



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2020-18-7-87-95>

Оригинальная статья
Original paper

УДК 539.18

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИДВУМЕРНЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С НИЗКОРАЗМЕРНЫМ МАГНЕТИЗМОМ

БАРАНОВА М.С., ПРОСКУРОВА П.А.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
(г. Минск, Республика Беларусь)*

Поступила в редакцию 20 октября 2020

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2020

Аннотация. Поиск физических фундаментальных закономерностей, приводящих к устойчивому высокотемпературному ферромагнетизму, является актуальной задачей. Кроме уже синтезированных двумерных материалов, остается широкий перечень возможных структур, стабильность которых предсказана теоретически. В статье представлены результаты изучения электронных свойств соединений на основе халькогенидов переходных металлов MAX_3 ($M = Cr, Fe, A = Ge, Si, X = S, Se, Te$) с наноструктурированным магнетизмом. Исследования проводились с помощью квантово-механического моделирования в специализированном программном комплексе VASP, а также расчетов в рамках модели Гейзенберга. Определены основные магнитные состояния двумерных MAX_3 и соответствующие им зонные энергетические структуры. Установлено, что среди изучаемых систем наноразмерным ферромагнетиком является $CrGeTe_3$. Кроме того, данное соединение является полупроводником с шириной запрещенной зоны равной 0,35 эВ. Остальные материалы являются антиферромагнетиками. Весь магнитный момент в MAX_3 локализован на атомах переходного металла, в частности, на d -орбитали атома переходного металла (и лишь незначительная часть – на p -орбитали халькогена). Для $CrGeTe_3$ проведены расчеты интеграла обменного взаимодействия. Установлены вероятностные механизмы формирования магнитного порядка. Согласно полученным интегралам обменного взаимодействия, в плоскости полупроводника формируется строгий ферромагнитный порядок. Распределение парциальной плотности электронных состояний указывает на гибридизацию между d -орбиталью атома переходного металла и p -орбиталью халькогена. Определено, что более вероятностным является обменное взаимодействие по механизму суперобмена.

Ключевые слова: ab initio моделирование, теория функционала плотности, наноразмерный магнетизм, ферромагнетизм.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Благодарности. Представленные результаты получены в рамках выполнения задач по заданию 2.87 ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», а также по договору с БРФФИ Ф20В-008.

Для цитирования. Баранова М.С., Проскурова П.А. Электронные свойства квазидвумерных халькогенидов переходных металлов с низкоразмерным магнетизмом. Доклады БГУИР. 2020; 18(7): 87-95.

ELECTRONIC PROPERTIES OF QUASI TWO-DIMENSIONAL TRANSITION METALS CHALCOGENIDES WITH LOW-DIMENSIONAL MAGNETISM

MARYIA S. BARANAVA, PALINA A. PRASKURAVA

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)

Submitted 20 October 2020

© Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2020

Abstract. The search for fundamental physical laws which lead to stable high-temperature ferromagnetism is an urgent task. In addition to the already synthesized two-dimensional materials, there remains a wide list of possible structures, the stability of which is predicted theoretically. The article suggests the results of studying the electronic properties of MAX_3 ($M = Cr, Fe, A = Ge, Si, X = S, Se, Te$) transition metals based compounds with nanostructured magnetism. The research was carried out using quantum mechanical simulation in specialized VASP software and calculations within the Heisenberg model. The ground magnetic states of two-dimensional MAX_3 and the corresponding energy band structures are determined. We found that among the systems under study, $CrGeTe_3$ is a semiconductor nanosized ferromagnet. In addition, one is a semiconductor with a bandgap of 0.35 eV. Other materials are antiferromagnetic. The magnetic moment in MAX_3 is localized on the transition metal atoms: in particular, the main one on the d -orbital of the transition metal atom (and only a small part on the p -orbital of the chalcogen). For $CrGeTe_3$, the exchange interaction integral is calculated. The mechanisms of the formation of magnetic order was established. According to the obtained exchange interaction integrals, a strong ferromagnetic order is formed in the semiconductor plane. The distribution of the projection density of electronic states indicates hybridization between the d -orbital of the transition metal atom and the p -orbital of the chalcogen. The study revealed that the exchange interaction by the mechanism of superexchange is more probabilistic.

Keywords: ab initio simulation, density functional theory, nanoscale magnetism, ferromagnetism.

Conflict of interests. The authors declare no conflict of interests.

Gratitude. The presented results were obtained within the framework of Assignment 2.87 of the GPSR “Physical Materials Science, Novel Materials and Technologies” and BRFFR Contract Ф20B-008.

For citation. Baranova M.S., Praskurava P.A. Electronic properties of quasi two-dimensional transition metals chalcogenides with low-dimensional magnetism. Doklady BGUIR. 2020; 2020; 18(7): 87-95.

Введение

Упорядоченное расположение магнитных моментов в макроскопических масштабах обуславливает наличие магнитного порядка [1]. В большинстве случаев результатом взаимодействия соседних электронов (обменное взаимодействие) является противоположная направленность спинов, поскольку такое положение энергетически выгодно. Однако в некоторых случаях спины свободных электронов не уравниваются в противоположных направлениях при относительно малых термических флуктуациях. Таким образом, до определенной температуры (температуры Кюри – T_c) локальный порядок может распространяться на макроскопические масштабы. Выше T_c тепловые флуктуации имеют тенденцию смещать магнитные моменты в соседних областях, в результате дальний порядок разрушается [2].

В трехмерной системе при конечной T_c всегда происходит магнитный фазовый переход, в то время как в двумерных системах, когда размерность спина равна трем (изотропная модель Гейзенберга), тепловые флуктуации разрушают дальний магнитный порядок при любой конечной температуре согласно теореме Мермина – Вагнера – Хоэнберга [3]. Иными словами, при ограничении размерности (двумерные и одномерные системы) дальний магнитный порядок, в большинстве случаев, возможен только при $T = 0$ либо вовсе отсутствует. Причиной является

то, что непрерывная симметрия изотропной модели Гейзенберга возбуждает спиновые волны. Спиновые волны имеют конечную плотность состояний в системах с ограниченной размерностью, в связи с чем они достаточно легко возбуждаются. Однако двумерная модель Изинга – Ленца [4] показывает, что в магнитных системах с ограниченной размерностью фазовый переход при конечной температуре возможен. Качественное отличие моделей заключается в учете магнитной анизотропии. Энергетическое преимущество одной из составляющих спинового момента приводит к подавлению тепловых флуктуаций (открывает разрыв в спектре спиновых волн).

В [5] утверждается, что все экспериментально обнаруженные полупроводниковые ферромагнетики до 2014 года были получены только в объемной форме. Предложено много механизмов формирования низкоразмерного [6, 7] ферромагнетизма. В результате однослойный ферромагнетизм был реализован в различных структурах [8–11]. Однако нет двумерных материалов, которые бы проявляли ферромагнетизм при комнатной температуре. Повторим, что в двумерных системах магнитный порядок дальнего действия подавляется термическими флуктуациями, однако эти флуктуации *могут быть нейтрализованы сильной магнитной анизотропией*. Основное правило при проектировании двумерных ферромагнетиков заключается в усилении обменного взаимодействия и одноосной магнитной анизотропии.

В структурах MAX_3 , образованных из слоистых кристаллов халькогенидов переходных металлов, при двумерном ограничении возникает магнитный порядок дальнего действия. Более того, в данном классе материалов был зарегистрирован ферромагнетизм.

Одними из первых двумерных ферромагнитных кристаллов можно считать соединения на основе хрома: $CrGeTe_3$ и CrI_3 [10–11]. $CrGeTe_3$ представляет собой двумерный гейзенберговский ферромагнетик с небольшой магнитной анизотропией (т. е. спиновые моменты могут быть ориентированы во всех направлениях с малой разностью энергии), тогда как CrI_3 является двумерным антиферромагнетиком изинговского типа (т. е. спиновые моменты ориентированы вдоль кристаллографического направления c , возможен внутрислойный ферромагнетизм и межслойный антиферромагнетизм). В [12] представлены результаты моделирования $CrGeTe_3$. Установлено, что соединение имеет ферромагнитный порядок с упорядоченными вдоль направления c спинами. Предсказано, что магнитный порядок сохраняется до температуры 65 К. В [13, 14] экспериментально обнаружен ферромагнетизм в нескольких слоях $CrSiTe_3$ и $CrGeTe_3$. Также продемонстрировано, что магнетизм в двумерных и трехмерных структурных модификациях может быть описан моделью Гейзенберга [12, 15].

Таким образом, халькогениды переходных металлов MAX_3 ($M = Cr, Fe, A = Si, Ge, X = S, Se, Te$) проявляют собственный ферромагнетизм. Данный класс материалов лишен некоторых недостатков другого типа ферромагнетиков – разбавленных магнитных полупроводников (РМП). Преимущество MAX_3 по сравнению с РМП заключается в высокой концентрации атомов переходных металлов (отсутствует ограничение по растворимости), меньшем количестве неконтролируемых дефектов (из-за отсутствия примеси).

Объемный кристалл MAX_3 состоит из слоев, которые связаны посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса. Данная особенность материала позволяет синтезировать энергетически стабильные квазидвумерные структуры путем механического отшелушивания. В [5] с помощью расчетов фононного спектра подтверждается стабильность двумерных $CrSiTe_3$, $CrGeTe_3$ и Fe_3GeTe_2 . В работе утверждается, что однослойные материалы не были синтезированы ранее. Стабильность двумерных структур MAX_3 также была подтверждена с помощью расчетов фононных свойств в [16].

Изучение структурных, электронных и магнитных свойств позволит выделить в отдельный ряд перспективные структурные модификации MAX_3 для дальнейшего синтеза и экспериментального изучения.

Методика проведения моделирования

Теория функционала электронной плотности (density-functional theory – DFT) [17] является фундаментальной базой для многих квантово-механических методов моделирования электронных и магнитных свойств [18]. Основным источником ошибок DFT-моделирования заключается в неточном учете корреляционной энергии, которая является одним из слагаемых,

составляющих полную энергию системы. В большей степени это проявляется в материалах с локализованными (узкими) зонами (d -электронами) из-за увеличения доли данной составляющей в энергетической характеристике системы. Самым распространенным способом, помогающим нейтрализовать данный недостаток моделирования, является приближение локальной спиновой плотности (local spin-density approximation) (LSDA+U), которое было использовано в данной работе.

Моделирование любой системы проводилось с предварительной ионной релаксацией с учетом спиновой поляризации. Далее осуществлялись статические самосогласованные расчеты для определения электронных свойств. Моделирование зонных энергетических систем проводилось как для объемных модификаций, так и для двумерных систем в их основном квантовом состоянии. Результаты расчетов основного квантового состояния включали в себя, в том числе, определение основного магнитного порядка. Для двумерных систем энергетические зонные диаграммы получены по контуру М-К-Г-К-М обратного пространства зоны Бриллюэна.

Результаты и их обсуждение

Основными входными данными при квантово-механическом моделировании являются структурное и геометрическое описание моделируемых систем, а также псевдопотенциалы для каждого типа ионов, составляющих изучаемые соединения. Элементарные ячейки объемных MAx_3 состоят из трех слоев, связанных слабыми силами Ван-дер-Ваальса, с АВ стыковкой. Для дальнейшего изучения двумерных модификаций достаточно извлечь первичную информацию о геометрических и структурных свойствах одного из слоев, при этом данные о базисных векторах a и b сохраняются. Кристаллическая структура одного из представителей MAx_3 – $CrGeTe_3$ представлена на рис. 1. Вектор c должен быть увеличен для формирования зазора (вакуумного промежутка) между слоями, который не позволит соседним слоям оказывать энергетическое влияние друг на друга. Данное влияние возникает из-за применяемого в расчетной среде принципа периодичности, а описанный выше подход является общепринятым и множество раз применялся исследователями в целях изучения наноструктурированных материалов.

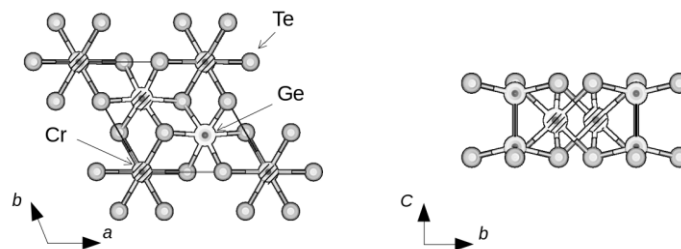


Рис. 1. Кристаллическая структура $CrGeTe_3$
Fig. 1. Crystal structure of $CrGeTe_3$

Все элементарные ячейки проходили стадию структурной релаксации. Оптимизация векторов ячейки и атомных позиций на предварительном этапе проводилась для объемных модификаций без учета спиновой поляризации. Для двумерных ячеек проводилась оптимизация атомных позиций для всех магнитных конфигураций (т. е. с учетом спиновой поляризации). При этом оптимизация векторов ячейки двумерных структур была запрещена, поскольку в противном случае может произойти схлопывание или сжатие вакуумного слоя. Подобный прием применялся авторами ранее, а также был представлен в других исследовательских работах [19].

Результаты расчетов для соединений, данные которых представлены в литературных источниках, находятся в хорошем согласии. В настоящих расчетах для $CrGeTe_3$ были получены следующие постоянные решетки: $a=b=6,85$ Å, $c=21,60$ Å, в то время как экспериментальные значения для $CrGeTe_3$ – $a=b=6,80$ Å, $c=20,37$ Å при 5 К. Для $CrSiTe_3$ в настоящей работе $a=b=6,64$ Å, $c=21,88$ Å; в литературном источнике $a=b=6,77$ Å, $c=20,53$ Å при 1,2 К [5].

CrGeTe₃, как и его кремниевый аналог, является слоистым материалом с АВ гексагональной плотной упаковкой атомов теллура.

С помощью моделирования магнитных свойств определен предпочтительный магнитный порядок, формируемый в каждой двумерной структуре. Для этого были созданы суперячейки размерностью 2×2×1. Для каждого иона переходного металла заданы ориентации магнитного момента (спина). Таким образом, были сформированы три магнитные структуры, одна из которых имела ферромагнитный порядок (ФМ), две другие антиферромагнитный (АФМ1 и АФМ2) (рис. 2). Для всех конфигураций проведены структурные оптимизации. Далее выполнялись статические самосогласованные расчеты. Конечной целью данного моделирования являлось определение значений полной энергии изучаемых систем.

Полученные данные использовались для анализа предпочтительного магнитного порядка в каждой системе. Наиболее вероятное магнитное состояние должно обладать самым низким значением энергии. В табл. 1 представлены данные о формируемых магнитных порядках.

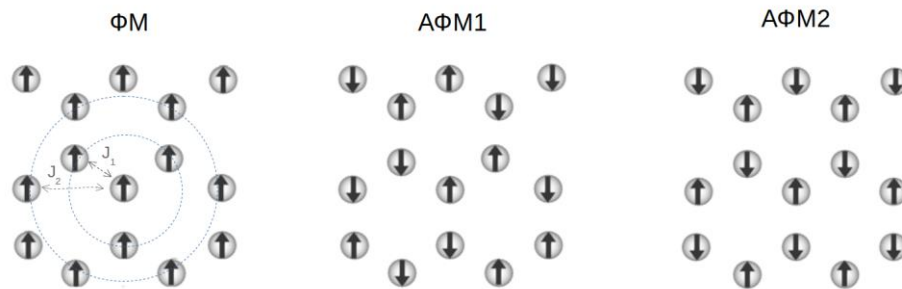


Рис. 2. Ориентация спинов в подрешетке ионов переходных металлов MAX₃ для трех магнитных конфигураций

Fig. 2. Spins orientation in the MAX₃ sublattice of transition metal ions for three magnetic configurations

Таблица 1. Результаты моделирования магнитных и электронных свойств MAX₃

Table 1. Simulation results of MAX₃ magnetic and electronic properties

Соединения Compounds	Магнитный порядок Magnetic order	E_g , эВ E_g , eV	M , μ_B	d_{M-M} , Å	d^*_{M-M} , Å	α_{M-A-M} , град α_{M-A-M} , deg
CrSiS3	АФМ2	0,18	3,26	3,41	5,90	86,72
CrSiSe3	АФМ1	0,20	3,42	3,61	6,24	86,97
CrSiTe3	АФМ1	0,68	3,60	3,91	6,78	88,11
CrGeS3	АФМ2	1,12	3,16	3,49	6,03	89,02
CrGeSe3	АФМ1	0,93	3,42	3,64	6,30	88,12
CrGeTe3	ФМ	0,35	3,61	3,95	6,85	89,24
FeSiS3	АФМ1	M	5,84	3,42	5,92	85,50
FeSiSe3	АФМ1	M	3,78	3,62	6,27	82,69
FeSiTe3	АФМ1	M	3,59	3,77	6,53	84,44
FeGeS3	АФМ2	M	3,80	3,47	6,01	92,95
FeGeSe3	АФМ2	M	3,73	3,66	6,35	92,55
FeGeTe3	АФМ2	M	3,62	3,80	6,59	85,48

Согласно результатам, полученным из квантово-механического моделирования, среди изучаемых соединений ферромагнетиком является только CrGeTe₃. Данный вывод сделан на основании полученных энергетических показателей (полных энергий систем). В работе [14] отмечается, что результаты анализа формируемого магнитного порядка зависят от коэффициента Хаббарда, который применяется в рамках используемой аппроксимации локальной плотности. Однако в настоящем исследовании выбор коэффициента основывается на глубоком анализе литературных источников [20] для всех антиферромагнитных конфигураций. Для ферромагнитного CrGeTe₃ исследования зависимости магнитных свойств от коэффициента Хаббарда представлены ниже.

Для установления зависимости и закономерностей, приводящих к определенному типу магнитного упорядочения, определены такие данные, как межатомное расстояние между

переходным металлом ($M = Cr, Fe$) и его ближайшим одноименным соседом (d_{Me-Me}), а также вторым по удаленности (d_{Me-Me}^*), углы между двумя ближайшими металлическими ионами через атом халькогена (α_{M-A-M}) в градусах (табл. 1).

Характеристики связи (химической) могут подавлять или усиливать магнетизм. Прямой обмен возможен только между двумя ближайшими соседями. Между вторым соседом прямой обмен невозможен из-за большого межатомного расстояния. В двумерных структурах MAX_3 ион переходного металла находится внутри пирамиды из халькогенов и имеет слабую прямую гибридизацию с другими переходными металлами. Таким образом, можно предположить, что обменное взаимодействие между металлами происходит посредством механизмов суперобмена (через атомы халькогена). Следует отметить, что угол между двумя ближайшими соседями в ферромагнитном $CrGeTe_3$ практически прямой.

Анализ распределения намагниченности показал, что весь магнитный момент локализован на атомах переходного металла. Все магнитные ионы в изучаемых системах имеют валентности, соответствующие их стехиометрии (Cr^{3+}, Fe^{3+}). Данные магнитного момента, приходящегося на ион переходного металла, занесены в табл. 1.

В ферромагнитном $CrGeTe_3$ нескомпенсированные по спину электроны в большей степени локализованы на d -орбиталях. При этом происходит гибридизация p -орбиталей халькогена, d -орбитали переходного металла (рис. 3). Такая гибридизация обеспечивает возможность осуществления обменного взаимодействия по механизму суперобмена.

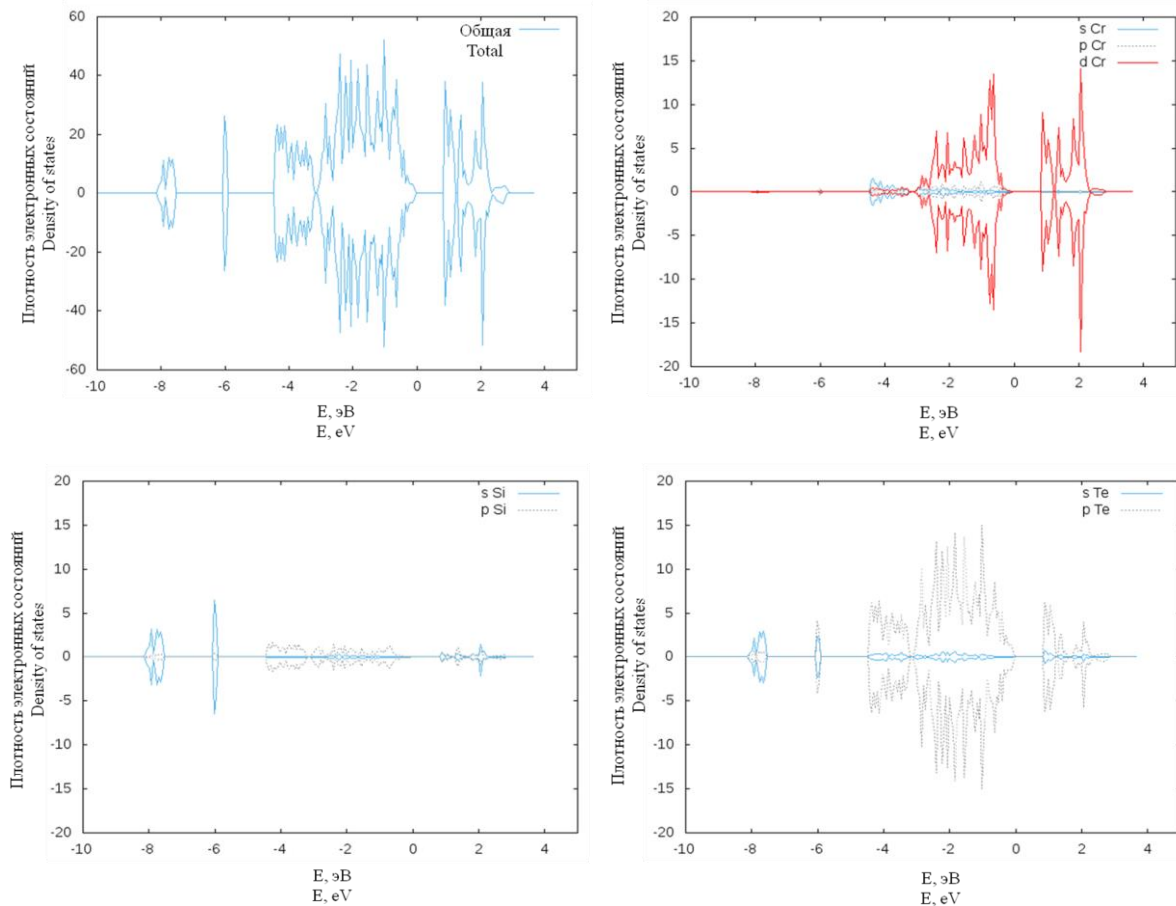


Рис. 3. Парциальная плотность электронных состояний $CrGeTe_3$
Fig. 3. Partial density of electronic states $CrGeTe_3$

Проведены расчеты для определения энергетических зонных диаграмм MAX_3 с учетом полученных результатов об основных магнитных состояниях. Все соединения на основе хрома можно отнести к полупроводникам. Например, $CrGeTe_3$, который является ферромагнетиком, имеет запрещенную зону, равную 0,35 эВ. Учитывая недооценку, которая может быть вызвана из-за применения DFT-методов, запрещенная зона материалов на практике может оказаться больше, вплоть до 20 %. Соединения на основе железа являются металлами при описанных

в данной статье условиях моделирования. Анализ парциальной плотности электронных состояний (рис. 3) позволил установить, что дно зоны проводимости формируется за счет d -орбитали атомов металла, также как s - и p -орбитали А атомов вносят вклад в формирование потолка валентной зоны. Уровень Ферми на представленных распределениях смещен в ноль по оси энергии.

Для более точного анализа магнитных свойств ферромагнитного полупроводника CrGeTe_3 рассчитан интеграл обменного взаимодействия. В табл. 1 представлены результаты расчета. Параметры обменного взаимодействия в CrGeTe_3 рассчитаны между двумя ближайшими ионами хрома (J_1), вторым по отдаленности (J_2) (рис. 2).

Согласно модели Гейзенберга в полное значение энергии системы входят энергетические вклады всех обменных взаимодействий. Таким образом, можно определить обменный интеграл как разницу энергий магнитных конфигураций с различными направлениями спинов. Получены значения обменного интеграла для коэффициентов Хаббарда 0, 3 и 5 эВ (табл. 2).

Таблица 2. Результаты расчетов обменного интеграла CrGeTe_3
Table 2. Simulation results of CrGeTe_3 exchange integral calculation

Коэффициент Хаббарда, эВ Hubbard coefficient, eV	J_1 , эВ J_1 , eV	J_2 , эВ J_2 , eV
0	$-1,8 \cdot 10^{-3}$	$6,8 \cdot 10^{-5}$
3	$-2,4 \cdot 10^{-3}$	$-2,9 \cdot 10^{-6}$
5	$-1,7 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$

При любом U устанавливается ферромагнитный порядок, поскольку обменный интеграл между двумя ближайшими соседями имеет отрицательное значение. Магнитный момент, локализованный на атомах хрома в соединении CrGeTe_3 , составил $3,14 \mu_B$. Согласно полученным J_2 , обменное взаимодействие со вторым соседним магнитным ионом незначительно, поскольку имеет значение на три порядка меньше, чем значение J_1 . Таким образом, конкуренции обменного взаимодействия не происходит.

Заключение

В статье представлены результаты исследования электронных свойств соединений на основе халькогенидов переходных металлов MAX_3 ($M = \text{Cr, Fe, A} = \text{Ge, Si, X} = \text{S, Se, Te}$) с наноструктурированным магнетизмом. С использованием квантово-механического моделирования в специализированном программном комплексе VASP проведены структурная и геометрическая оптимизации объемных, а также двумерных модификаций с учетом спиновой поляризации. Результаты расчетов постоянных решетки находятся в хорошем согласии с литературными источниками. Установлены основные магнитные состояния: подавляющее большинство соединений имеют антиферромагнитный порядок и только CrGeTe_3 – ферромагнитный. Анализ результатов моделирования позволил установить, что магнитный момент в MAX_3 преимущественно локализован на ионах переходного металла, в частности, на d -орбитали атома переходного металла. Рассчитаны интегралы обменного взаимодействия для ферромагнитного двумерного полупроводника CrGeTe_3 . При любом U (0, 3, 5 эВ) в данном соединении устанавливается ферромагнитный порядок. Магнитный момент, приходящийся на ион хрома, составляет $3,14 \mu_B$. Расчет расстояний между магнитными ионами, углов связи и парциальной плотности состояний указывает на то, что обменное взаимодействие происходит по механизму суперобмена, поскольку парциальная плотность состояний демонстрирует гибридизацию d -орбитали переходного металла и p -орбитали халькогена, при этом расстояние между магнитным ионом и вторым по отдаленности одноименным соседом составляет $6,85 \text{ \AA}$, что исключает прямой обмен, а угол Me-X-Me равен $89,24^\circ$. Моделирование энергетических зонных диаграмм показало, что среди изучаемых материалов полупроводниками являются соединения на основе хрома, а металлами – соединения на основе железа.

Список литературы / References

1. Coey J.M.D. *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press; 2010.
2. Gibertini M., Koperski M., Morpurgo A.F., Novoselov K.S. Magnetic 2D materials and heterostructures. *Nature Nanotechnology*. 2019;14(5):408-419. DOI:10.1038/s41565-019-0438-6.
3. Mermin N.D., Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Physical Review Letters*. 1966;17(22):1133-1136. DOI:10.1103/physrevlett.17.1133.
4. Niss M. History of the Lenz-Ising Model 1950–1965: from irrelevance to relevance. *Archive for History of Exact Sciences*. 2008;63:243-287. DOI:10.1007/s00407-008-0039-5.
5. Zhuang H.L., Kent P.R.C., Hennig R.G. Strong anisotropy and magnetostriction in the two-dimensional Stoner ferromagnet Fe_3GeTe_2 . *Physical Review B*. 2016;93(13). DOI:10.1103/physrevb.93.134407.
6. Liu S., Yuan X., Zou Y., Sheng Y., Huang C., Zhang E., ... Xiu F. Wafer-scale two-dimensional ferromagnetic Fe_3GeTe_2 thin films grown by molecular beam epitaxy. *Npj 2D Materials and Applications*. 2017;1(1). DOI:10.1038/s41699-017-0033-3.
7. Carteaux V., Ouvrard G., Grenier J.C., Laligant Y. Magnetic structure of the new layered ferromagnetic chromium hexatellurosilicate $\text{Cr}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1991;94(1,2):127-133. DOI:10.1016/0304-8853(91)90121-p.
8. Li X., Yang J. CrXTe_3 (X = Si, Ge) nanosheets: two dimensional intrinsic ferromagnetic semiconductors. *Journal of Materials Chemistry C*. 2014;2(34):7071. DOI:10.1039/c4tc01193g.
9. Lee J.U., Lee S., Ryoo J.H., Kang S., Kim T.Y., Kim P., Cheong H. Ising-Type Magnetic Ordering in Atomically Thin FePS_3 . *Nano Letters*. 2016;16(12):7433-7438. DOI:10.1021/acs.nanolett.6b03052.
10. Huang B., Clark G., Navarro-Moratalla E., Klein D.R., Cheng R., Seyler K.L., Xu X. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*. 2017;546(7657):270-273. DOI:10.1038/nature22391.
11. Gong C., Li L., Li Z., Ji H., Stern A., Xia Y., Zhang X. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature*. 2017;546(7657):265-269. DOI:10.1038/nature22060.
12. Carteaux V., Brunet D., Ouvrard G., Andre G. Crystallographic, magnetic and electronic structures of new layered ferromagnetic compound $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$. *Journal of physics*. 1995;7(1):69-87.
13. Sun Y., Xiao R.C., Lin G.T., Zhang R.R., Ling L.S., Ma Z.W., Sheng Z.G. Effects of hydrostatic pressure on spin-lattice coupling in two-dimensional ferromagnetic $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$. *Applied Physics Letters*. 2018;112(7):072409. DOI:10.1063/1.5016568.
14. Chittari B.L., Lee D., MacDonald A.H., Hwang E., Jung J. Carrier and strain tunable intrinsic magnetism in two-dimensional MAX_3 transition metal chalcogenides. *Physical Review B*. 2020;101.
15. Casto L.D., Clune A.J., Yokosuk M.O., Musfeldt J.L., Williams T.J., Zhuang H.L., Mandrus D. Strong spin-lattice coupling in CrSiTe_3 . *APL Materials*. 2015;3(4):041515. DOI:10.1063/1.4914134.
16. Lado J.L., Fernández-Rossier J. On the origin of magnetic anisotropy in two dimensional CrI_3 . *2D Materials*. 2017;4(3):035002. DOI:10.1088/2053-1583/aa75ed.
17. Dreizler R., Gross E. *Density Functional Theory*. New York: Plenum Press; 1995.
18. Kresse G. *VASP the guide: tutorial*. Austria: University of Vienna; 2003.
19. Das T., Rocquefelte X., Jobic S. *Absolute Reference Energy to Realign the Band-edges of Inorganic Semiconductors Using First-principles Calculations*. 2020. arXiv:1812.01293.
20. Zhou F., Cococcioni M., Marianetti C.A., Morgan D., Ceder G. First-principles prediction of redox potentials in transition-metal compounds with LDA+U. *Physical Review B*. 2004;70:235121. DOI:10.1103/PhysRevB.70.235121.

Вклад авторов

Баранова М.С. подготовила входные данные для моделирования, выполнила анализ и интерпретацию результатов, а также провела расчет основных магнитных параметров.

Проскурова П.А. провела квантово-механическое моделирование.

Authors' contribution

Baranova M.S. prepared input simulation data, analyzed and interpreted the results, and also calculated basic magnetic parameters.

Praskurova P.A. conducted quantum mechanical simulation.

Сведения об авторах

Баранова М.С., научный сотрудник НИЛ 4.4 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Проскурова П.А., студентка кафедры микро- и наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
г. Минск, ул. П. Бровки, 6,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
тел. +375-17-293-84-09;
e-mail: baranova@bsuir.by
Баранова Мария Сергеевна

Information about the authors

Baranova M.S., Researcher of R&D Lab 4.4 of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

Praskurava P.A., student of Micro- and Nanoelectronics Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,
Minsk, P. Brovki str., 6,
Belarusian State University
of Informatics and Radioelectronics
tel. +375-17-293-84-09;
e-mail: baranova@bsuir.by
Baranova Maryia Sergeevna