

Исследование стабильности, структурного и магнитного упорядочения в магнитном МХене $(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{C}_2$

А. С. Шинкоренко⁺, В. С. Жандун⁺¹⁾, Н. Г. Замкова⁺

⁺Институт физики им. Л. В. Киренского – обособленное подразделение “Федеральный исследовательский центр “Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской Академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

^{*}Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого, 660022 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 9 октября 2024 г.

После переработки 8 ноября 2024 г.

Принята к публикации 13 ноября 2024 г.

В данной работе в рамках первопринципных расчетов и кластерного приближения проведен анализ термодинамической стабильности, магнитных и электронных свойств нового 2D магнитного соединения $(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{C}_2$ из семейства МХенов. Предложена наиболее стабильная структура и магнитная конфигурация $(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{C}_2$, в том числе с учетом функционализации поверхности фтором и кислородом. Впервые обнаружен стабильный и перспективный для синтеза ферромагнитный МХен $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ с большим магнитным моментом на ячейку, как в чистом виде, так и при функционализации его поверхности фтором.

DOI: 10.31857/S0370274X25010079, EDN: ERUASZ

1. Введение. С момента своего открытия в 2011 г., семейство двумерных материалов МХены вызывает большой интерес благодаря своим уникальным физическим свойствам. МХены представляют собой двумерные материалы с общей формулой $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$ (M – переходной металл, X – углерод или азот, T – функциональная группа F, O, OH и т.п., $n = 1–3$). В зависимости от состава выделяют МХены двух типов. Первый тип – моно-МХены, где M -слои состоят из одного и того же переходного металла (Ti_2CT_x , V_2CT_x , $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$, $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$) [1]. Во втором типе МХенов в слое смешаны два (или более) переходных металла $(\text{M}_1,\text{M}_2)_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$. При этом различные переходные металлы M_1 и M_2 могут как упорядочиваться в одной плоскости, так и образовывать целые плоскости, занятые одним типом переходного металла [2]. Второй тип более характерен для МХенов 2-го порядка $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$, где $n = 2$ ($\text{M}_3\text{X}_2\text{T}_x$), тогда как в МХенах 1-го порядка $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$, где $n = 1$ (M_2XT_x) скорее наблюдается упорядочение в плоскости [1, 2].

В последнее время особое внимание уделяется магнитным МХенам [3–7]. Двумерные магнитные материалы привлекают к себе внимание благодаря их потенциальному использованию в электронных устройствах, использующих манипуляцию спиновой степенью свободы носителей. Однако несмотря на то,

что семейство МХенов обладает большим разнообразием возможного химического состава, в настоящее время экспериментально получены лишь несколько магнитных МХенов [8–12]. Основной причиной является фазовая нестабильность магнитных МХенов. Большинство синтезированных на сегодня МХенов имеют в своем составе ранние переходные металлы, такие как Ti, Mo, W, и являются немагнитными [3, 13, 14]. Для получения магнитных МХенов в их состав необходимо включить поздние переходные металлы такие как Cr, Mn или Fe. В работах [12–18] в рамках теории функционала плотности (ТФП) было предсказано существование ферромагнетизма в ряде МХенов на основе Cr, Mn и Fe. Особый интерес представляют железосодержащие МХены, поскольку наличие атома Fe позволяет ожидать, что такие соединения будут обладать высокими значениями магнитных моментов, что обеспечит сильный результирующий магнетизм. Так, в [17, 18] авторы теоретически показали, что МХены первого порядка Fe_2C обладают термодинамической стабильностью и высокими значениями локальных магнитных моментов при высокой температуре Кюри. Также показано, что МХен первого порядка Fe_2C является хорошим кандидатом для создания двумерного ферромагнетика с XY-анизотропией [18].

Однако, несмотря на обилие теоретических работ, МХены остаются в значительной степени не изученными экспериментально. Для прогнозиро-

¹⁾e-mail: jvc@iph.krasn.ru

вания новых стабильных структур с желаемыми свойствами оказались весьма полезными расчеты из первых принципов. Подобные расчеты могут предсказать структурные параметры, энергию образования соединения, его электронную структуру и магнитные свойства, и, в общем, находятся в хорошем согласии с доступными экспериментальными данными. К сожалению, в первопринципиальных расчетах требуемый вычислительный ресурс быстро увеличивается при увеличении числа атомов в элементарной ячейке, поэтому применение этих расчетов для прогнозирования стабильности сплавов сильно ограничены. Преодолеть эту сложность можно с помощью модельных подходов. Одним из них является метод кластерного разложения [19, 20], который доказал свою эффективность при исследовании структурной и фазовой стабильности различных соединений, а также в прогнозировании новых сплавов. Так, на основе данного метода в работе [16] была исследована и предсказана стабильность большой группы МХенов второго порядка (M_1, M_2) _{$n+1$} C_n : $(V_{1-x}Mo_x)_3C_2$, $(Nb_{1-x}Mo_x)_3C_2$, $(Ta_{1-x}Mo_x)_3C_2$, $(Ti_{1-x}Mo_x)_3C_2$, $(Ti_{1-x}Nb_x)_3C_2$, $(Ti_{1-x}Ta_x)_3C_2$, $(Ti_{1-x}V_x)_3C_2$, и $(Nb_{1-x}V_x)_3C_2$. В этой группе МХенов особый интерес представляет возможность упорядочения атомов M_1 и M_2 в разных плоскостях, а также условия, необходимые для образования такого внеплоскостного упорядочения и его влияния на магнитные свойства МХенов. Следует отметить, что в МХенах первого порядка внеплоскостное упорядочение атомов M_1 и M_2 не наблюдается. Как было показано [21, 22], наиболее стабильными МХенами, содержащими переходные d -металлы, являются хромсодержащие соединения. В то же время магнитный порядок, обеспечиваемый атомами железа, наряду с упорядочением атомов Сr и Fe в разных плоскостях позволяет контролировать состав, структуру и магнитные свойства МХенов, что является уникальным в области дизайна магнитных 2D-материалов и предлагает новый путь для прикладного проектирования функциональных наноматериалов. Поэтому в данной работе в рамках кластерного разложения и первопринципиальных расчетов рассматриваются стабильность, магнитные и электронные свойства новых магнитных МХенов второго порядка $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$.

2. Детали расчета. Расчеты проводились с использованием пакета Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [23, 24] с использованием псевдо-потенциалов PAW-PBE [25, 26]. Конфигурация валентных электронов для атомов Сr, Fe и C бралась: $3p^63d^54s^1$, $3p^63d^64s^2$, $2s^22p^2$ соответственно.

Обменно-корреляционный функционал учитывался с использованием приближения обобщенного градиента (GGA). Число плоских волн было ограничено энергией 600 эВ. Поскольку МХены представляют собой квазидвумерные тонкие пленки, то расчет проводился в рамках приближения, в котором пленки представлялись в виде периодических повторяющихся пластин, разделенных в направлении с оси слоем вакуума толщиной 12 Å. При оптимизации кристаллических структур использовалась сетка $21 \times 21 \times 1$ Монкхорста–Пака [27]. Параметры ячейки и координаты атомов оптимизировались до тех пор, пока силы на ионах не станут меньше 1 мэВ/А. Для учета магнитной анизотропии все расчеты проводились с учетом спин-орбитального взаимодействия [28].

В методе кластерного разложения (CE) [19, 20] энергия любой атомной конфигурации сплава σ может быть выражена через кластерные корреляционные функции $\xi_\alpha(\sigma)$ в виде

$$E_{CE}(\sigma) = \sum_\alpha J_\alpha \xi_\alpha(\sigma). \quad (1)$$

J_α – константа эффективного кластерного взаимодействия. Имея набор констант $\{J_\alpha\}$ можно определить энергию любой атомной конфигурации сплава (1).

Мерой фазовой стабильности данной атомной конфигурации сплава служит энергия образования $E_f(\sigma)$ по отношению к чистым соединениям

$$E_f(\sigma) = E_{CE}(\sigma) - (1 - x(\sigma))E_{CE}(M1_3C_2) - x(\sigma)E_{CE}(M2_3C_2), \quad (2)$$

где $x(\sigma)$ – концентрация атома M_2 . В рамках метода кластерного разложения можно построить карту структура–фазовая стабильность и с ее помощью найти наиболее стабильные сплавы, упорядоченные или разупорядоченные, по всему интервалу концентрации x . Для расчета эффективной энергии сплава (1) в кластерное разложение были включены одно-, двух- и трехчастичные кластеры. Таким образом, имеется 15 констант эффективного кластерного взаимодействия: J_0 соответствует пустому кластеру, J_1 и J_2 – одночастичным кластерам, J_3 – J_{10} – парным кластерам, J_{11} – J_{14} – трехчастичным кластерам. Для определения констант эффективного кластерного взаимодействия были построены соответственно 15 базовых структур сплава с различной концентрацией x на ячейках $2 \times 2 \times 1$ и $3 \times 3 \times 1$. Проверка точности расчета энергий в кластерном приближении (1) показала, что метод воспроизводит энергии, полученные из первых принципов, с точностью до 10^{-3} эВ.

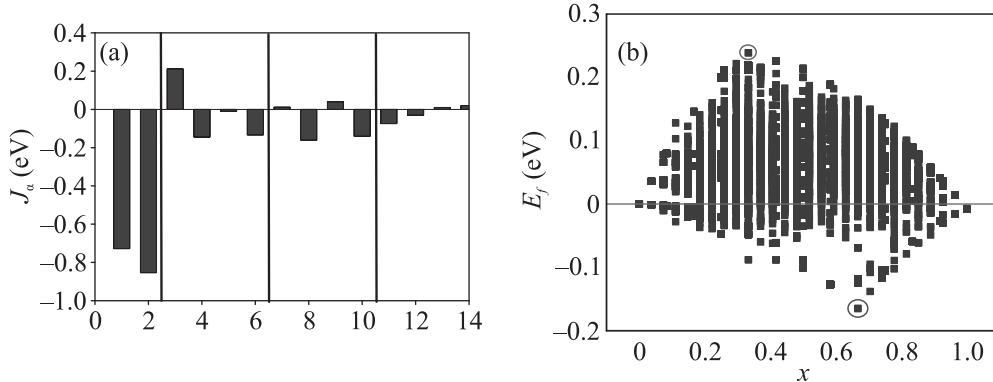


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Константы эффективного кластерного взаимодействия $\{J_\alpha\}$. Индексы по оси абсцисс соответствуют порядковому номеру константы (см. детали расчета); (б) – энергия образования (E_f) для разных концентраций атомов железа (x), рассчитанная в кластерном приближении. Красным и синим кружками отмечены наиболее стабильная и нестабильная структуры, соответственно

3. Структура, стабильность, электронные и магнитные свойства $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$. Первым шагом было определение стабильности $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$ в рамках кластерного приближения. Для этого были рассчитаны константы эффективного взаимодействия $\{J_\alpha\}$, которые показаны на рис. 1а.

Полученные константы эффективного взаимодействия были использованы для расчета энергии образования $E_f(\sigma)$ более чем 10^4 различных возможных атомных конфигураций в $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$. Для построения различных атомных конфигураций использовались ячейки, содержащие от 5 до 45 атомов. Полученная карта, отображающая соотношение структура–стабильность, приведена на рис. 1б. Каждая точка представляет определенную атомную конфигурацию сплава, чья относительная стабильность определяется энергией образования $E_f(\sigma)$, рассчитанной согласно (2). Более стабильными являются атомные конфигурации, обладающие более низким значением энергии образования $E_f(\sigma)$.

Как видно из рис. 1б, наиболее стабильной оказывается полностью упорядоченная структура с концентрацией атомов Fe $x = 2/3$. В данной структуре атомы Fe занимают поверхностные слои, как это показано на рис. 2а, атомы хрома занимают центральный внутренний слой. Наиболее нестабильной является структура при концентрации атомов железа $x = 1/3$, где атомы Fe, наоборот, полностью занимают внутренний слой (рис. 2б). Таким образом, можно сделать вывод о наличии стабильного 2D сплава $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2$, с полностью упорядоченными по слоям атомами переходных металлов. Отметим, что расчеты энергии родительских MAX фаз также указывают, что атомам металлов энергетически выгодно упорядочиваться по слоям.

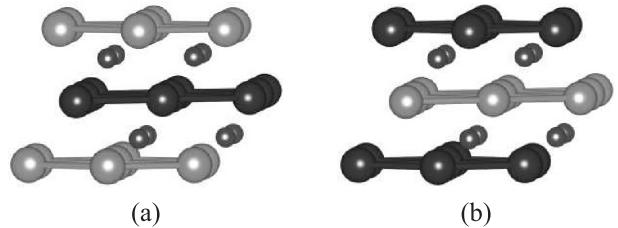


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Наиболее стабильная $((Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2)$ и (б) нестабильная $((Cr_{2/3}Fe_{1/3})_3C_2)$ структуры для $(Cr_{1-x}Fe_x)_3C_2$, соответствующие отмеченным кружками на рис. 1б. Синими шарами показаны атомы хрома, оранжевыми шарами – атомы железа. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода

Для наиболее стабильной структуры $(Cr_{1/3}Fe_{2/3})_3C_2$ (рис. 2а), в рамках ТФП было определено основное магнитное состояние. Для этого были рассчитаны энергии различных возможных магнитных конфигураций. Анализ показал, что из рассмотренных конфигураций наиболее энергетически выгодными являются две магнитные конфигурации с ферромагнитным упорядочением магнитных моментов атомов железа и хрома в отдельных плоскостях: (1) ферромагнитное (ФМ) упорядочение плоскостей; (2) ферримагнитное (ФиМ) упорядочение, при котором плоскости, занятые атомами железа упорядочены ферромагнитно, а магнитные моменты атомов хрома в центральной плоскости направлены противоположно; а также магнитное упорядочение, где магнитные моменты атомов железа и хрома упорядочены антиферромагнитно (АФМ) как в одной, так и в разных плоскостях. Энергии этих трех магнитных конфигураций приведены в табл. 1 вместе с параметрами

Таблица 1. Параметр решетки в плоскости (a), намагниченность на ячейку и магнитные моменты на атомах железа и хрома (M), энергии, рассчитанные относительно энергии ФиМ состояния ($\Delta E = E - E_{\text{FiM}}$) в “чистом” $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ и при функционализации поверхности фтором и кислородом, где NM означает НМ состояние, FM – ФМ состояние, FiM – ФиМ состояние, AFM – АФМ состояние

	$(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$	$(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2\text{ O}$	$(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2\text{ F}$
$a, \text{\AA}$	5.82	5.56	5.69
$M, \mu_B/\text{f.u.}$	2.10	0.10	5.9
M_{Cr}, μ_B	0.62	0.00	1.00
M_{Fe}, μ_B	1.35	0.00	2.40
$\Delta E_{\text{NM}}, \text{эВ/ф.е.}$	0.14	0.00	0.27
$\Delta E_{\text{FM}}, \text{эВ/ф.е.}$	0.015	0.005	0.00
$\Delta E_{\text{FiM}}, \text{эВ/ф.е.}$	0.00	0.002	0.21
$\Delta E_{\text{AFM}}, \text{эВ/ф.е.}$	0.10	0.05	0.25

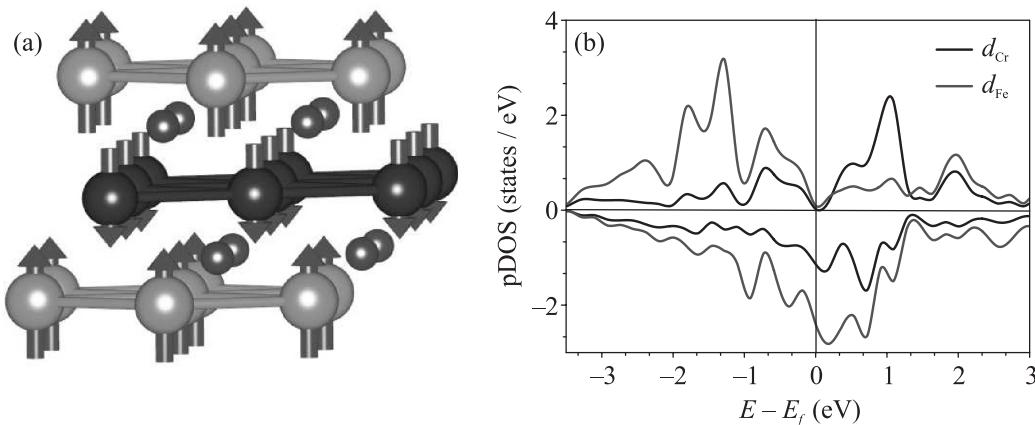


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Магнитное упорядочение в $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$. Синими шарами показаны атомы хрома, оранжевыми шарами – атомы железа. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода. Стрелки показывают направление магнитных моментов; (б) – Парциальные плотности состояний в МХене $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$. Черная линия соответствует d -состояниям хрома, красная линия – d -состояниям железа. Отрицательные значения на шкале энергий отвечают состояниям со спином вниз. Ноль на шкале энергий соответствует энергии Ферми

решетки и магнитными моментами атомов железа и хрома в основном состоянии. Кроме того, в табл. 1 приведена энергия немагнитного состояния (НМ).

Как видно из табл. 1 в $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ наиболее энергетически выгодным является ФиМ состояние (рис. 3а), при котором атомы железа, расположенные в поверхностных слоях, имеют магнитные моменты $\mu \approx 1.35 \mu_B$, тогда как на атомах хрома, расположенных в центральном слое, магнитный момент направлен противоположно моментам железа и имеет меньшую величину ($\mu \approx 0.62 \mu_B$). Отметим, учет спин-орбитального взаимодействия показал, что наиболее энергетически выгодным является направление магнитных моментов вдоль оси с.

Как видно из рис. 3б, где приведены рассчитанные парциальные плотности состояний, $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ является металлом. Электронные состояния вблизи энергии Ферми занимают d -электроны железа и хрома, образуя d -зоны.

d -электроны железа занимают преимущественно состояния со спином вверх, тогда как состояния со спином вниз заняты лишь частично, что приводит к формированию положительного магнитного момента на атоме железа (табл. 1). В атоме хрома все d -орбитали со спином вверх и вниз частично заполнены с небольшим преобладанием состояний со спином вниз, что формирует небольшой отрицательный момент на атоме хрома. Такое распределение электронов в результате приводит к наблюдаемой ФиМ структуре.

4. Влияние функционализации поверхности на магнитные свойства МХенов. В процессе синтеза к поверхностным слоям МХенов могут присоединяться функциональные группы $T = F, O, OH$ и т.д. Состав этих групп определяется химией среды во время травления и последующей обработки МХенов. Такая функционализация поверхности может привести к изменениям свойств МХенов, в том

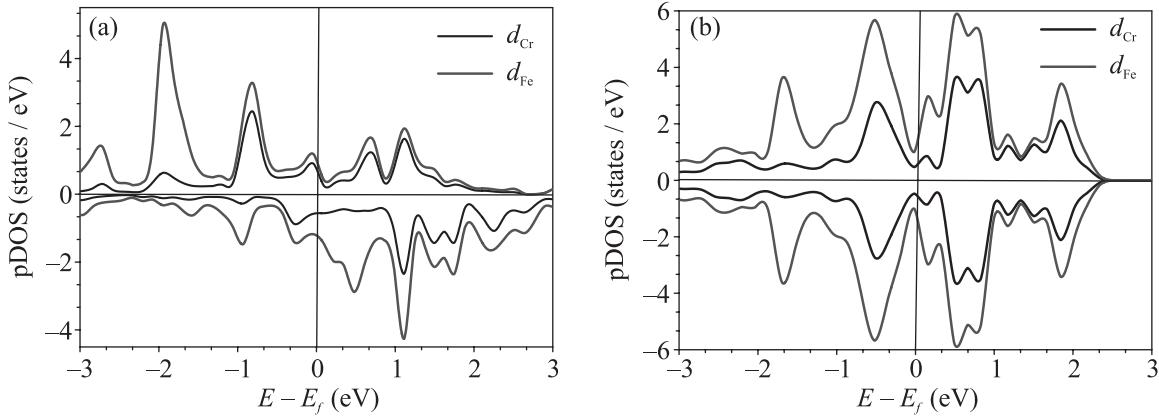


Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальные плотности состояний $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ при функционализации его поверхности: (а) – фтором и (б) – кислородом. Чёрная линия соответствует d -состояниям хрома, красная линия – d -состояниям железа. Отрицательные значения на шкале энергий отвечают состояниям со спином вниз. Ноль на шкале энергий соответствует энергии Ферми

числе магнитных [16, 21, 29]. На поверхностях МХенов есть несколько позиций, где могут располагаться функциональные группы [21, 29]. Как показывают наши предварительные оценки и анализ литературы, наиболее энергетически выгодной является структура, в которой функциональные группы локализованы выше октаэдрических междуузлий поверхностных слоев атомов переходных металлов над атомами углерода.

Для анализа влияния поверхностных функциональных групп на структурные и магнитные свойства рассматриваемых МХенов были определены энергетически выгодные магнитные упорядочения при функционализации поверхности МХенов фтором и кислородом. При функционализации поверхности как фтором, так и кислородом, $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2\text{T}_2$ остается металлом (рис. 4). Однако, функционализация поверхности влияет на магнитные свойства рассматриваемого МХена. При функционализации поверхности МХена кислородом $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2\text{O}$ магнитные моменты на поверхностных и внутренних атомах исчезают, и соединение становится немагнитным (табл. 1). В случае же функционализации поверхности МХена фтором, $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2\text{F}$ остается магнитным, но его магнитное состояние меняется с ФиМ на ФМ состояния (рис. 5, табл. 1). Магнитные моменты, как на поверхностных атомах железа, так и на внутренних атомах хрома увеличиваются по сравнению с их величинами в МХене со свободной поверхностью. Изменение магнитного состояния и увеличение магнитных моментов связано с перестройкой плотности занятых состояний d -электронов атомов железа и хрома вблизи энергии Ферми (рис. 4). Пики от

d -электронов железа и хрома со спином вверх смещаются ниже по энергии и локализуются ниже энергии Ферми, тогда как пики, соответствующие d -электронам со спином вниз смещаются выше энергии Ферми. В результате на атомах, как железа, так и хрома формируются положительные магнитные моменты, и магнитное состояние становится ФМ (рис. 4а). Наоборот, в случае функционализации поверхности кислородом на плотности состояний, как для спинов вверх, так и спинов вниз образуется ярко выраженная двухпиковая структура ниже энергии Ферми, причем все состояния оказываются заполненными, в результате магнитный момент на атомах железа и хрома исчезает (рис. 4б).

Возможный механизм влияния функциональной группы на магнитные свойства МХена заключается в следующем. У атома кислорода имеется две незаполненные p -орбитали, в отличие от фтора, у которого не заполнена только одна p -орбиталь. Поэтому в случае функционализации поверхности фтором для образования связи Fe–F единственное d -состояние со спином вниз опустошается (рис. 4а), и в результате формируется магнитный момент (табл. 1) с большим значением, чем для МХена со свободной поверхностью и при функционализации поверхности МХена кислородом. И, наоборот, при функционализации поверхности кислородом два состояния со спином вверх отдают свои электроны для образования связи Fe–O. Это приводит к наблюдаемому смещению плотности электронных состояний со спином вверх вправо к энергии Ферми и состояний со спином вниз влево к энергии Ферми (рис. 4б). Результатом этого является исчезновение магнитного момента при функционализации поверхности кислородом.

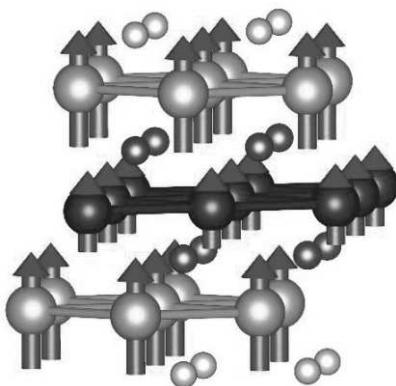


Рис. 5. (Цветной онлайн) Магнитное упорядочение в МХене $(\text{Cr}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})_3\text{C}_2$ при функционализации его поверхности фтором. Синими шарами показаны атомы железа, оранжевыми шарами – атомы хрома. Маленькими коричневыми шарами показаны атомы углерода. Стрелки показывают направление магнитных моментов. Функциональные группы на поверхности МХена показаны красными и белыми шарами для кислорода и фтора, соответственно

5. Заключение. Расчет в рамках ТФП и метода кластерного разложения стабильности, магнитных и электронных свойств 2D сплава $(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{C}_2$ из семейства МХенов показывает, что данное соединение является перспективным 2D магнитным материалом. Обнаружено, что при концентрации железа $x = 2/3$ сплав $(\text{Cr}_{2/3}\text{Fe}_{1/3})_3\text{C}_2$ обладает фазовой стабильностью и является ферримагнетиком с намагниченностью $M = 2.1 \mu_B/\text{ф.е.}$ Функционализация поверхности фтором приводит к формированию ФМ-состояния, причем намагниченность увеличивается до $\approx 6 \mu_B/\text{ф.е.}$ Таким образом, мы показали принципиальную возможность получения двумерного ферромагнитного сплава, содержащего хром и железо для применения в электронной индустрии. Как уже упоминалось, большинство МХенов получают путем селективного травления слоя А-атомов из соответствующей MAX-фазы, в процессе которого к поверхностным слоям МХена присоединяются функциональные группы T=F, O, OH, определяемые химией среды во время травления. Поскольку наиболее интересный результат наблюдается при функционализации поверхности МХена фтором, то можно рекомендовать при синтезе использовать F-содержащие растворы, такие как плавиковая кислота HF или фторид лития LiF. Более того, можно ожидать, что функционализация поверхности других двумерных магнитных веществ также может привести к изменению магнитного упорядочения между слоями, что представляет интерес для дальнейших исследований.

Расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов “Комплекса исследовательских установок моделирования и обработки данных мегакласса” НИЦ “Курчатовский институт” (<http://ckp.urcki.ru>).

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта российского научного фонда # 23-22-10020 <https://rscf.ru/project/23-22-10020/>, Красноярского краевого фонда науки.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

- Y. Gogotsi and B. Anasori, ACS Nano **13**, 8491 (2019).
- W. Hong, B.C. Wyatt, S.K. Nemani, and B. Anasori, MRS Bull. **45**(10), 850 (2020); <https://doi.org/10.1557/mrs.2020.251>.
- B. Anasori, Y. Xie, M. Beidaghi, J. Lu, B.C. Hosler, L. Hultman, P.R.C. Kent, Y. Gogotsi, and M.W. Barsoum, ACS Nano **9**, 9507 (2015).
- B. Anasori, C. Shi, E.J. Moon, Y. Xie, C.A. Voigt, P.R.C. Kent, S.J. May, S.J.L. Billinge, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, Nanoscale Horizons **1**, 227 (2016).
- C. Si, J. Zhou, and Z. Sun, ACS Appl. Mater. Interfaces **7**, 17510 (2015).
- M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, C.Y. Chung, N.S. Venkataraman, M. Estili, Y. Sakka, and Y. Kawazoe, Adv. Function. Mater. **23**, 2185 (2013).
- J. He, P. Lyu, and P. Nachtigall, J. Mater. Chem. C **4**, 11143 (2016).
- J. Yang, M. Naguib, M. Ghidiu, L.M. Pan, J. Gu, J. Nanda, J. Halim, Y. Gogotsi, and M.W. Barsoum, J. Am. Ceram. Soc. **99**, 660 (2016).
- Z. Shen, Z. Wang, M. Zhang, M. Gao, J. Hu, F. Du, Y. Liu, and H. Pan, Materialia **1**, 114 (2018).
- D. Pinto, B. Anasori, H. Avireddy, C.E. Shuck, K. Hantanasirisakul, G. Deysher, J.R. Morante, W. APorzio, H.N. Alshareef, and Y. Gogotsi, J. Mater. Chem. A **8**, 8957 (2020).
- S. Yazdanparast, S. Soltanmohammad, A. Fash-White, G. Tucker, and G.L. Brennecke, ACS Appl. Mater. Interfaces **12**, 20129 (2020).
- M. Naguib, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, Adv. Mater. **33**, 2103393 (2021).
- L. Li, Comput. Mater. Sci. **124**, 8 (2016).
- R. Meshkian, Q. Tao, M. Dahlqvist, J. Lu, L. Hultman, and J. Rosen, Acta Mater. **125**, 476 (2017).
- K. Hantanasirisakul, B. Anasori, S. Nemsak, J.L. Hart, J. Wu, Y. Yang, R.V. Chopdekar, P. Shafer, A.F. May, E.J. Moon, J. Zhou, Q. Zhang, M.L. Taheri, S.J. May, and Y. Gogotsi, Nanoscale Horizons **5**, 1557 (2020).
- T.L. Tan, H.M. Jin, M.B. Sullivan, B. Anasori, and Y. Gogotsi, ACS Nano **11**, 4407 (2017).
- Y. Yue, Journ. Magn. Magn. Mater. **434**, 164 (2017).

18. E. M. Agapov, I. A. Kruglov, and A. A. Katinin, 2D Mater. **11**, 025001 (2024).
19. J. M. Sanchez, F. Ducastelle, and D. Gratias, Physica **128A**, 334 (1984).
20. D. De Fontaine, Physics **47**, 33 (1994).
21. J. Yang, X. Zhou, X. Luo, S. Zhang, and L. Chen, Appl. Phys. Lett. **109**, 203109 (2016).
22. J. Yang, S. Zhang, A. Wang, R. Wang, C. K. Wang, G. P. Zhang, and L. Chen, Nanoscale **10**, 19492 (2018).
23. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
24. P. E. Blochl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
25. G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
26. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
27. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
28. S. Steiner, S. Khmelevskyi, M. Marsman, and G. Kresse, Phys. Rev. B **93**, 224425 (2016).
29. S. Bae, Y.-G. Kang, M. Khazaei, K. Ohno, Y.-H. Kim, M. J. Han, K. J. Chang, and H. Raebiger, Materials Today Advances **9**, 100118 (2021).