

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.11.28>

УДК: 544.225

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$

И.С. Лебедев ¹, А.В. Кудрявцев ¹, А.И. Карцев ^{1,2}, Е.Т. Мирзоева ¹,

¹МИРЭА – Российский технологический университет
119454, Москва, пр-т Вернадского 78

²Вычислительный центр ДВО РАН,
680063, Хабаровск, ул. Ким Ю Чена, 65

Статья поступила в редакцию 3 октября 2025 г.

Аннотация. В настоящей работе проведено исследование влияния легирования на электронные и магнитные свойства монослойного соединения $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ на основании расчета из первых принципов. В ходе работы рассчитаны плотности электронных состояний, значения ширины запрещенной зоны, постоянные кристаллической решетки и разности полных энергий для ферромагнитной и антиферромагнитной конфигураций при различных взаимных концентрациях атомов хлора и фтора. Расчеты выполнены в рамках метода теории функционала плотности с поправкой Хаббарда, учитывающей сильную локализацию d -электронов хрома, а варьирование состава реализовано методом виртуального кристалла. Получено, что исследуемые материалы сохраняют полупроводниковый характер для всего диапазона дольного коэффициента x , при этом ширина запрещенной зоны изменяется от 2.30 до 2.94 эВ, а постоянная решетки – от 5.74 до 6.04 Å. Установлено, что для всех исследованных соотношений элементов в составе твердого раствора энергетически наиболее выгодным является ферромагнитное состояние. Разность энергий между антиферромагнитной и ферромагнитной

конфигурациями изменяется немонотонно, что связано с различной степенью вклада обменных взаимодействий при изменении состава. Полученные результаты указывают на возможность управления электронными и магнитными свойствами путем изменения состава твердого раствора, что делает данный класс материалов перспективным для применения в спинтронике и магнитооптических устройствах.

Ключевые слова: двумерный магнетизм, твердые растворы, теория функционала плотности, плотность электронных состояний, ферромагнетизм, антиферромагнетизм.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-23-20239).

Автор для переписки: Кудрявцев Андрей Владимирович, kudryavcev_a@mirea.ru

Введение

С открытия дальнего ферромагнитного (ФМ) порядка в монослойных соединениях CrI_3 и $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ началось стремительное исследование двумерных магнитных материалов. Интерес исследователей к материалам данного класса вызван перспективами их применения в устройствах микро- и нанoeлектроники, в том числе в спинтронике [1, 2]. Ключевой особенностью таких материалов является возможность настройки их физических параметров различными методами, что открывает возможности для точного управления магнитными свойствами. В частности, к таким методам относятся деформационная инженерия, легирование и молекулярное осаждение [3-5]. По мере исследования двумерных магнетиков ФМ порядок был обнаружен в двумерных металлических соединениях Fe_xGeTe_2 ($x = 3, 4, 5$) и Fe_3GaTe_2 . В свою очередь, в серии монослойных материалов был обнаружен антиферромагнитный (АФМ) порядок, например, в соединениях типа MPS_3 ($M = \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Ni}$) [6-10]. Кроме того, наряду с хорошо изученным CrI_3 [1,2,11] активно исследуются другие двумерные магнетики аналогичной структуры, представляющие собой соединение металла

с галогеном. Так, например, в работе [12] производился расчет двумерного CeI_3 , сочетающего люминесцентные и магнитные свойства. Также интересным материалом в данном контексте является CrCl_3 являющийся антиферромагнетиком в объемной фазе, но обладающий ФМ упорядочением при уменьшении толщины до монослоя [13].

Одним из эффективных методов управления характеристиками твердых растворов является легирование. Данный метод оказался особенно эффективным в случае дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ). Так, варьирование концентрации примесей позволило в том числе осуществить переход из немагнитного в ФМ упорядочение [14, 15]. Свое применение этот метод нашел и в двумерных ван-дер-ваальсовых магнитах. Например, изменение дольного коэффициента x в твердом растворе $\text{CrCl}_{3-x}\text{Br}_x$ приводит к перераспределению спинов в структуре и изменению осей легкого намагничивания, что сопровождается переходом от ХУ-анизотропии в CrCl_3 к анизотропии типа Изинга в CrBr_3 [16]. В свою очередь, в соединениях $\text{CrSBr}_{1-x}\text{Cl}_x$ ($x = 0 - 0.67$) добавление атомов Cl значительно влияет на параметры решетки и магнитные взаимодействия и приводит к снижению магнитной анизотропии и уменьшению температуры Нееля (T_N). Этот процесс сопровождается фазовым переходом от межслоевого АФМ упорядочения, характерного для чистого CrSBr , к ФМ в чистом CrSCl [17].

В данной работе рассматривается изменение физических свойств, в частности, типа магнитного упорядочения в монослойных твердых растворах $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ в зависимости от степени легирования атомами Cl (изменения дольного коэффициента x). Параметры материала рассчитаны на основе метода теории функционала плотности (ТФП). А также обсуждаются возможности дальнейшего использования полученных результатов.

1. Методика расчета

В качестве основного программного пакета для расчета монослоев твердых растворов $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ был использован VASP (Vienna ab-initio Simulation Package), позволяющий реализовать теорию функционала плотности с учетом поляризации по спину. Энергия обрезания плоских волн для такого соединения была выбрана равной 420 эВ. Релаксация параметров ячейки проводилась в рамках GGA-приближения (Generalized gradient approximation – обобщенное градиентное приближение) с использованием обменно-корреляционного функционала типа PBE (Perdew – Burke – Ernzerhod) [18]. Ионная релаксация системы проводилась до значений энергии 10^{-5} эВ/атом. Электронная релаксация через самосогласование уравнений Кона-Шэма проводилась до значений энергии 10^{-6} эВ/атом. Для исключения взаимодействия между слоями в рамках трехмерных граничных условий выбранного пакета моделирования было введено псевдовакуумное пространство толщиной 21 Å.

Для расчета монослойного $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ была сгенерирована суперъячейка размером 2×2 . Интегрирование по первой зоне Бриллюэна было реализовано с использованием Γ -центрированной сетки k-точек размером $21 \times 21 \times 1$ в рамках метода тетраэдра с поправкой Блоха. Для моделирования изменения степени легирования (варьирования концентраций Cl и F) использовалось приближение виртуального кристалла (VCA – Virtual crystal approximation) [19]. Суть данного приближения заключается в расчете кристалла, сохраняющего исходную периодичность, но состоящего из «виртуальных» атомов, чьи свойства представляют собой интерполяцию свойств атомов в составе соединений. Для расчета электронной структуры исследуемого соединения, в частности, плотностей электронных состояний (ПЭС) был реализован метод DFT+U, предложенный в работе [20]. Метод DFT+U включает в себя учет кулоновского взаимодействия локализованных d- и f-электронов с помощью поправки Хаббарда (U), что позволяет корректно описывать магнитные структуры, в том числе и структуры на основе Cr. Так, для монослойного $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ значение U

было принято равным 2.63 эВ в соответствии со значением, полученным с помощью линейного отклика для двумерного CrCl_3 [21].

2. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлена суперъячейка 2×2 монослойного $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$. Атомы хрома обозначены синим цветом, атомы хлора или фтора – зеленым. Суперъячейка 2×2 содержит 8 атомов Cr и в сумме 24 атома Cl и F. Атомы Cr, окруженные атомами Cl и/или F, образуют двумерную гексагональную решетку с параметрами $a = b = 6.09 \text{ \AA}$ для случая CrCl_3 ($x = 1$) и $a = b = 5.73 \text{ \AA}$ для случая CrF_3 ($x = 0$).

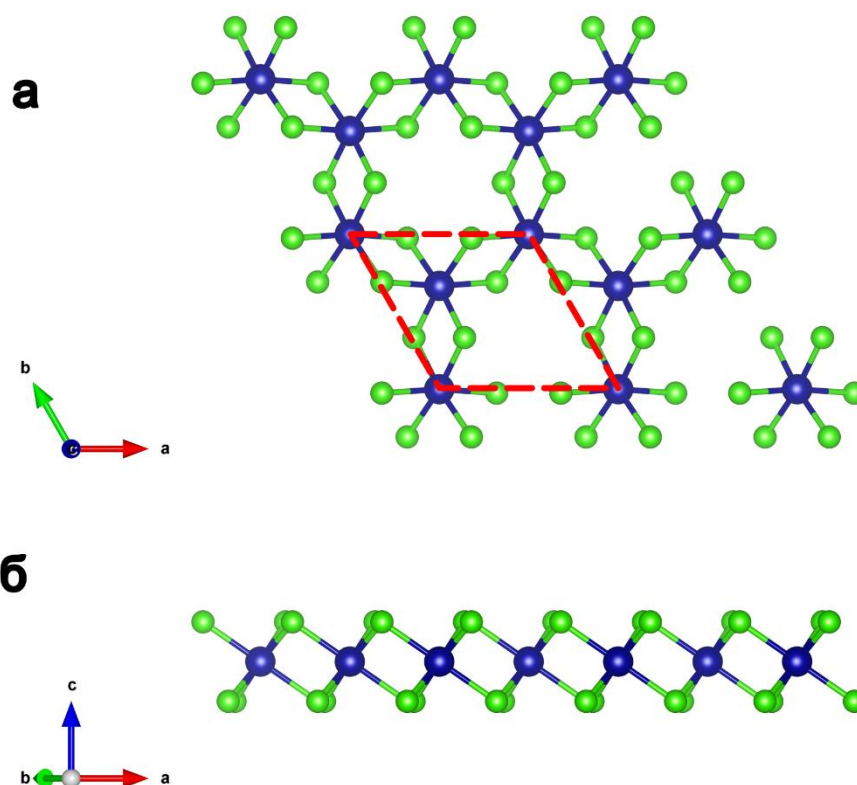


Рис. 1. Монослой $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$: вид сверху (а), вид сбоку (б); атомы хрома обозначены синим, хлора и фтора – зеленым. Элементарная ячейка отмечена красной пунктирной линией.

На рис. 2 – 5 представлены полученные в рамках теории функционала плотности зависимости парциальных и полной плотностей электронных состояний от энергии для ФМ-конфигурации. Парциальные ПЭС приведены для d -оболочек атомов Cr (рис. 2) и p -оболочек атомов Cl (рис. 3) и F (рис. 4).

На каждом из графиков представлены зависимости для значений $x = 0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 для двух проекций спина на ось квантования («спин вверх» и «спин вниз»).

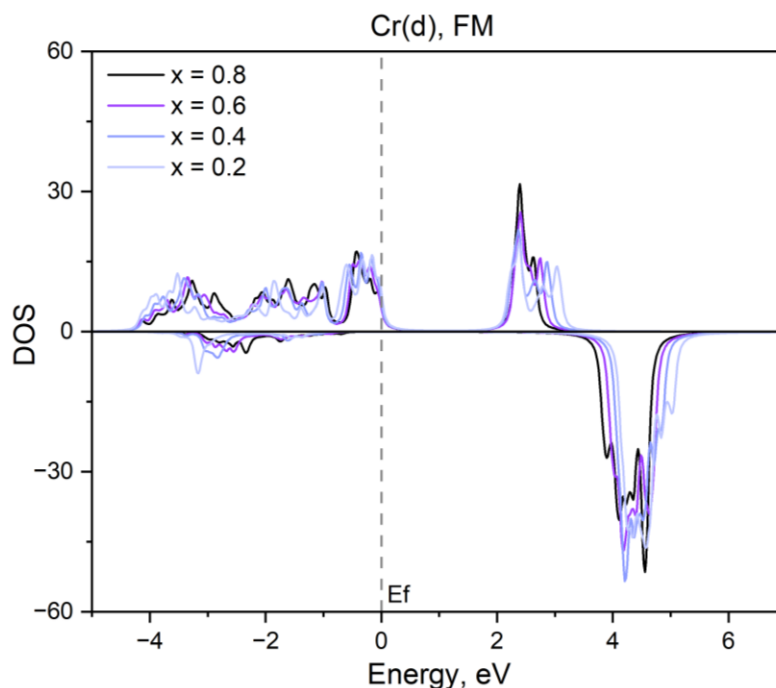


Рис. 2. Парциальная плотность электронных состояний для d -состояний хрома в ФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

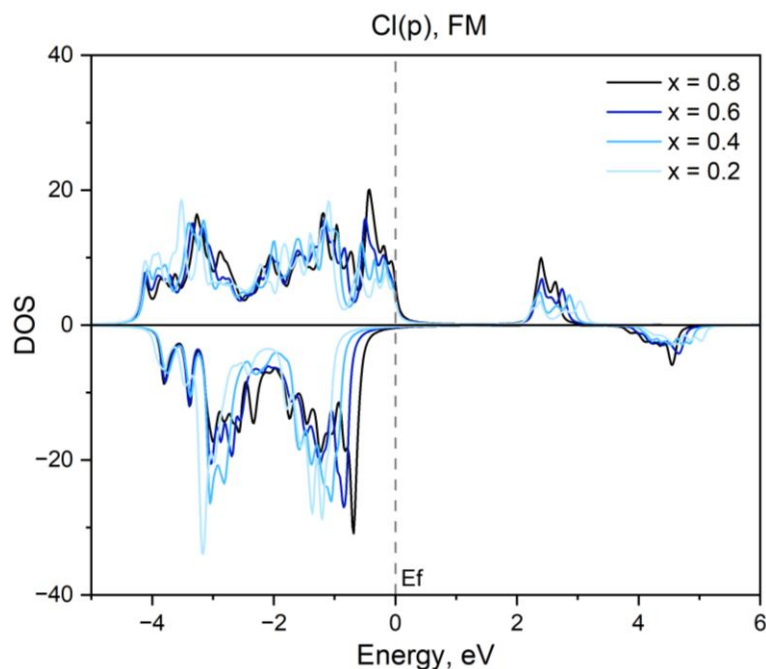


Рис. 3. Парциальная плотность электронных состояний для p -состояний хлора в ФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

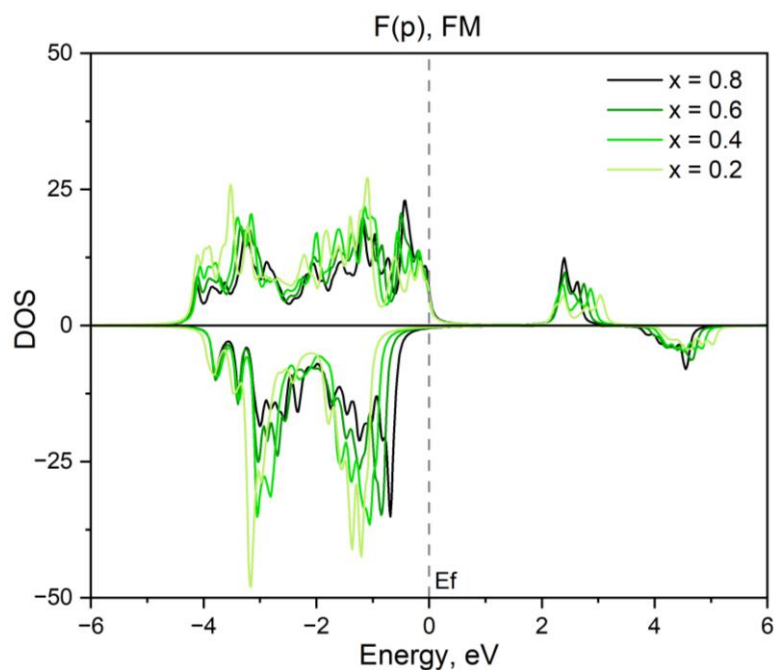


Рис. 4. Парциальная плотность электронных состояний для p -состояний фтора в ФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

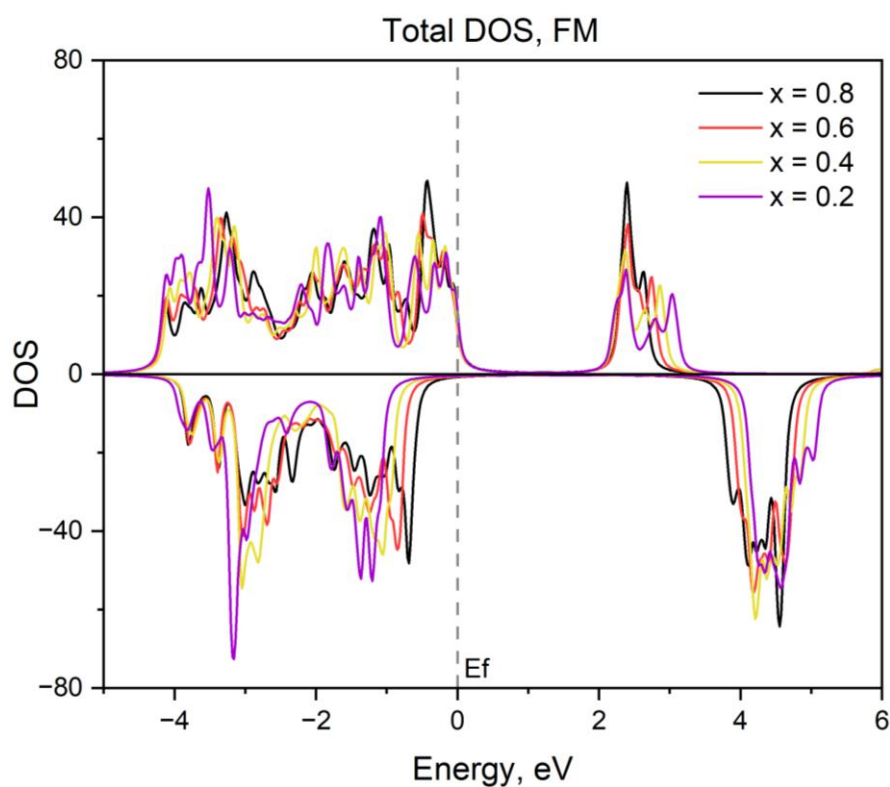


Рис. 5. Полная плотность электронных состояний в ФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

Представленные зависимости ПЭС имеют характерный для ФМ упорядочения антисимметричный вид. За магнетизм в структуре отвечают электроны не полностью заполненных внешних оболочек. Так, наибольший относительный вклад в магнетизм в данном соединении вносят d -электроны хрома, что согласуется с его магнитной природой. В диапазоне энергий от 0 до 2.4 эВ наблюдается характерная для полупроводников запрещенная зона, что соответствует экспериментальным данным для чистых монослоев CrCl_3 ($x = 1$) CrF_3 ($x = 0$) [22,23]. С уменьшением x можно наблюдать небольшие сдвиги парциальных и полной ПЭС относительно E_F ($E = 0$) и размытие участка на 2 – 3 эВ, что влечет за собой уменьшение ширины запрещенной зоны (E_g) в монослое.

На рис. 6 – 9 представлены аналогичные зависимости парциальных и полной плотностей электронных состояний от энергии для АФМ конфигурации.

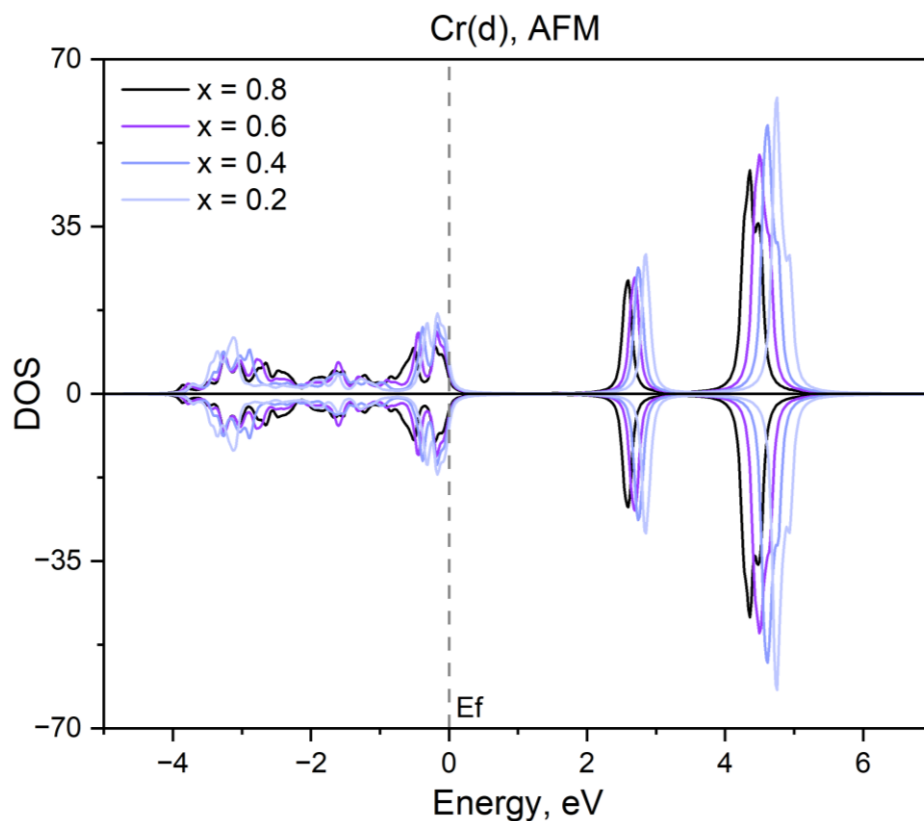


Рис. 6. Парциальная плотность электронных состояний для d -состояний хрома в АФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

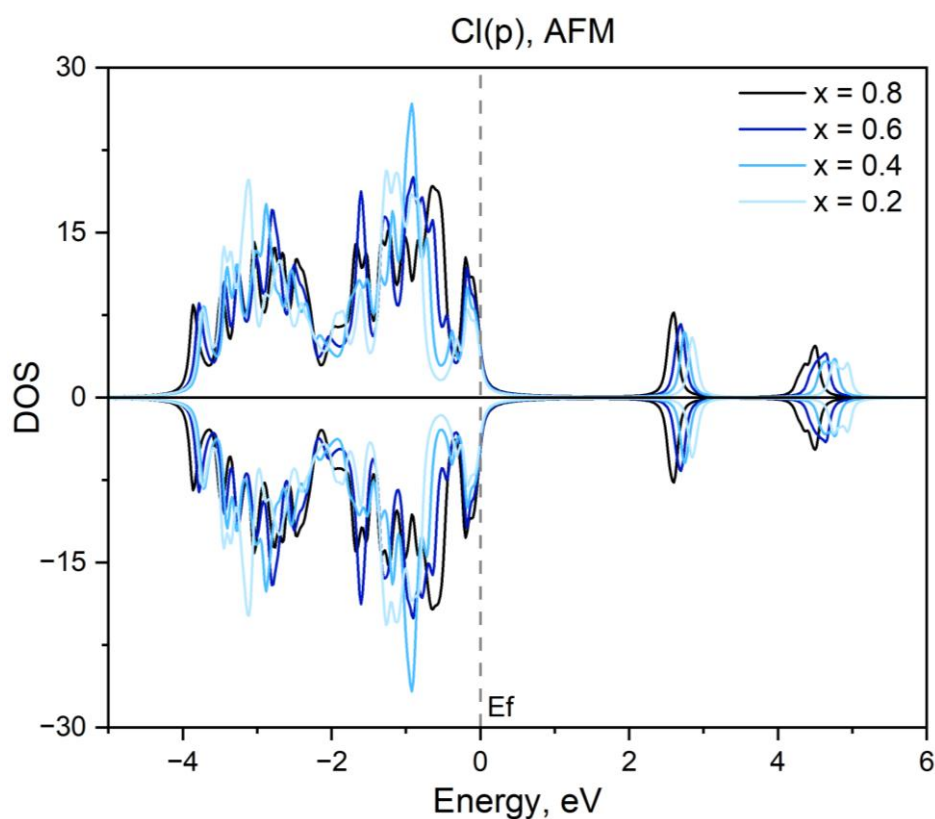


Рис. 7. Парциальная плотность электронных состояний для p -состояний хлора в АФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

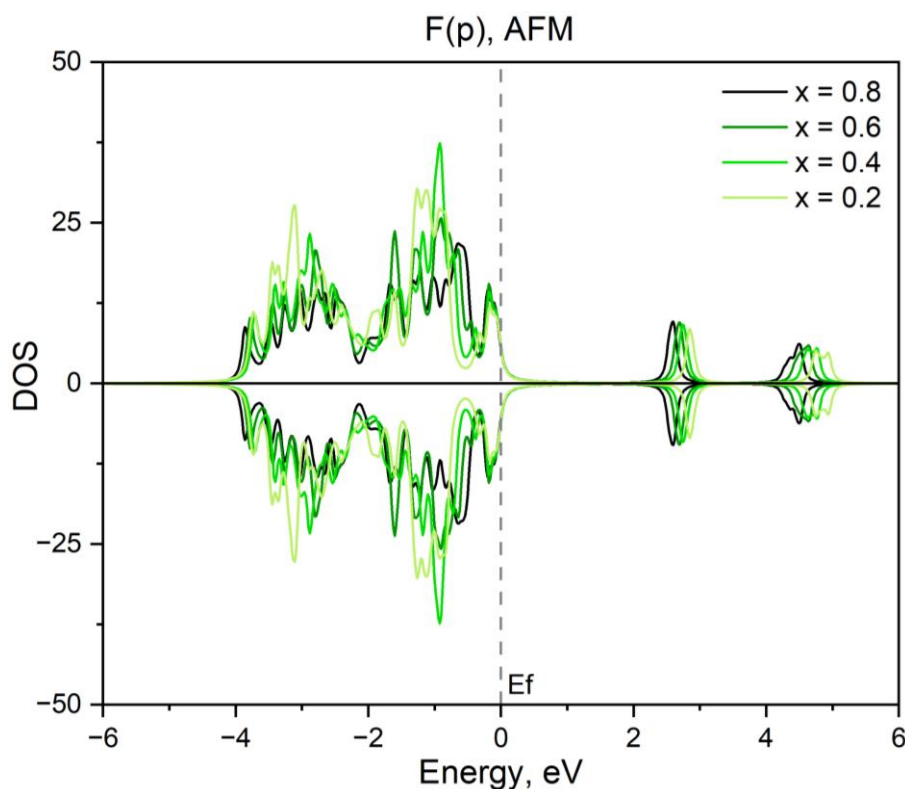


Рис. 8. Парциальная плотность электронных состояний для p -состояний фтора в АФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

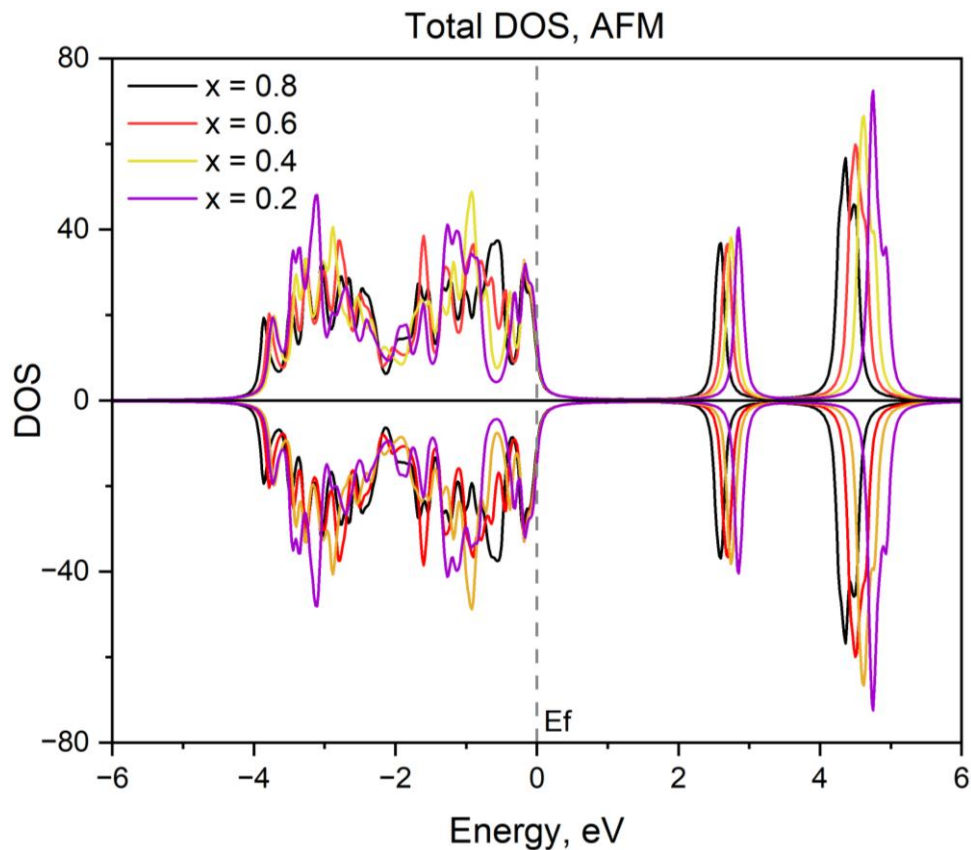


Рис. 9. Полная плотность электронных состояний в ФМ конфигурации монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ для значений дольного коэффициента x , равных 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

В случае АФМ конфигурации d -орбитали хрома вносят еще больший вклад в магнетизм в структуре относительно p -орбиталей хлора и фтора. Однако с уменьшением x сдвиг ПЭС относительно E_F и сужение пика, соответствующего энергиям 2 – 3 эВ, в отличие от случая ФМ конфигурации влечет увеличение E_g .

Для более подробного анализа изменения ширины запрещенной зоны были построены зависимости $E_g(x)$ как для ФМ, так и для АФМ конфигураций. Данные зависимости представлены на рис. 10.

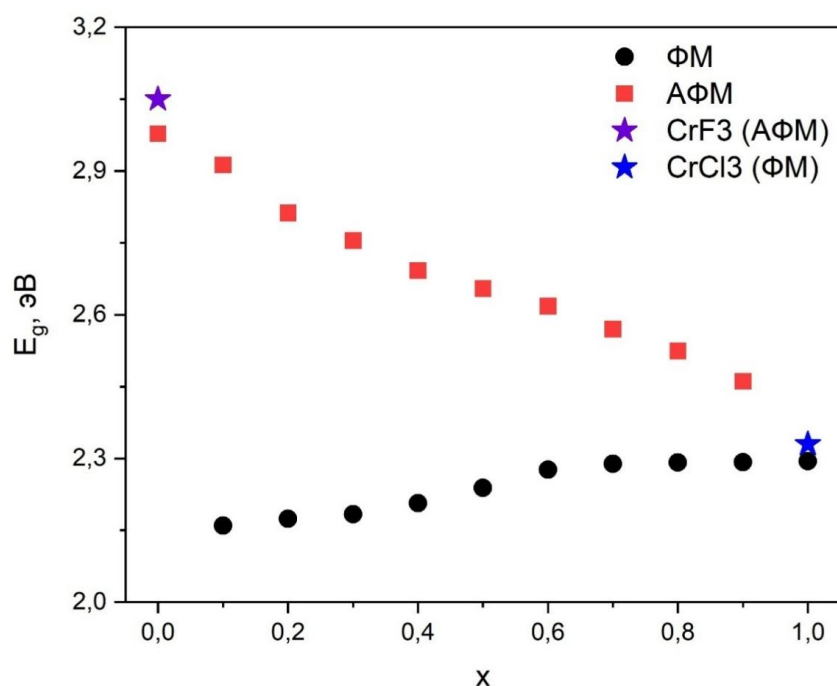


Рис. 10. Расчетные зависимости ширины запрещенной зоны монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ от дольного коэффициента x : красные квадраты – АФМ конфигурация, черные точки – ФМ конфигурация. Звездобразными символами.

На рис. 10 черными кружками обозначены значения E_g для ФМ конфигурации, красными квадратами – для АФМ конфигурации. Звездобразными символами обозначены экспериментально измеренные значения E_g для чистых монослоев CrCl_3 и CrF_3 [22,23]. В Таблице 1 приведено сравнение данных экспериментальных значений со значениями E_g , рассчитанными в работе. Как можно видеть, данные значения хорошо согласуются между собой. Различие между расчетными и экспериментальными значениями составляет не более 4 процентов.

Таблица 1. Значения ширины запрещенной зоны E_g для монослоев CrCl_3 и CrF_3 : $E_{g_{calc}}$ – расчетные значения, $E_{g_{exp}}$ – экспериментальные значения из литературных данных.

	$E_{g_{calc}}$, эВ	$E_{g_{exp}}$, эВ
CrCl_3 (ФМ)	2.30 эВ	2.33 эВ [22]
CrF_3 (АФМ)	2.94 эВ	3.05 эВ [23]

Для каждой из конфигураций зависимость $E_g(x)$ является монотонной, при этом для ФМ конфигурации зависимость является возрастающей, а для АФМ конфигурации – убывающей. Монотонный характер зависимости согласуется с законом Вегарда – эмпирическим правилом о линейной зависимости ширины запрещенной зоны и постоянной решетки от дольного коэффициента x для трехкомпонентного твердого раствора. Для $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ правило Вегарда для E_g можно описать с помощью соотношения

$$E_g\left(\text{Cr}\left(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x}\right)_3\right) = xE_g\left(\text{CrCl}_3\right) + (1-x)E_g\left(\text{CrF}_3\right) - bx(1-x), \quad (1)$$

где b – параметр нелинейности, зависящий от разницы периодов кристаллических решеток чистых соединений (CrCl_3 и CrF_3).

На рис. 11 представлена зависимость постоянной решетки a от коэффициента x для каждой из двух конфигураций. Обе зависимости являются монотонно возрастающими, что также соответствует правилу Вегарда для трехкомпонентных растворов. Рассчитанные значения постоянной решетки для чистых растворов согласуются с экспериментальными данными [23,24]. Обе зависимости являются почти идентичными, что отражает ожидаемо слабое влияние магнетизма на кристаллическую структуру монослоев.

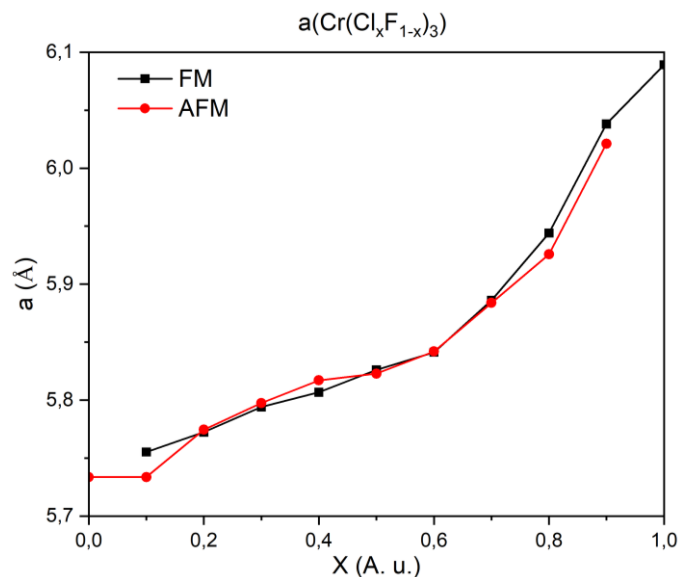


Рис. 11. Расчетные зависимости постоянной решетки монослоя $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ от коэффициента x : красная линия – АФМ конфигурация, черная линия – ФМ конфигурация.

Для определения типа магнитного упорядочения, соответствующего основному состоянию для различных значений x , для каждой из двух конфигураций были рассчитаны полные энергии системы. Расчеты проводились для значений x с шагом 0.1 в диапазоне от 0 до 1. Для каждого из этих значений x была рассчитана разность полных энергий ΔE в соответствии с выражением

$$\Delta E = E_t(AF\bar{M}) - E_t(FM), \quad (2)$$

где $E_t(AF\bar{M})$ – полная энергия для АФМ упорядочения, $E_t(FM)$ – полная энергия для ФМ упорядочения. Поскольку основному состоянию системы соответствует состояние с минимальной энергией, то для системы с АФМ основным состоянием значение ΔE отрицательно, а для системы, у которой основным состоянием является состояние с ФМ порядком, значение ΔE положительно. На рис. 12 представлена расчетная зависимость $\Delta E(x)$.

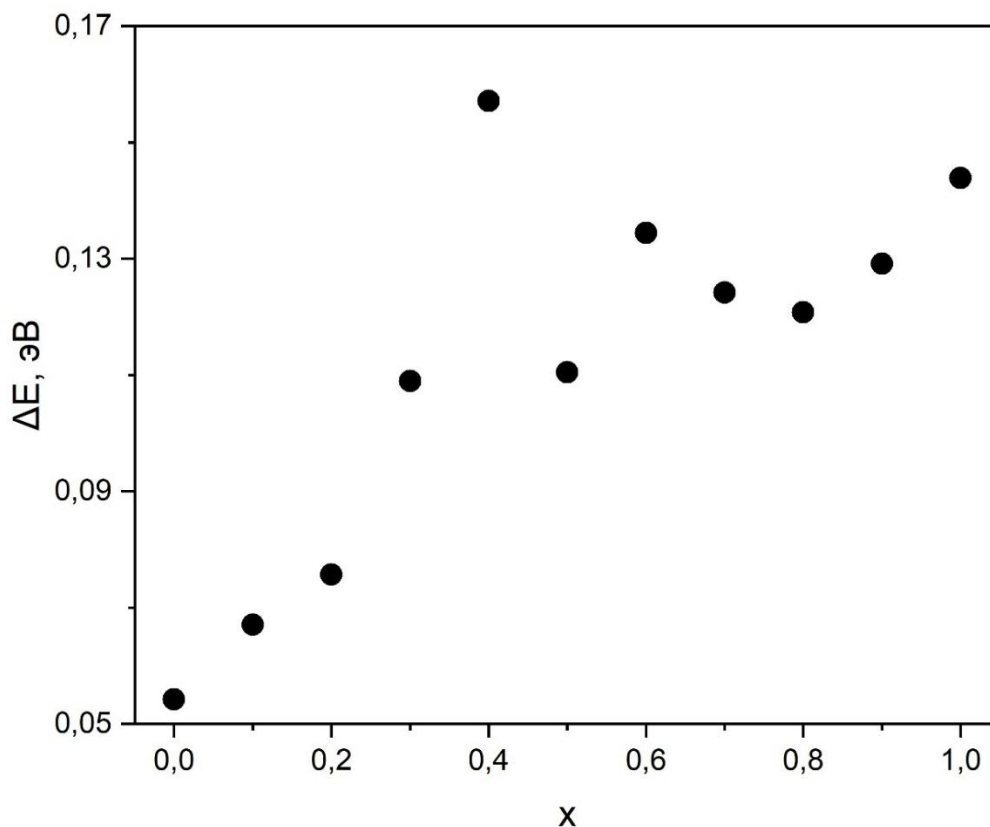


Рис. 12 – Зависимость разницы полных энергий ΔE АФМ- и ФМ-конфигураций $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ от дольного коэффициента x .

Как можно видеть на рис. 12, во всем диапазоне x значения ΔE положительны, то есть в соответствии с представленным расчетом во всем диапазоне значений x исследуемые твердые растворы ферромагнитны. Такое поведение может быть обусловлено наличием ФМ-фазы в двумерном CrF_3 , продемонстрированное в работе [24]. Немонотонность данной зависимости обусловлена изменением вкладов различных типов взаимодействия при изменении x . При этом рассчитанные и экспериментальные значения постоянной решетки в зависимости от соотношения концентраций атомов хлора и фтора в соединении сходятся в пределах погрешности, что говорит о корректности представленного расчета.

Заключение

На основании расчетов из первых принципов в ходе данной работы было исследовано влияние легирования на электронную структуру, магнитные свойства и параметры решетки монослойного соединения $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$. Исследованный материал, как и ожидалось, является полупроводником с величиной ширины запрещенной зоны от 2.30 до 2.94 эВ и постоянной кристаллической решетки от 5.74 Å до 6.04 Å для разных значений x . Зависимости ширины запрещенной зоны и параметров решетки от дольного коэффициента твердого раствора согласуются с теоретической моделью Вегарда: наблюдается монотонная зависимость, характер которой определяется типом магнитного упорядочения. Кроме того, рассчитанные значения параметров для чистых соединений находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Для всех рассмотренных значений дольного коэффициента основной является ферромагнитная конфигурация. Полученный результат указывает на отсутствие точки перехода между различными типами магнитного упорядочения. Подобное поведение может быть связано с существованием ферромагнитной фазы в двумерном CrF_3 ($x = 0$), что подтверждается результатами предыдущих экспериментальных исследований.

Зависимость разности полных энергий антиферромагнитной и ферромагнитной конфигурации для соответствующих значений дольного коэффициента носит немонотонный характер, что связано с переменным вкладом различных видов взаимодействия с изменением дольного коэффициента.

Полученные результаты могут быть применены для конструирования и оптимизации приборов спинтроники: возможность гибкой настройки значений ширины запрещенной зоны и параметров решетки позволяет использовать данный трехкомпонентный раствор в гетероструктурах для магнитных туннельных переходов, спиновых транзисторов и др. Также, величина ширины запрещенной зоны, характерная для широкозонных полупроводников, в сочетании с собственным магнетизмом материала делает его перспективным для использования в магнитооптических устройствах.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-23-20239).

Литература

1. Huang B. et al. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit // Nature. – 2017. – Т. 546. – № 7657. – С. 270–273. <https://doi.org/10.1038/nature22391>
2. Gong C. et al. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals // Nature. – 2017. – Т. 546. – № 7657. – С. 265–269. <https://doi.org/10.1038/nature22060>
3. Ruiz A.M., Baldovi J.J. Switchable magnetic phases in $\text{CrSBr}_{1-x}\text{Cl}_x$ and CrSBr/CrSCl heterostructures // Arxiv Mat. Sci. – 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2412.19136>

4. Qi Y. et al. Recent progress in strain engineering on van der Waals 2D materials: tunable electrical, electrochemical, magnetic, and optical properties // *Adv. Mater.* – 2023. – T. 35. <https://doi.org/10.1002/adma.202205714>
5. Pawbake A. et al. Magneto-optical sensing of the pressure-driven magnetic ground states in bulk CrSBr // *Nano Lett.* – 2023. – T. 23. – C. 9587–9593. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c03216>
6. Zhang G. et al. Above-room-temperature strong intrinsic ferromagnetism in 2D van der Waals Fe₃GaTe₂ with large perpendicular magnetic anisotropy // *Nat. Commun.* – 2022. – T. 13. – C. 5067. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-32605-5>
7. May A.F. et al. Ferromagnetism near room temperature in the cleavable van der Waals crystal Fe₃GeTe₂ // *ACS Nano.* – 2019. – T. 13. – C. 4436–4442. <https://doi.org/10.1021/acsnano.8b09660>
8. Lee J.-U. et al. Ising-type magnetic ordering in atomically thin FePS₃ // *Nano Lett.* – 2016. – T. 16. – C. 7433–7438. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b03052>
9. Long G. et al. Persistence of magnetism in atomically thin MnPS₃ crystals // *Nano Lett.* – 2020. – T. 20. – C. 2452–2459. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b05165>
10. Kim K. et al. Suppression of magnetic ordering in XXZ-type antiferromagnetic monolayer NiPS₃ // *Nat. Commun.* – 2019. – T. 10. – C. 345. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-08284-6>
11. Lado J.L., Fernández-Rossier J. On the origin of magnetic anisotropy in two dimensional CrI₃ // *2D Materials.* – 2017. – T. 4. – №. 3. – C. 035002. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/aa75ed>
12. Мирзоева Е.Т., Кудрявцев А.В. Первопринципный расчет электронной структуры монослоя CeI₃ // *Russian Technological Journal.* – 2025. – T. 13. – №. 4. – C. 47-54. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-4-47-54>
13. Bedoya-Pinto A. et al. Intrinsic 2D-XY ferromagnetism in a van der Waals monolayer // *Nat. Phys.* – 2021. – T. 17. – №. 6. – C. 687–691. <https://doi.org/10.1126/science.abd5146>

14. Xie L.M. Two-dimensional transition metal dichalcogenide alloys: preparation, characterization and applications // *Nanoscale*. – 2015. – Т. 7. – С. 18392–18401. <https://doi.org/10.1039/c5nr05712d>
15. Lin Y., Torsi R., Geohegan D.B., Robinson J.A., Xiao K. Controllable thin-film approaches for doping and alloying transition metal dichalcogenides monolayers // *Adv. Sci.* – 2021. – Т. 8. <https://doi.org/10.1002/advs.202004249>
16. Abramchuk M. et al. Controlling magnetic and optical properties of the van der Waals crystal $\text{CrCl}_{3-x}\text{Br}_x$ via mixed halide chemistry // *Adv. Mater.* – 2018. – Т. 30. <https://doi.org/10.1002/adma.201801325>
17. Telford E.J. et al. Designing magnetic properties in CrSBr through hydrostatic pressure and ligand substitution // *Adv. Phys. Res.* – 2023. – Т. 2. <https://doi.org/10.1002/apxr.202300036>
18. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Т. 77. – С. 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
19. Eckhardt C., Hummer K., Kresse G. Indirect-to-direct gap transition in strained and unstrained $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys // *Phys. Rev.B.* – 2014. – Т. 89. – № 165201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.165201>
20. Dudarev S.L., Botton G.A., Savrasov S.Y., Humphreys C.J., Sutton A.P. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: an LSDA+U study // *Phys. Rev.B.* – 1998. – Т. 57. – № 3. – С. 1505–1509. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.1505>
21. Liu J., Sun Q., Kawazoe Y., Jena P. Exfoliating biocompatible ferromagnetic Cr trihalide monolayers // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2016. – Т. 18. – С. 8777–8784. <https://doi.org/10.1039/c5cp04835d>
22. Froeschke S. et al. Structural and magnetic transitions caused by dimer formation in the $\text{CrCl}_3\text{--MoCl}_3$ solid solution // *Chem. Mater.* – 2024. – Т. 36. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c03109>

23. Chen X. et al. Discovery of an ultrastable antiferromagnetic two-dimensional CrF_3 phase with anisotropic quasi-one-dimensional mechanical, electronic, and thermal properties // Phys. Rev.B. – 2025. – Т. 111. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.155425>
24. Zhang W.B. et al. Robust intrinsic ferromagnetism and half semiconductivity in stable two-dimensional single-layer chromium trihalides // J. Mater. Chem.C. – 2015. – Т. 3. – С. 12457–12468. <https://doi.org/10.1039/C5TC02840J>

Для цитирования:

Лебедев И.С., Кудрявцев А.В., Карцев А.И., Мирзоева Е.Т. Электронные и магнитные свойства двухкомпонентных твердых растворов $\text{Cr}(\text{Cl}_x\text{F}_{1-x})_3$ // Журнал радиоэлектроники. – 2025. – №. 11. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.11.28>