

## РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ BaTiO<sub>3</sub>/Fe

Кирилл Васильевич Евсеев

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: eky97@mail.ru

**Ключевые слова:** DFT, гетероструктура ферромагнетик, сегнетоэлектрик, эффект обратной магнитострикции.

Недавно, для устройств нового поколения была быстро разработана так называемая гибкая электроника [1, 2] с уникальными характеристиками износостойкости и малым весом. Особый интерес вызывает многомодовая перестраиваемая гибкая спинтроника, основанная на гетероструктурах ферромагнетик/сегнетоэлектрический оксид, обладающих более высокой скоростью, меньшими размерами и более эффективной энергией, чем их традиционные аналоги, управляемые током [3, 4]. В работе [5] было показано, что сверхгибкие мультиферроидные гетероструктуры на основе железа (Fe)/BaTiO<sub>3</sub>(ВТО), демонстрируют идеальную кристалличность и гетероэпигаксиальный рост.

В настоящей работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП/DFT) была исследована пленочная гетероструктура Fe/BaTiO<sub>3</sub>. Выбор компонентов гетероструктуры мотивирован тем, что Fe и BaTiO<sub>3</sub> являются двумя «классическими» ферроидными материалами, обладающими хорошо известными свойствами в объеме. Кроме того,bcc Fe и перовскит BaTiO<sub>3</sub> имеют очень хорошее совпадение постоянных решеток (рассогласование составляет всего около 1.4%), что позволяет проводить послойный эпигаксиальный рост мультислоев Fe = BaTiO<sub>3</sub> без существенных дислокаций несоответствия, а также производить моделирование гетероструктуры на компьютере.

В результате проделанной работы были исследованы эффект обратной магнитострикции, влияние смены поляризации сегнетоэлектрика на магнитные свойства железа, структурные, электронные и магнитные свойства гетероструктуры ферромагнетик/сегнетоэлектрик на примере Fe/BaTiO<sub>3</sub>.

### Список литературы

1. Ota, S. CoFeB/MgO-based magnetic tunnel junction directly formed on a flexible substrate / Ando A., Chiba D. // Nat. Electron – 2018, №1, P. 124.
2. Makarov, D. Shapeable magnetoelectronics / Melzer M., Shmidt O.G. // Appl. Phys. Rev – 2016, № 3. P. 011101.
3. Won, S. Flexible vibrational energy harvesting devices using strain-engineered perovskite piezoelectric thin films / Seo H., Kawahara M. // Nano Energy – 2019, № 55, P. 182.
4. Yao, J. Magnetoelectric couplings in high-density array of nanoscale Co/BiFeO<sub>3</sub> multiferroic heterostructures / Song X., Gao X. // ACS Nano – 2018, № 12, P. 6767.
5. Lu, N. Electric-field control of tri-state phase transformation with a selective dual-ion switch / Zhang P., Zhang Q. // Nature – 2017, № 546, P. 124.