

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ИНТЕРФЕЙСОВ LSMO С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ РАЗЛИЧНОЙ ХИРАЛЬНОСТИ**Е. А. Ковалева<sup>1,2\*</sup>, А. А. Кузубов<sup>1,2</sup>, А. В. Куклин<sup>1,2</sup>, Ю. Г. Михалев<sup>1</sup>, З. И. Попов<sup>2,3</sup><sup>1</sup> Сибирский федеральный университет

Российская Федерация, 660041, г. Красноярск, просп. Свободный, 79

<sup>2</sup> Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Российская Федерация, 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50–38

<sup>3</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева

Российская Федерация, 660037, г. Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31

\*E-mail: kovaleva.evgeniya1991@mail.ru

Замещенные манганиты лантана с общей формулой  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  (LSMO) являются перспективными материалами спинтроники и спинкалоритроники, что обусловлено практически стопроцентной спиновой поляризацией данных материалов. На основе интерфейсов LSMO-графен были созданы высокоэффективные органические светодиоды (OLED) и спиновые клапаны. Многостенные углеродные нанотрубки, соединяющие электроды на основе  $La_{0,7}Sr_{0,3}MnO_3$ , являющегося полуметаллом, демонстрируют высокое магнитное сопротивление, большое время жизни ориентированного спина, высокую скорость Ферми. Полученные экспериментальные результаты подтверждаются также данными квантово-химических расчетов. Тем не менее интерфейсы замещенных манганитов лантана с углеродными нанотрубками в настоящее время изучены недостаточно. В ходе квантово-химического исследования взаимодействия углеродных нанотрубок различной хиральности с поверхностью замещенного манганита лантана  $La_{0,67}Sr_{0,33}MnO_3$  при помощи теории функционала плотности в обобщенно-градиентном приближении с использованием поправки Хаббарда и коррекции вандерваальсова взаимодействия рассмотрены различные варианты расположения нанотрубок относительно атомов пластины. Рассмотрены нанотрубки как конфигурации «зигзаг» (хиральности (9,0)), так и конфигурации «кресло» (хиральности (5,5)). Построены парциальные плотности состояний атомов нанотрубок, исследовано влияние подложки на электронную структуру нанотрубок, а также возможность применения исследуемых нанокomпозитов в устройствах спинтроники. Показано, что при взаимодействии углеродных нанотрубок с поверхностью LSMO (001) вследствие несовпадения структурных параметров наблюдается деформация нанотрубок по сравнению с исходной структурой. Нанотрубка хиральности (9,0) после взаимодействия с пластиной оказывается сжатой примерно на 9 %, в то время как нанотрубка хиральности (5,5) растягивается примерно на 5 %. Установлено, что указанная деформация приводит к значительному изменению электронной структуры нанотрубок и смещению уровня Ферми. Однако несмотря на то, что композиты в целом оказываются практически полностью спин-поляризованными, данный эффект обусловлен присутствием LSMO в составе системы, в то время как различия в заселенности разных спиновых подсистем для нанотрубок практически отсутствуют.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, спиновая поляризация, спинтроника, LSMO, GGA+U.

Vestnik SibGAU  
Vol. 16, No. 3, P. 729–734**ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURE OF CNT/LSMO-BASED NANOCOMPOSITES: A DFT STUDY**Е. А. Kovaleva<sup>1,2\*</sup>, А. А. Kuzubov<sup>1,2</sup>, А. В. Kuklin<sup>1,2</sup>, Yu. G. Mikhalev<sup>1</sup>, Z. I. Popov<sup>2,3</sup><sup>1</sup> Siberian Federal University

79, Svobodny Av., Krasnoyarsk, 660041, Russian Federation

<sup>2</sup> Kirensky Institute of Physics SB RAS

50–38, Akademgorodok, Krasnoyarsk, 660036, Russian Federation

<sup>3</sup> Reshetnev Siberian State Aerospace University

31, Krasnoyarsky Rabochy Av., Krasnoyarsk, 660037, Russian Federation

\*E-mail: kovaleva.evgeniya1991@mail.ru

*Complex half-metallic manganites  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  (LSMO) are promising materials for spintronic and spicaloritronic applications due to 100 % of spin polarization. Using spin-polarized currents through LSMO-graphene interfaces a number of LSMO-based high-efficiency organic LED and spin-valve nanodevices have been developed. Large magnetoresistance effects bonded with large output signals were detected in a nanodevice. The device of multiwall carbon nanotube that spans a gap between spin-polarized half-metallic  $La_{0,7}Sr_{0,3}MnO_3$  electrodes demonstrated long spin lifetime and high Fermi velocity in the nanotube, the high spin polarization of the manganite electrodes and the resistance of the interfacial barrier for spin injection. The experimental results were supported by density functional theory calculations. Interfaces of  $La_{0,67}Sr_{0,33}MnO_3$  with armchair and zigzag carbon nanotubes (CNT) were studied by means of quantum chemistry within density functional theory. All calculations were performed using generalized gradient approximation with Hubbard correction (GGA+U) and Grimme correction of dispersion interaction. Different configurations of composite compartments mutual arrangement were considered. The analysis of partial densities of states (PDOS) reveals the influence of substrate on nanotube's electronic structure. The possibility of nanotubes' spin polarization and utilization of such nanocomposites in spintronics is also discussed. It was found that interaction between carbon nanotubes and LSMO slab lead to major deformation of the tube due to the difference in structural parameters of composite compartments. Zigzag (9,0) nanotube is contracted by 9% while armchair (5,5) nanotube is stretched by 5%. Although this deformation results in significant change in nanotube's electronic structure, there is no visible difference between spin-up and spin-down PDOSes of the tubes. Composites are then almost totally spin-polarized due to the presence of LSMO.*

*Keywords: carbon nanotubes, spin polarization, spintronics, LSMO, GGA+U.*

**Введение.** Дальнейший прогресс в области применения графена и композитов на его основе в качестве устройств спинтроники и спинкалоритроники связан в первую очередь с использованием высокой подвижности электронов наряду со спиновым транспортом вдоль гексагональной решетки графена, что может быть достигнуто за счет слабых спин-орбитальных взаимодействий атомов углерода [1–3]. Экспериментально была показана возможность инжекции электронов с определенной ориентацией спина из ферромагнитной подложки (например, поверхность Ni (111)) в графен [4]. Кроме того, высокое магнитное сопротивление наблюдается в расположенных на подобных подложках органических фрагментах, имеющих  $\pi$ -сопряженную структуру [5–9]. Расположенный между слоем графена и подложкой ферромагнитного металла планарный монослой гексагонального нитрида бора (h-BN) обеспечивает химическую пассивацию поверхности и облегчает инжекцию спина в графен [10; 11].

Открытие спинового эффекта Зеебека [12] в ферромагнитных материалах позволяет управлять электрическим и спиновым током при помощи градиента температуры, что в свою очередь может быть использовано в спинкалоритронике. Спиновое туннелирование [13] через границу раздела «ферромагнетик–полупроводник» позволяет достигать высокой степени спиновой поляризации полупроводника и протекающего спинового тока в системе.

Замещенные манганиты лантана с общей формулой  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  (LSMO) являются перспективными материалами спинтроники и спинкалоритроники, что обусловлено практически стопроцентной спиновой поляризацией данных материалов. Кроме того, они обладают такими важными свойствами, как высокая температура Кюри ( $T_c = 370$  К), низкая плотность носителей заряда ( $1021\text{--}1022$  см<sup>-3</sup>), колоссальное магнитное сопротивление, высокая эффективность спиновой инжекции [14–16]. На основе интерфейсов LSMO–графен были созданы высокоэффективные органические светодиоды (OLED) и спиновые клапаны [17; 18]. Многостенные углеродные нанотрубки,

соединяющие электроды на основе  $La_{0,7}Sr_{0,3}MnO_3$ , являющегося полуметаллом, демонстрируют высокое магнитное сопротивление, большое время жизни ориентированного спина, высокую скорость Ферми. В то же время электроды являются сильно спин-поляризованными. Полученные экспериментальные результаты подтверждаются также данными квантово-химических расчетов [19]. Тем не менее следует отметить, что интерфейсы замещенных манганитов лантана с углеродными нанотрубками в настоящее время изучены недостаточно.

Целью настоящей работы являлось квантово-химическое исследование природы взаимодействия одностенных углеродных нанотрубок конфигураций «зигзаг» и «кресло» с поверхностью LSMO (001) и изучение электронной структуры и магнитных свойств указанных композитов.

**Методы и детали расчета.** Расчеты проводились в рамках формализма теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного функционала GGA PBE с поправкой Хаббарда (GGA+U), коррекцией вандерваальсова взаимодействия D3 Grimme в периодических граничных условиях. Параметры  $U = 2$  и  $J = 0,7$  эВ были выбраны на основании более ранних расчетов LSMO [20]. Энергия обрезания плоских волн ( $E_{\text{cutoff}}$ ) во всех расчетах равнялась 450 эВ. Оптимизация геометрии исследованных композитов велась до значения остаточных сил, действующих на атомы, менее 0,01 эВ/Å. Обратное пространство в первой зоне Бриллюэна автоматически разбивалось на сетку по схеме Монхорста–Пака. Все расчеты проводились при помощи программного пакета VASP [21–23].

На начальном этапе работы была смоделирована элементарная ячейка  $La_{0,67}Sr_{0,33}MnO_3$ , имеющая псевдокубическую структуру типа перовскита. Полученное в тестовых расчетах с количеством  $k$ -точек вдоль каждого из направлений  $12 \times 12 \times 12$  значение вектора трансляции (3,886 Å) хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными ( $a = 3,876$  Å [24] и  $a = 3,87$  [25]), а также результатами предыдущих расчетов ( $a = 3,89$  Å [26]).

Пластина LSMO состоит из трех слоев MnO, двух LaO и завершающего верхнего слоя SrO. Каждый атом Mn окружен шестью атомами кислорода, Sr и La имеют по четыре координирующих атома. При этом атомы La и Sr образуют отдельные слои и расположены в центре кубов, образованных MnO. Согласно имеющимся экспериментальным и теоретическим данным, поверхность LSMO в большинстве случаев оканчивается слоем SrO [27], что было учтено при проведении расчета.

С целью обеспечения наилучшего совпадения структурных параметров исследуемых нанотрубок и подложки в расчете были использованы два типа суперячеек LSMO:  $8 \times 1 \times 1$  ( $a = 31,09 \text{ \AA}$ ,  $b = 3,88 \text{ \AA}$ ,  $c = 30,00 \text{ \AA}$ ) в случае CNT (9,0) и  $6 \times 2 \times 1$  ( $a = 23,32 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,77 \text{ \AA}$ ,  $c = 30,00 \text{ \AA}$ ) для расчета интерфейса с CNT (5,5). Во избежание взаимного влияния образцов в соседних ячейках вдоль направления  $c$  был задан вакуумный промежуток  $>10 \text{ \AA}$ . Количество  $k$ -точек вдоль наименьшего периодического направления  $b$  (прямой решетки) составило 6 и 2 для разных суперячеек соответственно; вдоль направлений  $a$  и  $c - 1$ .

Проводящие углеродные нанотрубки хиральности (9,0) были расположены относительно поверхности LSMO (001) следующим образом (рис. 1): а) атом Sr расположен под связью C–C (конфигурация bond, рис. 1, а, таблица); б) атом Sr расположен в центре шестиугольника (конфигурация hexagon-1, рис. 1, б, таблица); в) атомы кислорода расположены в центре шестиугольника и под связью C–C (конфигурация hexagon-2, рис. 1, в, таблица). Следует отметить, что разница между параметрами решетки LSMO и периодом нанотрубки приводит к значительному сжатию последней ( $\sim 9 \%$ ).

Также были рассмотрены близкие к (9,0) по размерам проводящие углеродные нанотрубки хиральности (5,5) (диаметр трубок 7,05 и 6,97  $\text{ \AA}$ , соответственно). Для системы CNT (5,5) / LSMO была рассмотрена конфигурация hexagon-1, которая оказалась наиболее энергетически выгодной в случае CNT (9,0) / LSMO (рис. 2, таблица). В результате несовпадения структурных параметров пластины LSMO и трубки последняя также несколько деформирована (величина растяжения  $\sim 5 \%$ ).

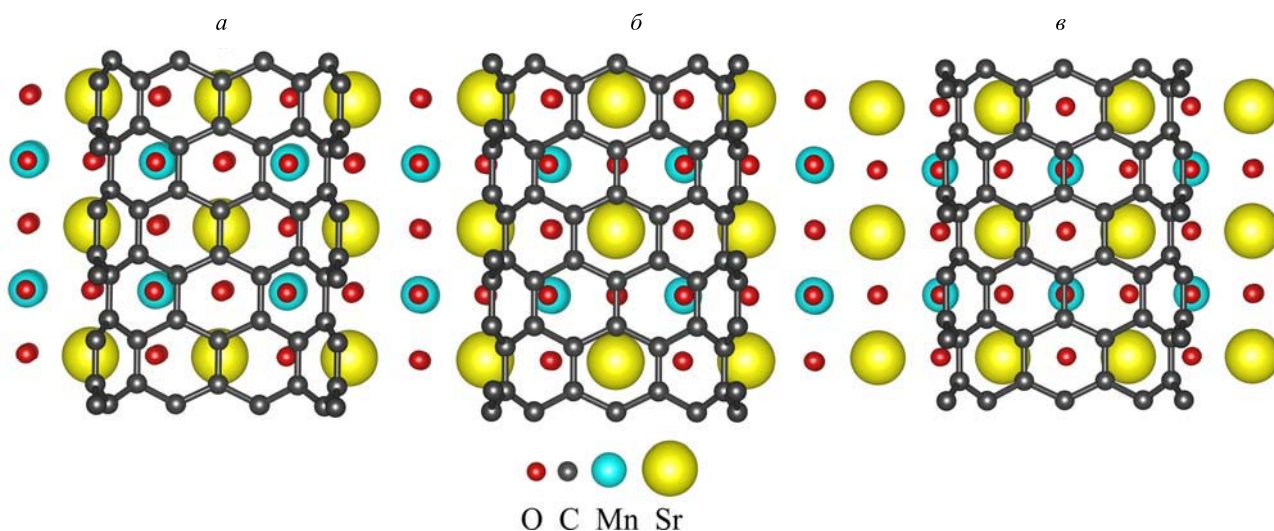


Рис. 1. Варианты расположения углеродной нанотрубки (9,0) на поверхности LSMO: а – bond; б – hexagon-1; в – hexagon-2

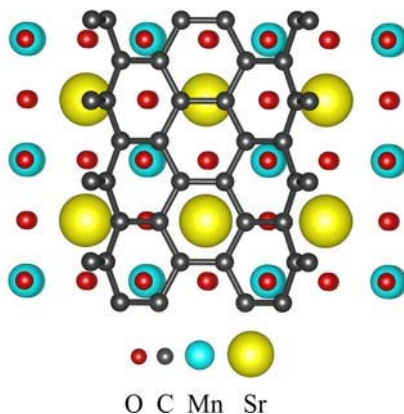


Рис. 2. Расположение углеродной нанотрубки (5,5) на поверхности LSMO

**Обсуждение результатов.** Значения энергии и длины связей свидетельствуют о наличии слабого вандерваальсова взаимодействия между углеродными нанотрубками и пластиной LSMO. Наиболее энергетически выгодной в системе CNT (9,0) / LSMO является конфигурация hexagon-1. Атом стронция в этом случае несколько смещается от центра шестиугольника в процессе оптимизации геометрии (рис. 1, б), что обуславливает меньшую длину связи. Тем не менее конфигурация bond энергетически невыгодна, несмотря на также небольшую длину связи. В системе CNT (5,5) / LSMO подобного смещения не происходит.

Согласно результатам анализа электронной структуры исследуемых композитов (рис. 3), в обоих случаях существенные изменения по сравнению с LSMO отсутствуют. Несмотря на практически полную спиновую поляризацию композитов, характерную также и для пластины LSMO (рис. 3, а), парциальные плотности нанотрубок для разных спиновых подсистем имеют одинаковую интенсивность (рис. 4). Картины пространственного распределения спиновой плотности (рис. 3, б) также свидетельствуют об отсутствии спиновой поляризации нанотрубок.

Следует отметить, однако, что деформация нанотрубок приводит к перераспределению в них элек-

тронной плотности, заселению вакантных зон и изменению уровня Ферми (рис. 4). Схожий эффект наблюдается также и при взаимодействии с пластиной LSMO. В частности, при растяжении нанотрубки хиральности (5,5) отмечается появление запрещенной зоны шириной ~0,2 эВ, в то время как нанотрубка с оптимальным вектором трансляции является проводником (рис. 4, а). Взаимодействие с поверхностью LSMO (001), в свою очередь, приводит к заметному смещению пиков электронной плотности. Тем не менее рассчитанная величина спиновой поляризации нанотрубки (5,5) на уровне Ферми весьма незначительна (~1,7 %). Аналогичные изменения электронной структуры происходят также и при деформации углеродной нанотрубки (9,0): ее сжатие приводит к значительному смещению уровня Ферми, а взаимодействие с пластиной LSMO – к размытию пиков (рис. 4, б). Спиновая поляризация в этом случае не превышает 0,3 %. Таким образом, несмотря на значительное влияние, оказываемое подложкой на электронную структуру расположенных на них углеродных нанотрубок, сколько-нибудь существенной разницы в заселении различных спиновых подсистем в этом случае не наблюдается. Электронная структура пластины LSMO при взаимодействии с углеродными нанотрубками практически не претерпевает изменений.

Энергии и длины связей композитов CNT/LSMO

Composite	CNT(9,0)/LSMO			CNT (5,5) / LSMO
	Hexagon-1	Hexagon-2	Bond	
Энергия связи, эВ	-0,5663	-0,3468	1,0213	-2,0710
Длина связи, Å	2,830	3,023	2,898	3,123

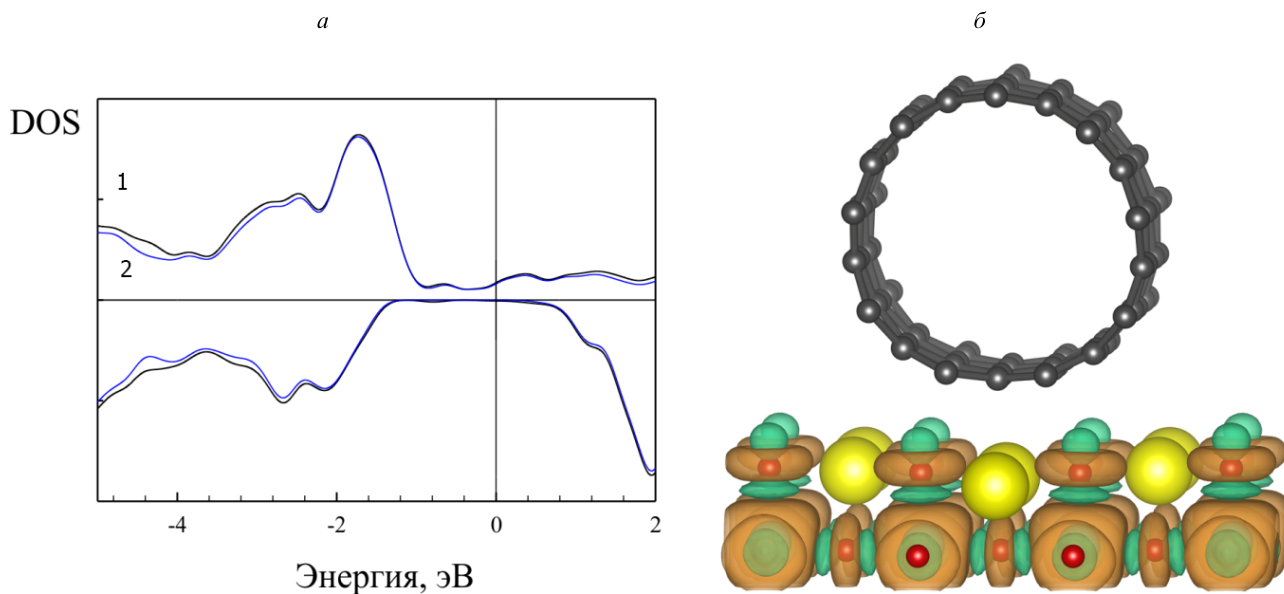


Рис. 3. Электронная структура композитов: а – плотности состояний нанокompозита CNT (9,0) / LSMO (1 – полные, 2 – парциальные плотности состояний пластины LSMO); б – пространственное распределение спиновой плотности в нанокompозите CNT (5,5) / LSMO

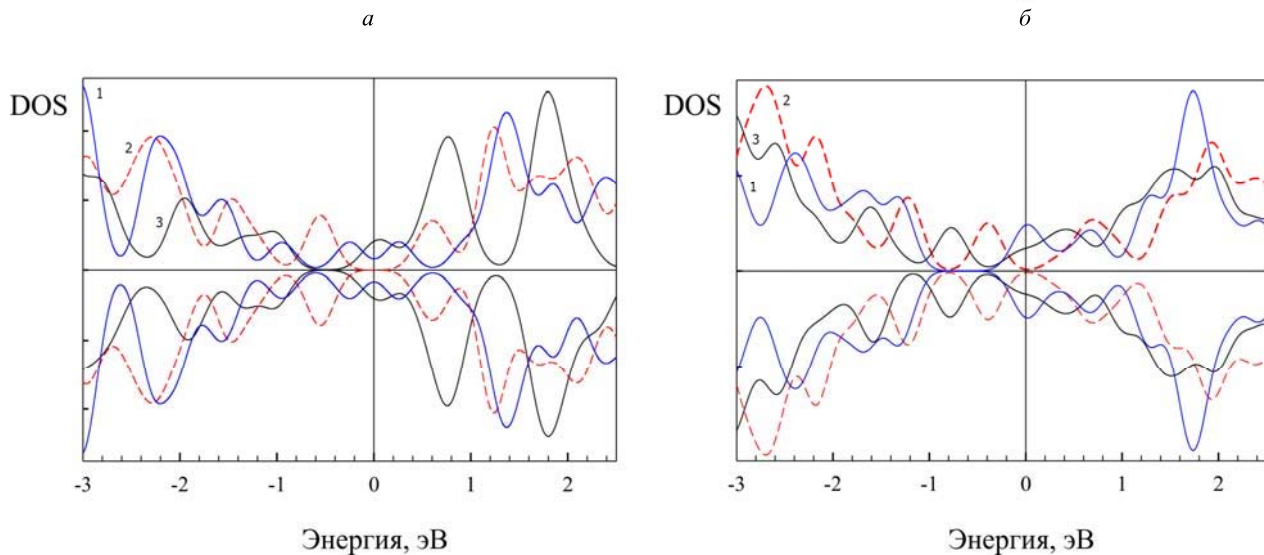


Рис. 4. Плотности состояний:  
 а – нанотрубки (5,5); б – нанотрубки (9,0); 1 - для структуры с оптимальным вектором трансляции; 2 – для деформированной в соответствии с структурными параметрами подложки; 3 – парциальные плотности состояний нанотрубки в нанокompозитах CNT/LSMO

**Заключение.** В ходе работы были теоретически исследованы интерфейсы пластины замещенного манганита лантана  $\text{La}_{0,67}\text{Sr}_{0,33}\text{MnO}$  с углеродными нанотрубками конфигураций «кресло» и «зигзаг». Рассмотрены три различных варианта расположения нанотрубки хиральности (9,0) относительно атомов подложки. Наиболее энергетически выгодная для данной системы конфигурация была рассмотрена также для трубки хиральности (5,5). Установлено наличие слабого вандерваальсова взаимодействия между LSMO и нанотрубками. Различие в структурных параметрах исходных компонентов ведет к заметной деформации обеих нанотрубок, что, в свою очередь, сказывается на их электронной структуре. В то же время электронная структура пластины остается практически неизменной. Показано, что несмотря на практически полную спиновую поляризацию композитов как целого, обусловленную присутствием LSMO, поляризации углеродных нанотрубок в данном случае не происходит, в отличие от, например, интерфейсов с ферромагнитными поверхностями Co (0001) и Ni (111) [28]. Тем не менее, искусственное модифицирование поверхности путем напыления Mn может коренным образом поменять свойства интерфейса и требует более детального изучения.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования Сибирскому федеральному университету (грант № 16.1500.2014/К). Авторы выражают благодарность Институту вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск; Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН, г. Москва; Центру коллективного пользования СФУ, г. Красноярск; а также Сибирскому суперкомпьютерному центру СО РАН, г. Новосибирск, за предоставленные возможности использования вычислительных кластеров, на которых были проведены расчеты.

**Acknowledgements.** This work was supported by the government contract of the Ministry of Education and Science of Russian Federation to Siberian Federal University (grant № 16.1500.2014/К). The authors would like to thank Institute of Computational Modelling of SB RAS, Krasnoyarsk; Joint Supercomputer Center of RAS, Moscow; Center of Equipment for Joint Use of Siberian Federal University, Krasnoyarsk; and Siberian Supercomputer Center (SSCC) of SB RAS, Novosibirsk for providing the access to their supercomputers.

## References

1. Marrows C. H., Hickey B. J. Introduction: New directions in spintronics (2011) *Phil. Trans. R. Soc. A*, 369, p. 3027–3036. Doi: 10.1098/rsta.2011.0156.
2. Naber W. J. M., Faez S., Wiel W. G. Organic spintronics (2007) *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 40, R205. Doi:10.1088/0022-3727/40/12/R01.
3. Shiraishi M., Ikoma T. Molecular spintronics (2011) *Physica E*, 43, p. 1295–1317.
4. Tombros N., Jozsa C., Popinciuc M., Jonkman H. T., Wees B. J. Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature (2007) *Nature*, 448, p. 571–574. Doi:10.1038/nature06037.
5. Tsukagoshi K., Alphenaar B.W., Ago, H. Coherent transport of electron spin in a ferromagnetically contacted carbon nanotube (1999) *Nature*, 401, p. 572–574.
6. Xiong Z. H., Wu D., Vardeny V. Z., Shi J. Giant magnetoresistance in organic spin-valves (2004) *Nature*, 427, p. 821–824.
7. Petta J. R., Slater S. K., Ralph D. C. Spin-Dependent Transport in Molecular Tunnel Junctions (2004) *Phys. Rev. Lett.*, 93, 136601(4).
8. Sakai S., Yakushiji K., Mitani S., Takahashi K., Naramoto H., Avramov P., Narumi K., Lavrentiev V. Tunnel magnetoresistance in Co nanoparticle/Co-C60 compound hybrid system (2006) *Appl. Phys. Lett.*, 89, 113118(3).

9. Sakai S., Sugai I., Mitani S., Takanashi K., Matsumoto Y., Naramoto H., Avramov P. V., Okayasu S., Maeda Y. Giant tunnel magnetoresistance in co-deposited fullerene-cobalt films in the low bias-voltage regime (2007) *Appl. Phys. Lett.*, 91, 242104(3).
10. Xue J., Sanchez-Yamagishi J., Bulmash D., Jacquod P., Deshpande A., Watanabe K., Taniguchi T., Jarillo-Herrero P., LeRoy B. J. Scanning tunnelling microscopy and spectroscopy of ultra-flat graphene on hexagonal boron nitride (2011) *Nature materials*, 10, p. 282–285. Doi:10.1038/nmat2968.
11. Auwärter W., Muntwiler M., Osterwalder J., Greber T. Defect lines and two-domain structure of hexagonal boron nitride films on Ni(111) (2003) *Surface Science*, 545, p. L735–L740.
12. Jaworski C. M., Yang J., Mack S., Awschalom D. D., Heremans J. P., Myers R. C. Observation of the spin-Seebeck effect in a ferromagnetic semiconductor (2010) *Nature Mater.*, 9, p. 898–903. Doi:10.1038/nmat2860.
13. Le Breton J.-C., Sharma S., Saito, Yuasa S., Jansen R. Thermal spin current from a ferromagnet to silicon by Seebeck spin tunneling (2011) *Nature*, 475, p. 82–85. Doi:10.1038/nature10224.
14. Groot R. A., Mueller F. M., Engen P. G., Buschow K. H. J. New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets (1983) *Phys. Rev. Lett.*, 50, p. 2024–2027.
15. Park J. H., Vescovo E., Kin H. J., Kwon C., Ramesh R., Ventakesan T. Direct evidence for a half-metallic ferromagnet (1998) *Nature*, 392, p. 794–796.
16. Viret M., Nassar J., Drouet M., Contour J. P., Fermon C., Fert A. Spin polarised tunnelling as a probe of half metallic ferromagnetism in mixed-valence manganites (1999) *J. Magn. Magn. Mat.*, 198–199, p. 1–5.
17. Davis A. H., Bussmann K. Organic luminescent devices and magnetoelectronics (2003) *J. Appl. Phys.*, 93, p. 7358–7361. Doi:10.1063/1.1540174.
18. Li F., Li T., Guo X. Vertical Graphene Spin Valves Based on  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  Electrodes (2014) *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 6, p. 1187–1192. Doi:10.1021/am404866r.
19. Hueso L. E., Pruneda J. M., Ferrari V., Burnell G., Valdés-Herrera J. P., Simons B. D., Littlewood P. B., Artacho E., Fert A., Mathur N. D. Transformation of spin information into large electrical signals using carbon nanotubes (2007) *Nature*, 445, p. 410–413. Doi:10.1038/nature05507.
20. Zheng B., Binggeli N. Influence of the interface atomic structure on the magnetic and electronic properties of  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3(001)$  heterojunctions (2010) *Phys. Rev. B*, 82, 245311. Doi:10.1103/PhysRevB.82.245311.
21. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals (1993) *Phys. Rev. B*, 47, p. 758.
22. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-amorphous-semiconductor transition in germanium (1994) *Phys. Rev. B*, 49, p. 14251.
23. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set (1996) *Comput. Mat. Sci.*, 6, p. 15.
24. Martin M. C., Shirane G., Endoh Y., Hirota K., Moritomo Y., Tokura Y. Magnetism and structural distortion in the  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  metallic ferromagnet (1996) *Phys. Rev. B*, 53, p. 4285–4291.
25. Tsui F., Smoak M. C., Nath T. K., Eom C. B. Strain-dependent magnetic phase diagram of epitaxial  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$  thin films (2000) *Appl. Phys. Lett.*, 76, pp. 2421–2423. Doi:10.1063/1.126363.
26. Ma C., Yang Z., Picozzi S. Ab initio electronic and magnetic structure in  $\text{La}_{0.66}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ : strain and correlation effects (2006) *J. Phys.: Condens. Matter*, 18, p. 7717–7728. Doi:10.1088/0953-8984/18/32/019.
27. Poggini L., Ninova S., Graziosi P., Mannini M., Lanzilotto V., Cortigiani B., Malavolti L., Borgatti F., Bardi U., Totti F., Bergenti I., Dediu V. A., Sessoli R. A Combined Ion Scattering, Photoemission, and DFT Investigation on the Termination Layer of a  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  Spin Injecting Electrode (2014) *J. Phys. Chem. C*, 118 (25), p. 13631–13637. Doi:10.1021/jp5026619.
28. Kuzubov A. A., Kovaleva E. A., Avramov P., Kuklin A. V., Mikhaleva N. S., Tomilin F. N., Sakai S., Entani S., Matsumoto Y., Naramoto H. Contact-induced spin polarization in BNNT(CNT)/TM (TM=Co, Ni) nanocomposites (2014) *Journal of Applied Physics*, 116, 084309. Doi: 10.1063/1.4894157.