга:  $J = 5.125$  meV,  $K = 3$  meV,  $\mu = 1.76\mu_B$ . Точками обозначены значения  $B_c$ , усредненные по 1000 циклам перемагничивания.

чивания при  $|dB/dt| \gtrsim 100$  Т/с. Таким образом, представленные выше результаты, которые были получены при  $|dB/dt| = 130$  Т/с, качественно не изменятся при изменении скорости перемагничивания в несколько раз. Следует отметить, что зависимость  $B_c$  от  $|dB/dt|$  нелинейна и может быть аппроксимирована, например, степенным законом  $B_c = Ax^{b(x)}$ , где  $b(x) = 0.597 - 3 \cdot 10^{-5}x$ ,  $A = 0.02$  Т,  $x = |dB/dt|/(1\text{Т/с})$ .

#### 4. Заключение

В результате исследования магнитных свойств одномерных цепочек Au–Co конечной длины на поверхности Cu(110) был обнаружен фазовый переход в ферромагнитное состояние при низких температурах  $T_C < 25$  К. Температура Кюри убывает с увеличением длины цепочки, однако вследствие наличия магнитной анизотропии остается конечной даже в пределе бесконечно длинной цепочки. Для того чтобы такие цепочки могли быть использованы для долгосрочного хранения информации, их температуру необходимо понизить до  $\sim 5$  К. Исследования зависимости коэрцитивной силы цепочек Au–Co различной длины от температуры и скорости перемагничивания показали, что одномерные цепочки Au–Co обладают интересными магнитодинамическими свойствами, что делает их привлекательными объектами для использования в наноэлектронике и низкотемпературных магнитных датчиках.

#### Список литературы

- [1] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, C. Carbone. *Nature* **416**, 301 (2002).
- [2] P.A. Ignatiev, V.S. Stepanyuk, A.L. Klavysyuk, W. Hergert, P. Bruno. *Phys. Rev. B* **75**, 155 428 (2007).

- [3] А.Г. Сыромятников, А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий. Письма в ЖЭТФ **100**, 26 (2014).
- [4] H. Ohnishi, Y. Kondo, K. Takayanagi. Nature **395**, 780 (1998).
- [5] К.М. Цысарь, Д.И. Бажанов, А.М. Салецкий, V.S. Stepanyuk, W. Hergert. ФТТ **52**, 593 (2009).
- [6] С.В. Колесников, А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий. ФТТ **55**, 1834 (2013).
- [7] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S.S. Dhési, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P.H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, H. Brune. Science **16**, 1130 (2003).
- [8] S.V. Kolesnikov, A.L. Klavsyuk, A.M. Saletsky. Phys. Rev. B **79**, 115433 (2009).
- [9] С.В. Колесников. Письма в ЖЭТФ **99**, 329 (2014).
- [10] К.М. Цысарь, Е.М. Смелова, Д.И. Бажанов, А.М. Салецкий. Письма в ЖЭТФ **94**, 246 (2011).
- [11] E.M. Smelova, K.M. Tsysar, A.M. Saletsky. Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 8360 (2014).
- [12] K.M. Tsysar, D.I. Bazhanov, E.M. Smelova, A.M. Saletsky. Phys. Status Solidi B **251**, 871 (2014).
- [13] Е.М. Смелова, К.М. Цысарь, Д.И. Бажанов, А.М. Салецкий. Письма в ЖЭТФ **93**, 144 (2011).
- [14] А.Л. Клавсюк, С.В. Колесников, Е.М. Смелова, А.М. Салецкий. ФТТ **53**, 2237 (2011).
- [15] K.M. Tsysar, D.I. Bazhanov, E.M. Smelova, A.M. Saletsky. Appl. Phys. Lett. **101**, 043108 (2012).
- [16] N.D. Mermin, H. Wagner. Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [17] Y. Li, B.-G. Liu. Phys. Rev. B **73**, 174418 (2006).
- [18] H. Hashemi, G. Fischer, W. Hergert, V.S. Stepanyuk. J. Appl. Phys. **107**, 09E311 (2010).
- [19] W. Kohn. Rev. Mod. Phys. **71**, 1253 (1999).
- [20] J. Hafner, G. Kresse, A. Eichler, R. Lorentz, R. Hirschl, M. Marsman. Vasp workshop. (1999); <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp-workshop/slides/documentation.htm>
- [21] Y. Wang, J.P. Perdew. Phys. Rev. B **44**, 13298 (1991).
- [22] J.P. Perdew, Y. Wang. Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [23] P.E. Blöchl. Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
- [24] G. Kresse, D. Joubert. Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
- [25] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- [26] P. Bloński, A. Lehnert, S. Dennler, S. Rusponi, M. Etzkorn, G. Moulas, P. Bencok, P. Gambargella, H. Brune, J. Hafner. Phys. Rev. B **81**, 104426 (2010).
- [27] А.Л. Клавсюк, С.В. Колесников, А.М. Салецкий. Письма в ЖЭТФ **99**, 750 (2014).
- [28] R.J. Glauber. J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- [29] K.A. Fichtorn, W.H. Weinberg. J. Chem. Phys. **95**, 1090 (1991).
- [30] S. Pick, P. Ignatiev, A. Klavsyuk, W. Hergert, V. Stepanyuk, P. Bruno. J. Phys.: Cond. Matter **19**, 446001 (2007).