

# ИССЛЕДОВАНИЯ *ab initio* ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ, МАГНИТНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ И ТОНКИХ ПЛЕНОК ПЕРОВСКИТОВ $\text{SrMeO}_3$ ( $\text{Me} = \text{Fe}, \text{Mn}$ ), СОДЕРЖАЩИХ МАГНИТНЫЕ ИОНЫ

А. В. Немцев, В. С. Жандун\*, В. И. Зиненко

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 октября 2017 г.

Проведено теоретическое исследование в рамках теории функционала плотности магнитных, электронных и поляризационных свойств соединений  $\text{SrFeO}_3$  и  $\text{SrMnO}_3$  со структурой перовскита в объемном и тонкопленочном состояниях. Обнаружено, что в объемном состоянии сегнетоэлектрическая нестабильность отсутствует, однако при переходе к тонкопленочному состоянию при растягивающем напряжении подложки в  $\text{SrMnO}_3$  происходит смягчение полярной моды, что приводит к появлению полярной фазы с поляризацией  $23 \text{ мКл/см}^2$ , что находится в согласии с экспериментом. Исследование магнитных и электронных свойств показало наличие в  $\text{SrMnO}_3$  антиферромагнитного упорядочения  $G$ -типа и возникновение в тонкой пленке диэлектрической щели порядка  $1.5 \text{ эВ}$ . В то же время в  $\text{SrFeO}_3$  обнаруживается ферромагнитная фаза с металлическим типом проводимости как в объемном, так и в тонкопленочном состоянии.

DOI: 10.7868/S0044451018040089

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Соединения на основе структуры перовскита относятся к классу функциональных материалов благодаря большому разнообразию свойств, в том числе сегнетоэлектрических и магнитоэлектрических. Кристаллы сегнетоэлектриков со структурой перовскита  $\text{ABO}_3$  активно исследуются экспериментальными и теоретическими методами уже более 70 лет. Эти соединения отличаются, с одной стороны, простой структурой, а с другой стороны, разнообразием состава, включающего в себя почти все элементы таблицы Менделеева, поэтому в перовскитах экспериментальными и теоретическими методами обнаруживается широкое разнообразие функциональных свойств (магнитных, оптических, электронных, сегнетоэлектрических, магнитоэлектрических), которые могут иметь широкий спектр потенциального применения [1–5]. Несмотря на то что существует большое число сегнетоэлектрических и магнитных соединений на основе структуры перовскита, продолжается синтез новых перовскитов с интересными

физико-химическими характеристиками, которые, в свою очередь, привлекают особый исследовательский интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения в связи с большими открывающимися возможностями их применения [6, 7]. Так, например, наличие переключаемой спонтанной поляризации — основа создания неразрушаемой оперативной памяти, высокая диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектриков делает их кандидатами на замену кремния в полупроводниковых полевых транзисторах, пьезоэлектрические свойства позволяют использовать перовскиты в качестве преобразователей и различного вида детекторов, наличие магнитных ионов в структуре приводит к возможности применения их магнитных и электронных свойств в спинтронике [8–10]. В настоящее время одной из многих проблем, которые препятствуют развитию спинтронных запоминающих устройств, является необходимость протекания токов большой величины для записи информации с использованием эффекта изменения направления намагниченности. Одним из путей решения этой проблемы является использование магнитоэлектрических материалов, в которых приложенное электрическое поле может менять намагниченность.

\* E-mail: jvc@iph.krasn.ru

С другой стороны, развитие современных технологий требует миниатюризации материалов для внедрения в современные нанотехнологические устройства. При этом понижение размерности кристалла при переходе от объемного состояния к тонкопленочному приводит к значительному изменению физических свойств соединений, вплоть до возникновения новых и перспективных для приложений характеристик материалов. Это в последние десятилетия привело к активному изучению физических свойств тонких пленок толщиной 1–10 нм, в том числе сегнетоэлектрических и магнитоэлектрических свойств [11–13].

Одним из наиболее известных и изученных соединений со структурой перовскита является кристалл  $\text{SrTiO}_3$ . В данном соединении сегнетоэлектрическая нестабильность отсутствует вплоть до низких температур [14, 15], однако хорошо известно возникновение спонтанной поляризации в  $\text{SrTiO}_3$  в тонкопленочном исполнении [16, 17]. Замена немагнитного иона на магнитный будет неизменно сопровождаться появлением магнитного порядка и при наличии сегнетоэлектрической фазы это может приводить к возникновению магнитоэлектрического эффекта, что представляет несомненный прикладной интерес. В связи с этим, в данной работе были исследованы оксиды со структурой перовскита  $\text{SrMeO}_3$ , где  $\text{Me} = \text{Fe}, \text{Mn}$ . Экспериментально известно, что в объемном кристалле  $\text{SrMnO}_3$  наблюдается антиферромагнитное упорядочение  $G$ -типа при  $T_N \approx 233\text{--}260\text{ K}$  [18–20]. В кристаллах  $\text{SrFeO}_3$  обнаружена спиральная спиновая структура, но при уменьшении величины параметра решетки магнитное упорядочение меняется на ферромагнитное [21–23]. Однако, в отличие от объемных соединений, сведений об исследовании поляризационных и магнитных свойств тонких пленок  $\text{SrMnO}_3$  и  $\text{SrFeO}_3$  в литературе мало. Как пример, отметим результат, полученный в работе [24], где экспериментально наблюдалось появление сегнетоэлектричества в тонких пленках  $\text{SrMnO}_3$  под действием растягивающего напряжения подложки.

В связи с изложенным выше, целью данной работы является *ab initio*-исследование поляризационных, электронных, магнитных и оптических свойств объемных кристаллов и тонких пленок перовскитов  $\text{SrMeO}_3$ , содержащих магнитные ионы.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА

Все расчеты были выполнены с использованием пакета для расчетов методом *ab initio* VASP, осно-

ванного на теории функционала плотности. Для расчета использовались псевдопотенциалы, основанные на присоединенных плоских волнах (PAW), в которых использовался обменно-корреляционный функционал в виде Пердью–Берка–Эрнхорфа (PBE) с учетом приближения обобщенного градиента (GGA) [25, 26]. Для магнитных ионов использовалась следующая конфигурация валентных электронов:  $3p64s24d5$  для иона Mn,  $3p64s24d6$  для иона Fe. Для расчета основного состояния использовался GGA + U-подход в приближении Дударева [27], где  $U' = U - J$  выбиралось равным 5 эВ для обоих магнитных ионов. Все расчеты выполнены для спин-поляризованных состояний. Интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось на сетке Монкхорста–Пака [28]  $6 \times 6 \times 6$  с использованием метода тетраэдров. Энергия отсечения плоской волны составляла 500 эВ. Оптимизация параметров решетки и координат атомов выполнялась до тех пор, пока силы на атомах не станут меньше 0.02 эВ.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 3.1. Объемные кристаллы

Структура перовскита  $\text{SrMeO}_3$ , где  $\text{Me} = \text{Fe}, \text{Mn}$ , приведена на рис. 1.

Расчитанные и экспериментальные параметры решетки для исследуемых кристаллов приведены в табл. 1. Как видно, параметр решетки при изме-

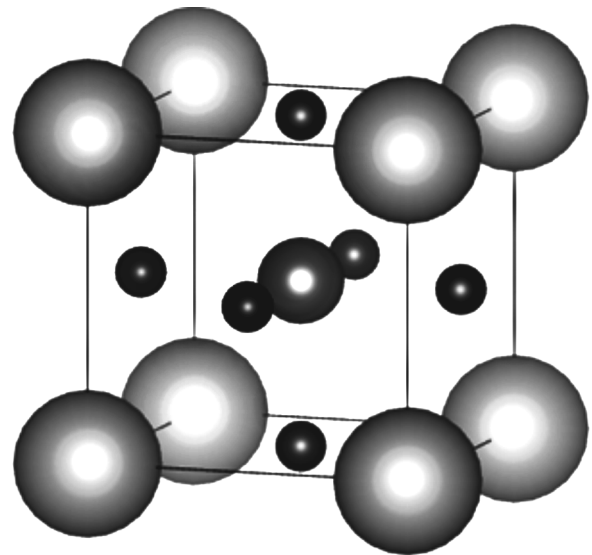


Рис. 1. Структура перовскита  $\text{SrMeO}_3$ . Большими шарами показаны атомы Sr, средними — Fe и Mn, маленькими — атомы O

**Таблица 1.** Частота полярной моды колебания ( $\nu_{pol}$ ), расчетные ( $a_{calc}$ ) и экспериментальные ( $a_{exp}$ ) параметры решетки для объемных кристаллов  $SrMeO_3$  (где  $Me = Mn, Fe$ )

	$SrFeO_3$	$SrMnO_3$
$a_{calc}, \text{Å}$	3.86	3.89
$a_{exp}, \text{Å}$	3.85 [22]	3.86 [19]
$\nu_{pol}, \text{см}^{-1}$	131	21 <i>i</i>

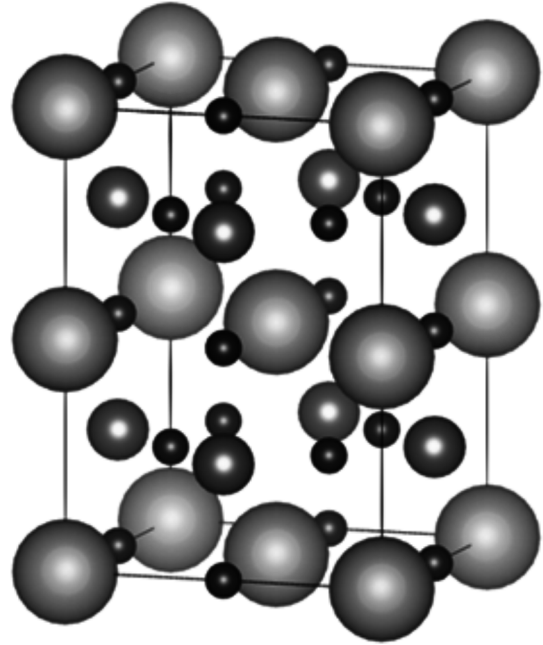
**Таблица 2.** Конфигурация магнитного упорядочения, полная энергия кристалла ( $E$ ) и величина магнитного момента ( $\mu$ ) для объемных кристаллов  $SrFeO_3$  и  $SrMnO_3$

	Тип	$E, \text{эВ}$	$\mu (\text{Fe/Mn}), \mu_B$
$SrFeO_3$	<i>F</i> -тип	-139.183	2.871
	<i>A</i> -тип	-138.918	$\pm 2.937$
	<i>C</i> -тип	-138.640	$\pm 2.917$
	<i>G</i> -тип	-138.225	$\pm 2.820$
$SrMnO_3$	<i>F</i> -тип	-147.317	2.664
	<i>A</i> -тип	-147.542	$\pm 2.579$
	<i>C</i> -тип	-147.738	$\pm 2.547$
	<i>G</i> -тип	-147.845	$\pm 2.520$

нении катионов  $Me$  меняется в пределах 1%. Также наблюдается хорошее согласие с экспериментом (максимальная разница составляет 3%). На полученных равновесных параметрах решетки был проведен расчет динамики кристаллической решетки исследуемых объемных соединений. В табл. 1 приведены полученные частоты низкочастотных полярных мод колебания для обоих соединений.

Расчет показывает, что в объемном кристалле  $SrFeO_3$  сегнетоэлектрическая мода является жесткой, свидетельствуя об отсутствии сегнетоэлектрического фазового перехода в данном соединении, тогда как в  $SrMnO_3$  имеется небольшая полярная нестабильность, что согласуется с результатами работы [20].

Для исследования магнитной структуры и типа упорядочения магнитных моментов использовалась учетверенная суперячейка (рис. 2) с параметрами решетки  $a' = \sqrt{2}a$ ,  $b' = \sqrt{2}b$ ,  $c' = \sqrt{2}c$ , содержащая 20 атомов.



**Рис. 2.** Структура учетверенной суперячейки, содержащей 20 атомов. Большими шарами показаны атомы Sr, средними — атомы Fe и Mn, маленькими — атомы O

Были рассмотрены разные случаи упорядочения магнитного момента для каждого кристалла: ферромагнитное упорядочение (*F*), антиферромагнитно соединенные ферромагнитные плоскости (*A*), ферромагнитно соединенные антиферромагнитные плоскости (*C*), антиферромагнитное упорядочение во всех плоскостях (*G*), показанные на рис. 3. Для каждого из вариантов магнитного упорядочения проведена оптимизация геометрии и рассчитана минимальная энергия. Полученные в ходе расчетов результаты представлены в табл. 2.

Как следует из табл. 2, наиболее выгодным по энергии упорядочением магнитных моментов для кристалла  $SrFeO_3$  оказалось ферромагнитное упорядочение (*F*), и антиферромагнитное упорядочение *G*-типа для  $SrMnO_3$ . Отметим два момента. Во-первых, в  $SrMnO_3$  энергии антиферромагнитных конфигураций *A*-, *C*- и *G*-типов близки между собой. Данный расчет согласуется с результатами работы [20], где было показано, что растяжение кристалла  $SrMnO_3$  приводит к дополнительным магнитным переходам, в первую очередь, к *C*-типу антиферромагнитного упорядочения, а затем к *A*-типу антиферромагнитного упорядочения. Во-вторых, как следует из экспериментальных данных, магнитное упорядочение в  $SrFeO_3$  связано с образованием спиральной спиновой структуры [21, 22], что, в свою оче-

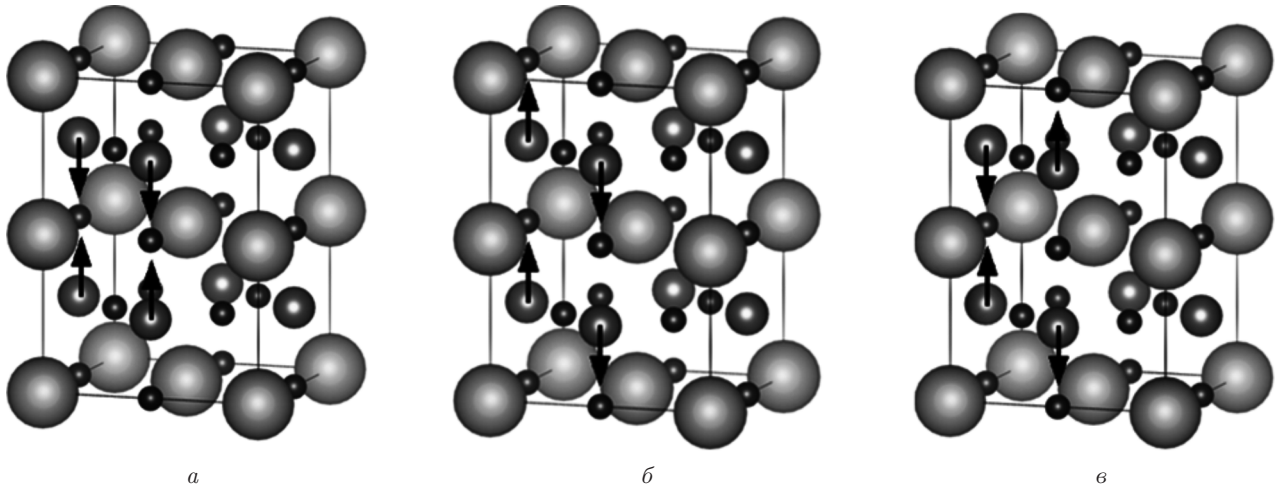


Рис. 3. Различные типы антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов в исследуемых соединениях: *a* — *A*-тип, *b* — *C*-тип, *c* — *G*-тип. Большими шарами показаны атомы Sr, средними — атомы Fe и Mn, маленькими — атомы O

Таблица 3. Статические проводимости ( $\delta_0/\tau$ ) и плазменные частоты ( $\omega_{pl}$ ) для объемных кристаллов SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>

	SrFeO <sub>3</sub>	SrMnO <sub>3</sub>
$\omega_{pl}$ , эВ	10.436	0.5
$\delta_0/\tau$ , МСм/м	0.21	0.01

редь, свидетельствует о конкуренции между ферромагнитным и антиферромагнитным упорядочениями. Расчет обменной константы между первыми соседями, проведенный с помощью пакета SPR-KKR [29], дал величину  $J_1 = 1.4$  мэВ (что близко к экспериментально определенной величине  $J_1 = 1.2$  мэВ), положительное значение которой способствует ферромагнитному упорядочению магнитных моментов. В то же время обменная константа между вторыми соседями  $J_2 = -1.0$  мэВ оказывается отрицательной и способствующей антиферромагнитному упорядочению и при этом близкой к  $J_1$ . В свою очередь, из табл. 2 следует близость энергий ферромагнитной фазы и антиферромагнитной *A*-фазы в SrFeO<sub>3</sub>, что косвенно подтверждают экспериментальные данные.

Для наиболее выгодных магнитных конфигураций была рассчитана плотность электронных состояний, показанная на рис. 4. Основной вклад в плотность состояний на уровне Ферми вносят как *p*-электроны кислорода, так и *d*-электроны Mn, тог-

да как *p*- и *d*-электроны стронция вносят минимальный вклад в общую плотность состояний и поэтому на рисунке не показаны. Все исследуемые соединения, судя по занятости состояний на уровне Ферми, являются металлами, однако отметим наличие провала в плотности состояний на уровне Ферми в SrMnO<sub>3</sub>. Следует отметить также низкие значения статической электропроводности и плазменной частоты в данном соединении, по сравнению с SrFeO<sub>3</sub> (см. табл. 3). Важно также отметить наличие пика, почти целиком связанного с *d*-электронами Fe на уровне Ферми, что дает высокое значение спиновой поляризации в этих соединениях.

Оптические свойства вещества (показатель преломления *n*, коэффициент экстинкции *k*, функция потерь *L*, коэффициент отражения *R*) связаны с дисперсионной зависимостью диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\omega)$ . Для наиболее выгодных по энергии магнитных конфигураций были рассчитаны дисперсионные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости объемных кристаллов SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub> (рис. 5). Пики на мнимой части диэлектрической функции соответствуют межзонным переходам, возникающим при переходе электронов с занятых состояний ниже энергии Ферми в пустые состояния, находящиеся выше энергии Ферми при поглощении света. Данную связь можно легко проследить, сравнивая пики на рис. 5б, с плотностью состояний на рис. 4. Например, как видно на рис. 5б при энергии примерно 2 эВ в мнимой части диэлектрической проницаемо-

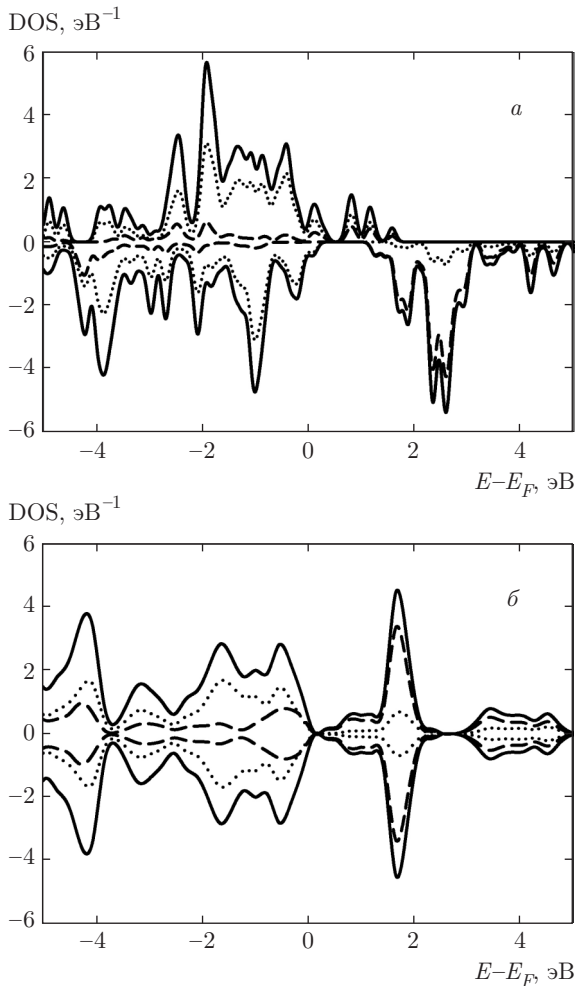


Рис. 4. Полная и частичная плотности электронных состояний для  $\text{SrFeO}_3$  (а),  $\text{SrMnO}_3$  (б). Полная плотность состояний показана сплошной линией,  $d$ -состояния железа показаны штриховой линией,  $p$ -состояния кислорода показаны пунктиром. Нулевой энергии соответствует уровень энергии Ферми

сти имеется пик с большой интенсивностью. В то же время на рис. 4 в плотности состояний вблизи энергии Ферми имеются 2 пика примерно на 1 эВ выше и на 1 эВ ниже энергии Ферми, разница между которыми составляет как раз примерно 2 эВ.

### 3.2. Тонкие пленки

Как указывалось в предыдущем разделе, объемные кристаллы исследуемых соединений не обладают сегнетоэлектрическими свойствами, поэтому здесь будет исследована динамика решетки тонких пленок различной толщины рассматриваемых соединений, для того чтобы выяснить, как понижение размерности и учет напряжений подложки вли-

Таблица 4. Изменение частоты полярной моды колебания ( $\nu_{pol}$ ) для тонких пленок  $\text{SrFeO}_3$  и  $\text{SrMnO}_3$  в зависимости от напряжения несоответствия, создаваемого подложкой

Напряжение несоответствия, %	$\nu_{pol}, \text{см}^{-1}$	
	$\text{SrMnO}_3$	$\text{SrFeO}_3$
-6	204	251
-4	177	227
-2	126	181
0	58	179
2	54i	87
4	73i	17
6	112i	14i

яют на их сегнетоэлектрические, магнитные, электронные и оптические свойства. Следует отметить, что в недавней работе [24] экспериментально наблюдалось появление сегнетоэлектричества в тонкой пленке  $\text{SrMnO}_3$ . Расчеты *ab initio* для тонких пленок  $\text{SrMnO}_3$  мы в литературе не обнаружили.

Для учета влияния напряжений, создаваемых подложкой, были проведены расчеты, для которых влияние подложки сводилось к создаваемому ею напряжению за счет разности параметров исходной пленки и подложки. Результаты приведены в табл. 4.

Из табл. 4 следует, что в спектре фоновых колебаний тонких пленок  $\text{SrFeO}_3$  и  $\text{SrMnO}_3$  полярная мода является «жесткой» при равновесном параметре решетки. Однако при увеличении параметра решетки, т. е. при воздействии механического растягивающего напряжения подложки, можно наблюдать постепенное смягчение полярной моды, тогда как в тонкой пленке  $\text{SrFeO}_3$  полярная мода становится «мягкой» лишь при большом напряжении, создаваемом несоответствием параметров пленки и подложки, а в тонких пленках  $\text{SrMnO}_3$  полярная мода становится «мягкой» при небольшом напряжении растяжения (около 2%) и имеет относительно большую отрицательную величину квадрата частоты, что свидетельствует о возникновении сегнетоэлектрической неустойчивости в тонкой пленке  $\text{SrMnO}_3$ .

Для исследования различных типов магнитного упорядочения была использована пленка, содержащая 3 слоя и увеличенная в 4 раза в плоскости плен-

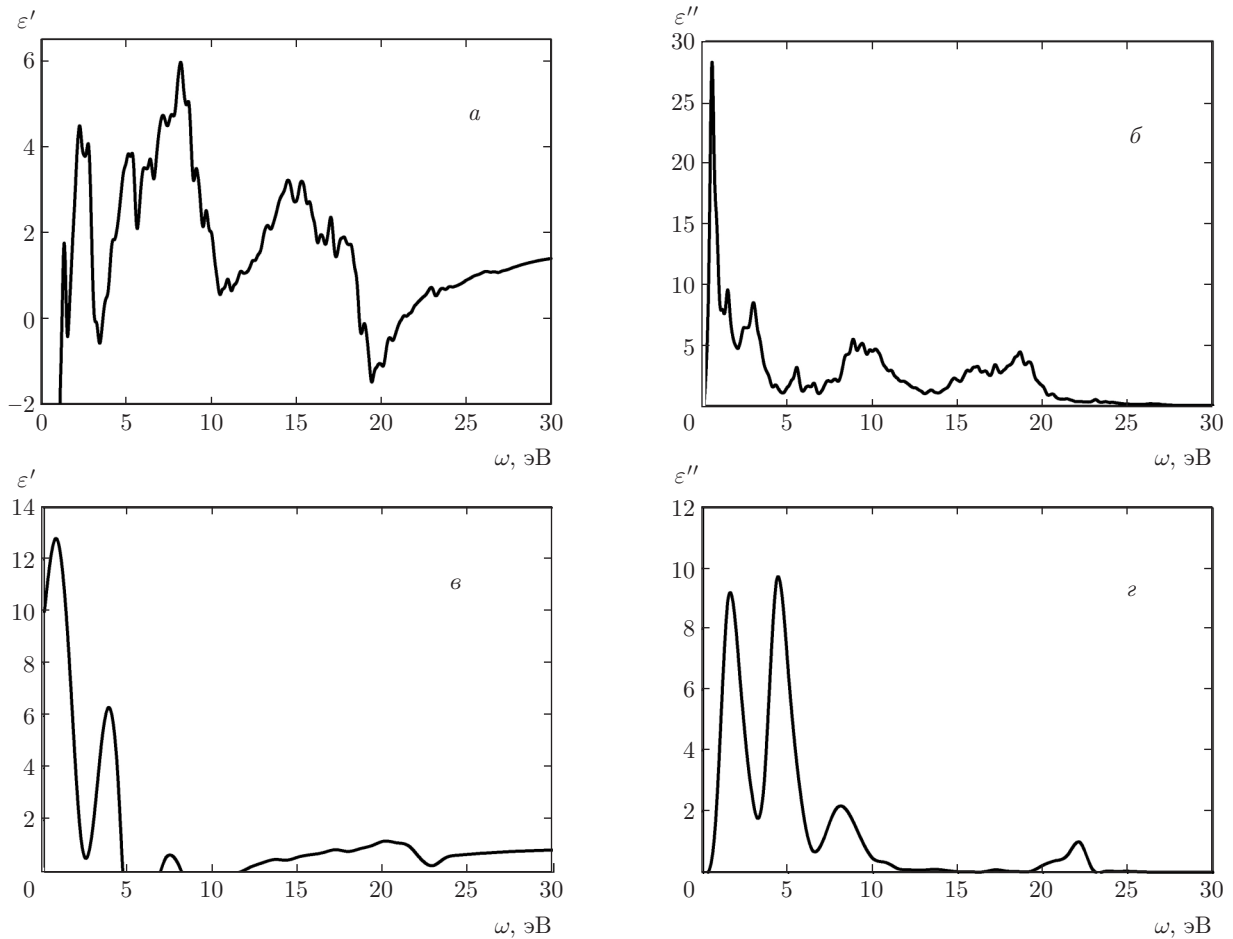


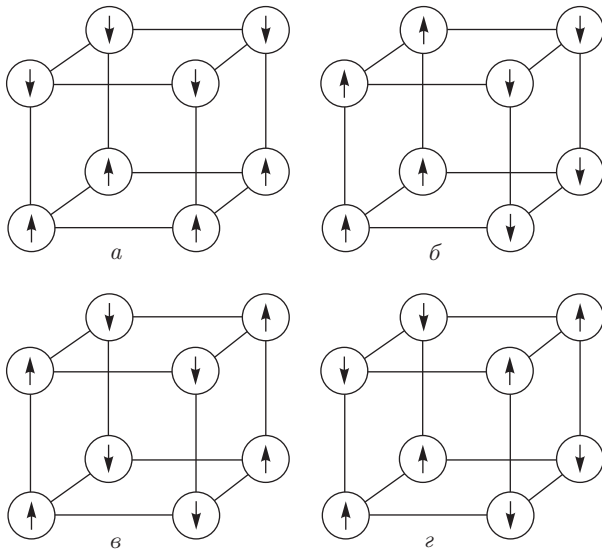
Рис. 5. Дисперсионные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости для SrFeO<sub>3</sub> (а, б) и SrMnO<sub>3</sub> (в, г)

ки. На рис. 6 схематично показаны различные случаи упорядочения магнитных моментов ионов Mn и Fe в тонких пленках, для которых проводились расчеты.

В результате расчета были найдены минимальные энергии и величины магнитных моментов для различных магнитных конфигураций в тонких пленках SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>. Полученные результаты приведены в табл. 5.

Как следует из табл. 5, так же, как и в объемных кристаллах, наиболее выгодным по энергии упорядочением магнитных моментов для тонкой пленки SrFeO<sub>3</sub> является ферромагнитное упорядочение магнитного момента (*F*), а для SrMnO<sub>3</sub> — упорядочение магнитных моментов *G*-типа. Для наиболее выгодных по энергии магнитных структур были рассчитаны плотности электронных состояний (DOS), которые приведены на рис. 7.

На рис. 7 видно, что тонкая пленка SrFeO<sub>3</sub>, как и объемный кристалл, остается ферромагнитным металлом. Однако, в отличие от объемного кристалла, на уровне Ферми возникает пик, полностью связанный с электронами, имеющими положительный спин, т. е. в пленке возникает 100-процентная спиновая поляризация электронов, что представляет интерес для приложений в спинтронике. В то же время, в тонкой пленке SrMnO<sub>3</sub>, в отличие от объемного кристалла, появляется запрещенная зона с шириной около 1.5 эВ, т. е. SrMnO<sub>3</sub> претерпевает переход из металлического в диэлектрическое состояние при переходе от объемного соединения к тонкой пленке. В табл. 6 приведены полученные статические проводимости и плазменные частоты для тонких пленок SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>. Видно, что хотя SrFeO<sub>3</sub> и сохраняет в тонкопленочном состоянии металлические свойства, однако величина проводимости значительно снижается.

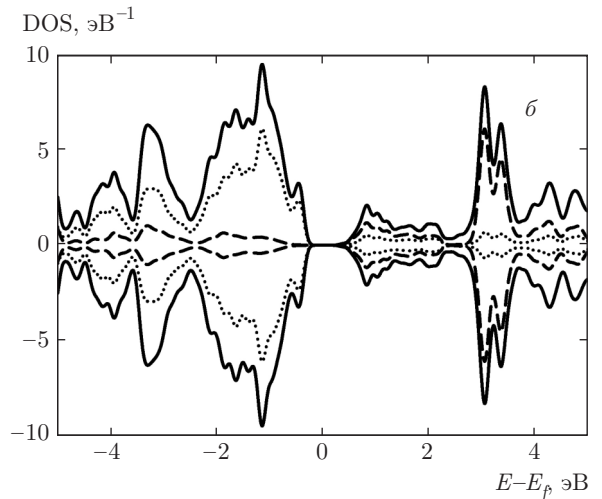
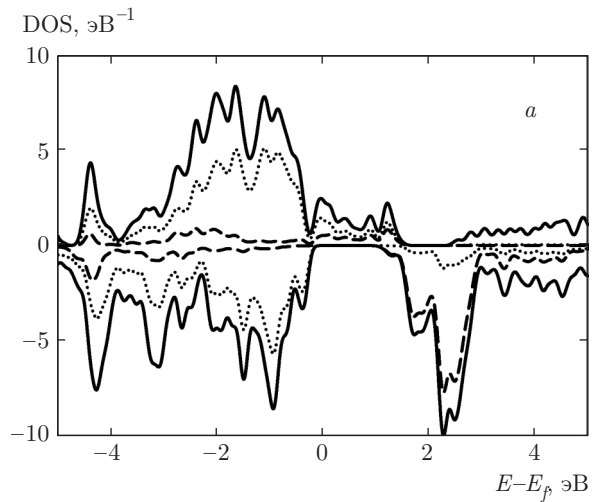


**Рис. 6.** Схематическое изображение различных типов антиферромагнитных структур в тонких пленках SrMeO<sub>3</sub>: а — А-тип упорядочения магнитного момента; б — В-тип антиферромагнитного упорядочения; в — С-тип антиферромагнитного упорядочения; г — G-тип антиферромагнитного упорядочения

**Таблица 5.** Магнитная конфигурация, полная энергия ( $E$ ) и величина магнитного момента ( $\mu$ ) для тонких пленок SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>

	Тип магнитного упорядочения	$E$ , эВ	$\mu$ (Fe/Mn), $\mu_B$
SrFeO <sub>3</sub>	$F$	-300.112	3.809
	$A$	-299.881	$\pm 3.809$
	$B$	-299.184	$\pm 3.760$
	$C$	-299.486	$\pm 3.759$
	$G$	-298.917	$\pm 3.737$
SrMnO <sub>3</sub>	$F$	-315.033	3.190
	$A$	-315.015	$\pm 3.166$
	$B$	-315.098	$\pm 3.140$
	$C$	-315.137	$\pm 3.166$
	$G$	-315.292	$\pm 3.135$

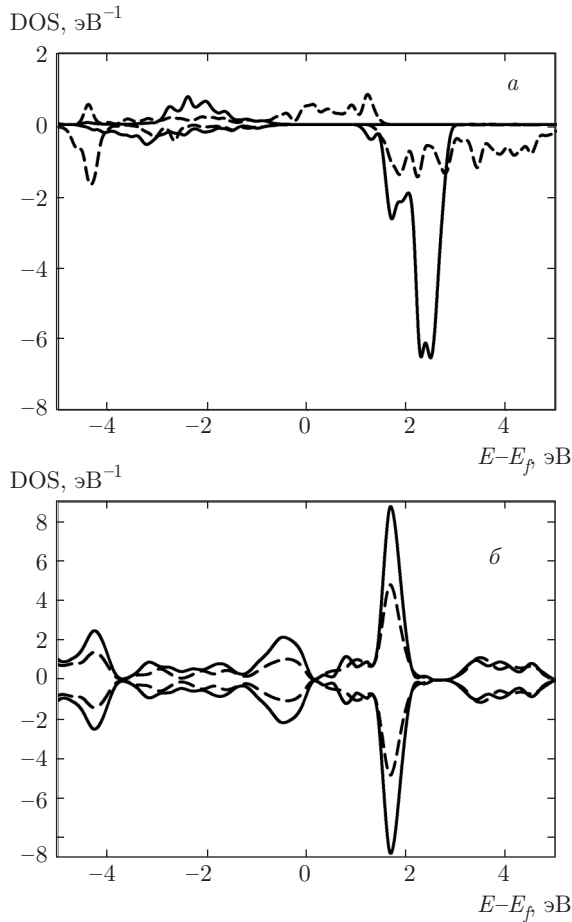
Основной вклад в плотность состояний SrFeO<sub>3</sub> вблизи уровня Ферми вносят только  $eg$ -электроны железа, которые и дают вклад в спиновую поляризацию для данного соединения (рис. 8а). В SrMnO<sub>3</sub> валентная зона занята как  $eg$ -, так и в большей



**Рис. 7.** Полная и частичная плотности электронных состояний для ферромагнитной фазы SrFeO<sub>3</sub> (а) и антиферромагнитной G-фазы SrMnO<sub>3</sub> (б). Полная плотность состояний показана сплошной линией,  $d$ -состояния железа показаны штриховой линией,  $p$ -состояния кислорода показаны пунктиром. Нулевой энергии соответствует уровень энергии Ферми

**Таблица 6.** Статические проводимости ( $\delta_0/\tau$ ) и плазменные частоты ( $\omega_{pl}$ ) для тонких пленок SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>

	SrFeO <sub>3</sub>		SrMnO <sub>3</sub>	
	$x = y$	$z$	$x = y$	$z$
$\omega_{pl}$ , эВ	2.42	0.98	0.00	0.0
$\delta_0/\tau$ , МСМ/м	0.05	0.01	0.00	0.00



**Рис. 8.** Плотность электронных состояний для SrFeO<sub>3</sub> (а); SrMnO<sub>3</sub> (б). Сплошной линией обозначены *t2g*-электроны марганца, штриховой линией — *eg*-электроны марганца. Нулевой энергии соответствует уровень энергии Ферми

степени *t2g*-электронами марганца, а зона проводимости образуется преимущественно незаполненными *eg*-состояниями Mn (рис. 8б).

Таким образом, поскольку тонкая пленка SrMnO<sub>3</sub> является диэлектриком, в ней возможно возникновение сегнетоэлектрической фазы при конденсации нестабильной полярной моды (см. табл. 4). Поляризация в полярной фазе была рассчитана с помощью формулы

$$P_{\alpha} = \frac{1}{V} \sum Z_{\alpha\beta} u_{\beta},$$

где  $Z_{\alpha\beta}$  — динамические заряды Борна,  $u_{\beta}$  — смещение ионов в низкосимметричной фазе относительно высокосимметричной, и составила значение  $P = 23$  мкКл/см<sup>2</sup>. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальным наблюдением сегнетоэлектрической поляризации в тонкой пленке SrMnO<sub>3</sub> [24].

Наконец, на рис. 9 показаны дисперсионная зависимость диэлектрической функции для тонких пленок SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub>. При сравнительном анализе видно, что дисперсионные зависимости *xx*- и *zz*-компонент оптических характеристик различаются интенсивностью пиков, тогда как положения пиков практически совпадают. Наблюдаемые сильные пики в мнимой части диэлектрической функции SrMnO<sub>3</sub> при энергии 1.5 эВ (рис. 9г) можно связать с переходом электронов из валентной зоны вблизи энергии Ферми в зону проводимости, отделенную запрещенной зоной примерно той же величины. Второй пик при энергии порядка 4.5 эВ можно связать с переходом из заполненных состояний вблизи энергии Ферми в пустые *t2g*-состояния, где на плотности состояний имеется значительный пик.

Различие оптических свойств объемных кристаллов и тонких пленок заключается, во-первых, в уширении пиков в дисперсионной зависимости диэлектрической функции, а во-вторых, в появлении новых пиков в средней области частот, связанных с изменением электронной структуры.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе в рамках теории функционала плотности, реализованного в пакете VASP, проведено исследование поляризационных, магнитных, электронных и оптических свойств объемных кристаллов и тонких пленок соединений со структурой перовскита, содержащих магнитные ионы. Были получены следующие результаты.

Объемные кристаллы SrFeO<sub>3</sub> и SrMnO<sub>3</sub> не обладают сегнетоэлектрической нестабильностью. В тонких пленках при равновесном параметре решетки сегнетоэлектрическая нестабильность также отсутствует, однако при увеличении напряжения растяжения, связанного с подложкой, происходит смягчение полярной моды колебаний.

Наиболее выгодным по энергии как для объемных кристаллов, так и для тонких пленок, упорядочением магнитных моментов является ферромагнитное упорядочение (*F*) в SrFeO<sub>3</sub> и антиферромагнитное упорядочение *G*-типа в SrMnO<sub>3</sub>. В то же время объемные кристаллы исследуемых соединений и тонкая пленка SrFeO<sub>3</sub> являются металлами, тогда как в плотности электронных состояний тонкой пленки SrMnO<sub>3</sub> появляется энергетическая щель величиной около 1.5 эВ. Это вместе с наличием сегнетоэлектрической нестабильности говорит о появлении сегнетоэлектрической фазы в тонкой пленке,



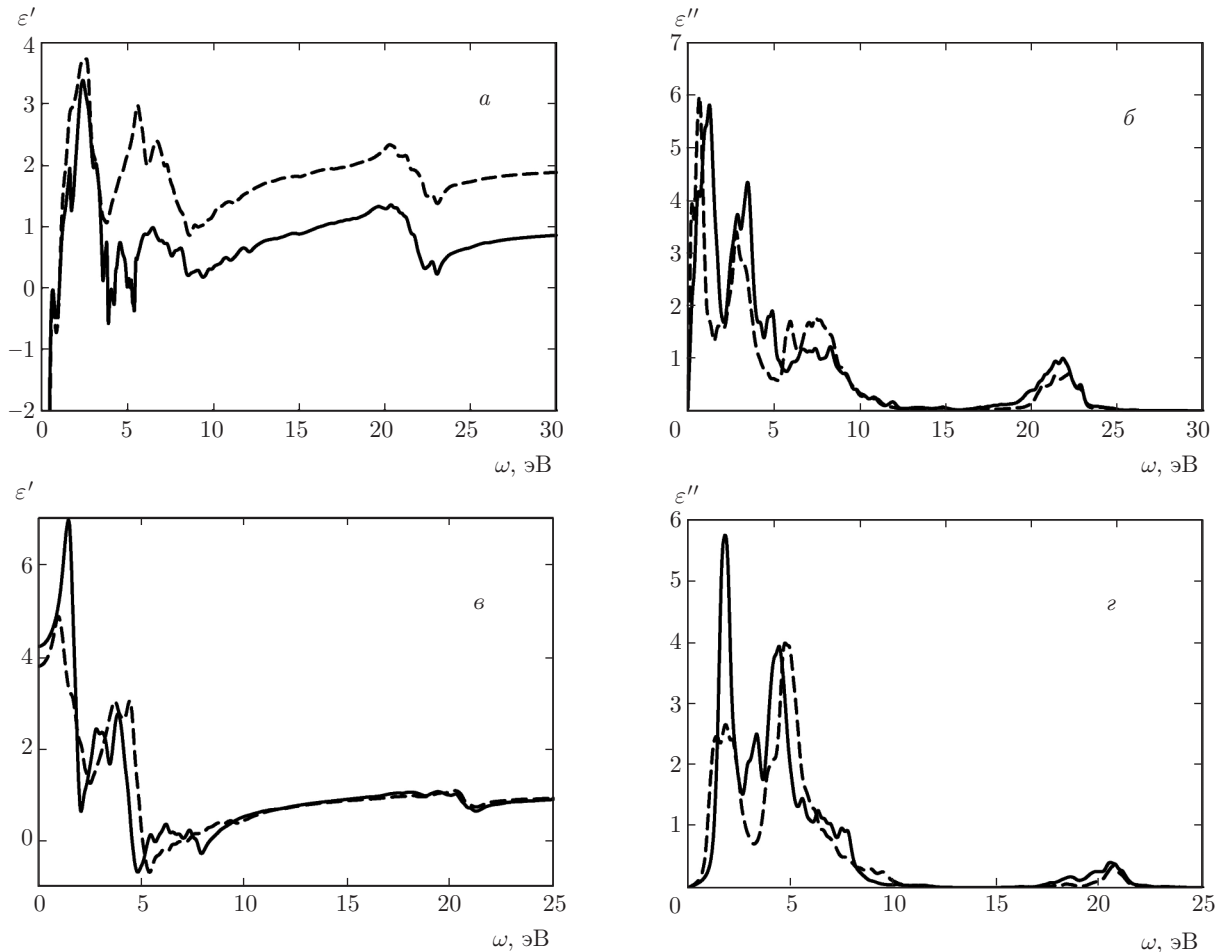


Рис. 9. Дисперсионные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости для SrFeO<sub>3</sub> (а, б) и SrMnO<sub>3</sub> (в, г), *xx*-компоненты показаны сплошной линией, *zz*-компоненты — штриховой

что подтверждается экспериментальными данными. Показано, что тонкая пленка SrFeO<sub>3</sub>, в отличие от объемного кристалла, обладает 100-процентной спиновой поляризацией, что делает ее потенциальным кандидатом для применения в спинтронике.

Проведен расчет оптических свойств исследуемых соединений в объемных кристаллах и тонких пленках. Получены дисперсионные зависимости оптических характеристик в объемном и тонкопленочном состояниях. Проведено сравнение их изменения с понижением размерности соединения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-02-00340), а также при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности (проект № 16-42-243035). Работа проведена с использованием оборудования центра

коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мего-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.urcki.ru>.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Bai, L. Han, X. Liu, X. Deng, X. Wu, C. Yao, Q. Liang, and J. Meng, *J. Sol. St. Chem.* **217**, 64 (2014).
2. D. G. Franco, R. E. Carbonio, and G. Nieva, *IEEE Trans. Magn.* **49**, 4594 (2013).
3. G. Vaitheeswaran, V. Kanchana, and A. Delin, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 032513 (2005).
4. D. Stoeffler and C. Etz, *J. Phys.: Condens. Matter.* **18**, 11291 (2006).
5. S. Gong, P. Chen, and B. G. Liu, *J. Magn. Magn. Mater.* **349**, 74 (2014).

6. T. G. King, M. E. Preston, B. J. M. Murphy, and D. S. Cannell, *Precis. Eng.* **12**, 131 (1990).
7. Harvey Amorín, Miguel Algueró, Rubén Del Campo, Eladio Vila, Pablo Ramos, Mickael Dollé, Yonny Romaguera-Barcelay, Javier Pérez De La Cruz, and Alicia Castro, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **16**, 016001 (2015).
8. J. D. P. Rao and V. Krichevsky, *IEEE Trans. Antennas Propagation* **47**, 458 (1999).
9. A. Narazaki, K. Tanaka, and K. Hirao, *J. Mater. Res.* **14**, 3640 (1999).
10. J. F. Scott and C. A. P. D. Araujo, *Science* **246**, 1400 (1989).
11. R. Ramesh and N. A. Spaldin, *Nature Mater.* **6**, 21 (2007).
12. Ni Hu, Chengliang Lu, Zhengcai Xia, Rui Xiong, Pengfei Fang, Jing Shi, and Jun-Ming Liu, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7**, 26603 (2015).
13. L. W. Martin, S. P. Crane, Y.-H. Chu, M. B. Holcomb, M. Gajek, M. Huijben, C.-H. Yang, N. Balke, and R. Ramesh, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 434220 (2008).
14. K. A. Müller and H. Bukard, *Phys. Rev. B* **19**, 3593 (1979).
15. W. Zhong and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **53**, 5047 (1996).
16. H. W. Jang, A. Kumar, S. Denev et al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 197601 (2010).
17. J. H. Haeni, P. Irvin, W. Chang, R. Uecker, P. Reiche, Y. L. Li, S. Choudhury, W. Tian, M. E. Hawley, B. Craigo, A. K. Tagantsev, X. Q. Pan, S. K. Streifler, L. Q. Chen, S. W. Kirchoefer, J. Levy, and D. G. Schlom, *Nature* **430**, 758 (2004).
18. O. Chmaissem et al., *Phys. Rev. B* **64**, 134412 (2001).
19. T. Takeda and S. Ohara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **37**, 275 (1974).
20. J. H. Lee and K. M. Rabe, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 207204 (2010).
21. T. Takeda, Y. Yamaguchi, and H. Watanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **33**, 967 (1972).
22. Z. Li, T. Iitaka, and T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **86**, 094422 (2012).
23. I. R. Shein, K. I. Shein, V. L. Kozhevnikov, and A. L. Ivanovskioe, *ФТТ* **47**, 1998 (2005).
24. Carsten Becher, Laura Maurel, Ulrich Aschauer, Martin Lilienblum, César Magén, Dennis Meier, Eric Langenberg, Morgan Trassin, Javier Blasco, Ingo P. Krug, Pedro A. Algarabel, Nicola A. Spaldin, José A. Pardo, and Manfred Fiebig, *Nature Technol.* **10**, 661 (2015).
25. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
26. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
27. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **57**, 1505 (1998).
28. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
29. The Munich SPR-KKR package, version 6.3, H. Ebert et al., <http://ebert.cup.uni-muenchen.de/SPRKKR>; H. Ebert, D. Kodderitzsch, and J. Minär, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 096501 (2011).