

01,03

Решеточный ангармонизм и тепловые свойства сильно коррелированных сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

© А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына, А.Н. Филанович

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

E-mail: a.a.povzner@urfu.ru

(Поступила в Редакцию 4 апреля 2015 г.)

В рамках самосогласованной термодинамической модели, учитывающей влияние решеточного ангармонизма, выполнен расчет температурных зависимостей тепловых и упругих свойств сильно коррелированных металлических сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ($x = 0.1, 0.3, 0.5$) с различной атомной киральностью. С использованием экспериментальных данных определены решеточные вклады в теплоемкость и коэффициент теплового расширения исследуемых сплавов. Показано, что инварный эффект в тепловом расширении решетки, наблюдаемый в магнитоупорядоченной области $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$, не связан с решеточным ангармонизмом, хотя его возникновение коррелирует с изменением атомной киральности.

Результаты были получены в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, контракт 3.1236.2014/К.

1. Введение

Сильно коррелированный моносилицид железа и его сплавы с моносилицидами кобальта и марганца, представляют значительный интерес для создания прототипов новых спинтронных материалов [1]. Кристаллическая структура сильно коррелированного изолятора FeSi и сильно коррелированных металлических сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ относится к структурному типу B20 с пространственной группой $R\bar{2}_13$, для которой характерно отсутствие центра инверсии [2]. Такая симметрия обуславливает возникновение в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ антисимметричного релятивистского обмена Дзялошинского–Мория, приводящего к формированию в рассматриваемой сильно коррелированной электронной системе длиннопериодической геликоидальной спиновой спирали с аномально большими магнитными периодами (порядка 100–1000 Å) [3]. Направление закручивания спиновой спирали зависит как от атомной структуры, так и от сложных пока не выясненных особенностей электронной структуры, определяющих спиновую киральность и знак взаимодействия Дзялошинского–Мория [2].

Важной особенностью атомной структуры твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ является то, что с возрастанием концентрации кобальта происходит изменение кристаллографических позиций атомов с x (где x — координата в единицах параметра решетки) на $(1-x)$ (см. [4]). Такая замена ряда позиций атомов металла атомами кремния и наоборот трактуется как изменение атомной киральности от правовращающейся при $x < 0.2$ к левовращающейся при $x \geq 0.2$ [4]. Сплавы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ демонстрируют необычные тепловые свойства, такие как отрицательные значения коэффициента теплового расширения в температурном интервале магнитного упорядочения. В то же время нейтронографические и

синхротронные исследования фононных мод сильно коррелированных моносилицидов железа и кобальта (FeSi , CoSi и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$) указывают на заметный и достаточно сильно изменяющийся с температурой и химическим составом решеточный ангармонизм, природа которого также является предметом дискуссий [5–7].

Анализ экспериментальных данных о тепловых и упругих свойствах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [8,9] ранее осуществлялся лишь в рамках простой модели Дебая–Грюнаизена. Поэтому достоверной информации о возможном влиянии на эти свойства решеточного ангармонизма и необычных электронной и магнитной подсистем рассматриваемых сплавов [10–12] до сих пор нет. В связи с этим, в настоящей работе развивается самосогласованная термодинамическая модель решеточных свойств сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, в рамках которой учитывается и рассматривается решеточный ангармонизм. На основе этой модели определены вклады в теплоемкость и коэффициент теплового расширения, которые могут быть связаны с электронной и магнитной подсистемами и с их взаимодействием с кристаллической решеткой, для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с $x = 0.1$ (правовращающаяся киральность) и $x = 0.3, 0.5$ (левовращающаяся киральность).

2. Описание модели

Самосогласованная термодинамическая модель является обобщением традиционной модели Дебая–Грюнаизена и была ранее использована для расчета тепловых и упругих свойств сильно коррелированного FeSi [7]. Так как в настоящей работе рассматриваются сплавы, необходимо выполнить обобщение модели. Сплавы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ являются тройными, однако подход, представленный в [7,13] для сплавов бинарных, может быть распространен на случай и этих сплавов, поскольку в си-

лу малого отличия в атомных массах железа и кобальта, сплавы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ можно считать квазибинарными.

Очевидно, что спектр колебаний решетки сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ($x = 0.1, 0.3, 0.5$), как и любого вещества, состоящего из атомов различной массы, содержит три акустические и $3n - 3$ оптические моды, где n — число атомов в элементарной ячейке. Однако в случае оптических ветвей возникают трудности с определением зависимости их характеристик от объема и температуры кристалла. Поэтому в работе [13] для расчета термодинамических свойств бинарного CoSi рассматривались „эффективные“ дебаевские моды, образующие плотность фоновых состояний, которая хотя и является приближенной, однако позволяет описать термодинамический потенциал и свободную энергию сплава.

Таким образом, решеточный термодинамический потенциал (ТДП) записывается в виде $\Phi = \Phi_0 + \Phi_{ph}$, где $\Phi_0 = \Phi_0(P)$ — „постоянная“ часть ТДП, которая не зависит от температуры и является функцией давления, а $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta(P), T)$ — молярная решеточная (фононная) часть ТДП, отражающая вклад акустических колебаний кристаллической решетки твердого тела

$$\Phi_{ph} = 3nR \left(\frac{3}{8} \theta + T \phi(z) \right). \quad (1)$$

Здесь R — универсальная газовая постоянная, $z = \theta/T$ — обратная приведенная температура, $\phi(z) = \ln(1 - e^{-z}) - D(z)/3$ ($D(z)$ — стандартная табулированная функция Дебая), а θ — температура Дебая, которая выражается через молярный объем V и модуль всестороннего сжатия B

$$\theta = \frac{\hbar}{k_B} (6\pi^2 n N_A)^{1/3} \sqrt{\frac{3}{n\mu'}} \Xi^{1/2} B^{1/2} V^{1/6}, \quad (2)$$

где k_B , \hbar , N_A — постоянные Больцмана, Планка и Авогадро, соответственно; $\Xi(\sigma)$ — функция, зависящая от коэффициента Пуассона σ ; μ' — молярная масса, которая определяет массу колеблющихся атомов. Поскольку здесь рассматриваются „эффективные“ дебаевские моды, в качестве значения μ' мы используем среднюю молярную массу, $\mu' = ((1-x)\mu_{\text{Fe}} + x\mu_{\text{Co}} + \mu_{\text{Si}})/2$.

Из (1) и (2) следует, что температура Дебая θ является функцией температуры и в то же время входит в определение фононной составляющей термодинамического потенциала $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta, T)$. Поскольку весь комплекс вычисляемых термодинамических и упругих свойств определяется через термодинамический потенциал $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta, T)$, изменение моделируемого значения температуры Дебая θ приводит к изменению вычисляемых значений упругих и тепловых характеристик и, наоборот, моделирование значений рассматриваемых величин приводит к перенормировке массива значений температур Дебая θ . Последнее позволяет построить итерационную процедуру для самосогласованного расчета температурных зависимостей θ и тепловых и упругих свойств с учетом эффектов решеточного ангармонизма.

Выражения для тепловых и упругих характеристик могут быть получены путем дифференцирования ТДП по различным термодинамическим переменным. Так, для решеточной составляющей теплоемкости получаем выражение

$$C_{ph}(T) = -T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} = 3nR \left\{ C_{VR}(z) \left[1 - \frac{1}{z} \left(\frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P \right]^2 - T \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2} \right)_P \right\}, \quad (3)$$

где $C_{VR}(z)$ — стандартная дебаевская теплоемкость, нормированная на $3R$.

Для молярного объема $V(T)$ и объемного коэффициента $\beta(T)$ теплового расширения (ОКТР) соответственно имеем

$$V(T) = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P} \right)_T = V_0 - \frac{3nR\theta\gamma_\theta}{B} \left(\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right), \quad (4)$$

где V_0 — объем при $T = 0$ К;

$$\beta(T) = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -\frac{3nR\theta\gamma_\theta}{VB} \left\{ C_{VR}(z) \left[1 - \frac{T}{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P \right] \frac{1}{\theta} + \left[\frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \left[\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P + \frac{1}{\gamma_\theta} \left(\frac{\partial \gamma_\theta}{\partial T} \right)_P - \frac{1}{B} \left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_P \right] \right\}. \quad (5)$$

Наконец, для модуля всестороннего сжатия (МВС) можно записать выражение

$$B(T) = V \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_T = B_0 + \frac{3nR}{V} \times \left\{ \frac{3}{8} \gamma_\theta^* \theta - T [\gamma_\theta^* \cdot C_{VR}(\theta/T) - \gamma_\theta^* \cdot D(\theta/T)] \right\}, \quad (6)$$

где F — свободная энергия Гельмгольца, интегральное представление для которой имеет ту же форму, что и ТДП, и отличается только набором аргументов, B_0 — начальное (при $T = 0$ К) значение модуля всестороннего сжатия.

Фигурирующие в формулах выше величины γ_f и γ_f^* представляют собой обобщенные параметры Грюнайзена, которые для произвольной термодинамической величины $f = f(T, V)$ при постоянных температуре и давлении определяются соотношениями

$$\gamma_f = \frac{V}{f} \left(\frac{\partial f}{\partial V} \right)_{TP}; \quad \gamma_f^* = \frac{V^2}{f} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right)_{TP}. \quad (7)$$

Параметрами модели выступают параметры Грюнайзена для начального (при $T = 0$ К) значения МВС и коэффициента Пуассона γ_{B_0} , $\gamma_{B_0}^*$, γ_σ , γ_σ^* , а также сам коэффициент Пуассона σ . Для последнего были получены значения $\sigma = 0.237, 0.243, 0.25$ для $x = 0.1, 0.3, 0.5$

соответственно из экспериментальных данных по упругим модулям FeSi и CoSi (см. ниже) с использованием выражения

$$\sigma = \frac{1 - 2G/3B}{2 + 2G/3B}, \quad (8)$$

где G — модуль сдвига.

Значения остальных параметров были получены из условия наилучшего согласия расчетных и экспериментальных данных: для $\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Si}$ $\gamma_{B_0} = -2.31$, $\gamma_{B_0}^* = 3.6$, $\gamma_\sigma = 2.5$, $\gamma_\sigma^* = -3$; для $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ $\gamma_{B_0} = -2.1$, $\gamma_{B_0}^* = 2.7$, $\gamma_\sigma = 2.5$, $\gamma_\sigma^* = -3.1$; для $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ $\gamma_{B_0} = -1.8$, $\gamma_{B_0}^* = 2.3$, $\gamma_\sigma = 2.2$, $\gamma_\sigma^* = -1.8$.

Ранее в работах [14–16] путем исследования температурных зависимостей скорости звуковых волн были рассчитаны упругие постоянные моносилцидов FeSi и CoSi. Ввиду того что надежные экспериментальные данные для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ в настоящее время отсутствуют, нами было осуществлено их моделирование с использованием теории эффективной среды [17]. Эта теория является математическим эквивалентом приближения когерентного потенциала (ПКП), используемого для получения электронной структуры сплавов. Поскольку нам известны модуль всестороннего сжатия B_1 и модуль сдвига G_1 FeSi, а также известны МВС B_2 и модуль сдвига G_2 CoSi [14], то мы можем найти значения этих же двух параметров для интересующих нас сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, где x — это концентрация CoSi ($x = 0.1, 0.3, 0.5$), используя описанную в [17] итерационную процедуру на основе соотношений

$$B^* = B_1 + x(B_2 - B_1) \frac{3B^* + 4G^*}{3B_2 + 4G^*}, \quad (9)$$

$$G^* = G_1 + x(G_2 - G_1) \frac{5(3B^* + 4G^*)G^*}{G^*(9B^* + 8G^*) + 6G_2(B^* + 2G^*)}. \quad (10)$$

3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены температурные зависимости модуля всестороннего сжатия для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ($x = 0.1, 0.3, 0.5$). Как можно видеть, смоделированные в рамках расширенной модели Дебая значения находятся в хорошем согласии со значениями, рассчитанными с помощью теории эффективной среды. Из этого можно сделать вывод, что за температурную зависимость МВС полностью отвечает решеточная подсистема. В области высоких температур ($T > 1000$ К) видно, что МВС начинает быстрее убывать с ростом температуры, это говорит об усилении вклада ангармонических эффектов.

На вставке к рис. 1 приведена температурная зависимость характеристической температуры Дебая. До 1000 К происходит монотонное убывание с ростом температуры, затем, как и в случае МВС зависимость усиливается.

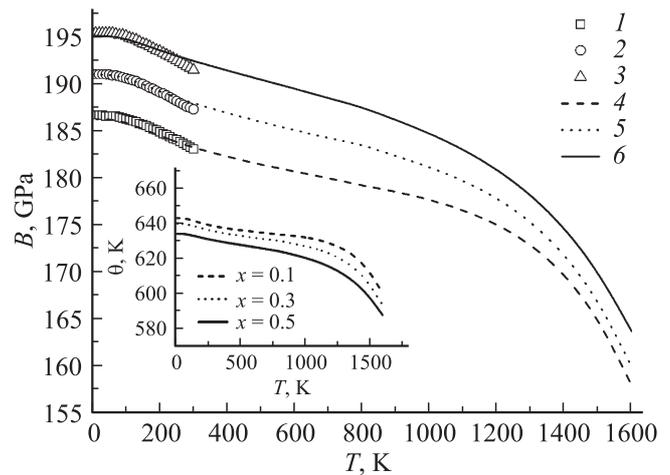


Рис. 1. Температурная зависимость модуля всестороннего сжатия $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$: 1, 2, 3 — значения, рассчитанные с помощью теории эффективной среды (псевдоэкспериментальные данные) для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета в настоящей работе для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; на вставке температурная зависимость температуры Дебая: результаты расчета в настоящей работе для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

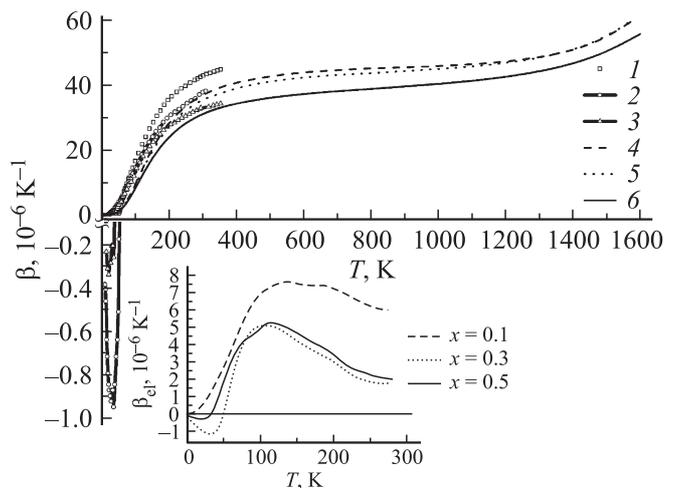


Рис. 2. Температурная зависимость объемного коэффициента теплового расширения $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$: 1, 2, 3 — экспериментальные данные [8] для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета в настоящей работе для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; на вставке результаты расчетов вклада β_{el} в ОКТП сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

Далее, на рис. 2 представлены температурные зависимости объемного коэффициента теплового расширения (ОКТП). Отклонение расчетов β в настоящей работе от экспериментальных значений [8] связано с наличием вклада β_{el} , который обусловлен влиянием электронной и магнитной подсистем на тепловое расширение кристаллической решетки. Этот вклад, полученный вычитанием рассчитанной решеточной составляющей из экспериментальных данных, показан на вставке к рис. 2. Можно

Сравнение параметров зависимостей $\beta(T)$ сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

	Смена знака $\beta(T)$, К		Температура минимума $\beta_{el}(T)$, К		Смена знака $\beta_{el}(T)$, К		Температура максимума $\beta_{el}(T)$, К	
	Работа [8]		Работа [8]		Работа [8]		Работа [8]	
	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа
$x = 0.1$	—	15	—	—	17.4	—	259	141
$x = 0.3$	47.1	44	34	—	56	50	—	102
$x = 0.5$	35.8	39	23	—	46	32	—	113

видеть, что суммарный электронно-магнитный вклад β_{el} в ОКТР для сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ при низких температурах отрицателен. Таким образом, именно электронная подсистема вызывает экспериментально наблюдаемые отрицательные значения ОКТР сплавов $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$. В таблице проведено сравнение параметров температурных зависимостей электронных составляющих ОКТР $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, полученных в [8] в рамках простой модели Дебая–Грюнайзена, с результатами, полученными в настоящей работе. Можно видеть, что учет эффектов фононного ангармонизма приводит к существенному изменению значений этих параметров.

На рис. 3 приведены рассчитанные решеточные составляющие теплоемкости рассматриваемых сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ в сопоставлении с экспериментальными данными [9]. Видно, что расширенная модель Дебая при высоких температурах предсказывает значения теплоемкости, превышающие предел $3R$ Дюлонга–Пти, что объясняется усилением ангармонических эффектов. На вставке к рис. 3 приведена температурная зависимость коэффициента электронной теплоемкости, который был получен путем вычитания из экспери-

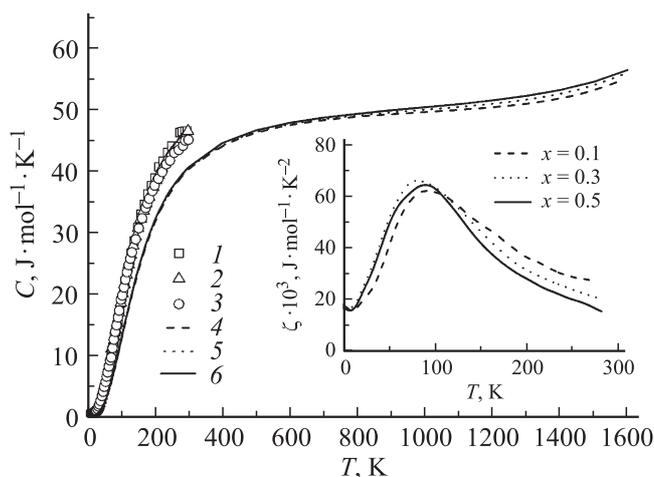


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$: 1, 2, 3 — экспериментальные данные [9] для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета решеточной составляющей в настоящей работе для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; на вставке: температурная зависимость линейного коэффициента электронной теплоемкости для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

ментальных данных по теплоемкости [9] рассчитанных в настоящей работе значений решеточной составляющей теплоемкости. С ростом температуры коэффициент электронной теплоемкости резко увеличивается, достигая максимума в точках 86 К, 76 К, 89 К для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ ($x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно), а затем уменьшается.

В настоящей работе также были рассчитаны значения плотности исследуемых сплавов (рис. 4), экспериментальные данные по которым отсутствуют. Оценка значений плотности при $T = 300$ К была выполнена следующим образом. Поскольку экспериментальные данные по параметрам решетки для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ отсутствуют, параметр решетки был рассчитан путем усреднения между значениями для соответствующих моносилцидов FeSi и CoSi , которые очень близки, т.е. параметр решетки сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ очень слабо изменяется с увеличением концентрации кобальта. Далее параметры решетки были использованы для расчета объемов элементарной ячейки, которые пересчитывались в молярный объем, и, с использованием молярной массы, была вычислена плотность каждого из сплавов. Таким образом были получены следующие значения: $\rho = 6226$,

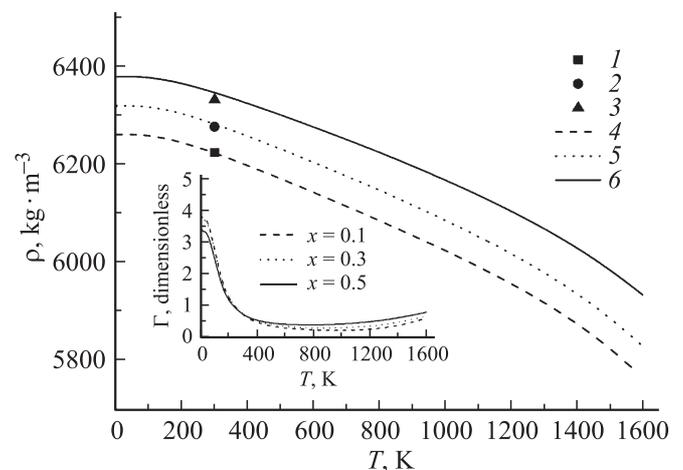


Рис. 4. Температурная зависимость плотности $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$: 1–3 — экспериментальные значения для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; 4–6 — расчет в настоящей работе для соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ для $x = 0.1, 0.3, 0.5$ соответственно; на вставке: температурная зависимость параметра Грюнайзена для соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

6279, 6334 kg/m³ для Fe_{1-x}Co_xSi ($x = 0.1, 0.3, 0.5$) соответственно.

На вставке к рис. 4 приведена температурная зависимость параметра Грюнайзена, который определяется следующим образом:

$$\Gamma(T) = -\frac{\partial \ln \theta}{\partial \ln V} = -\frac{\partial \theta}{\theta} \frac{V}{\partial V}$$

$$= -\frac{\partial \theta / \partial T}{\theta} \frac{V}{\partial V / \partial T} = -\frac{1}{\theta \beta} \frac{\partial \theta}{\partial T}.$$

Можно видеть, что при низких температурах Γ максимален в случае Fe_{0.9}Co_{0.1}Si, в то время как минимален в случае Fe_{0.5}Co_{0.5}Si, т.е. решеточный ангармонизм уменьшается с увеличением концентрации кобальта, что коррелирует с результатами работы [5]. При этом, однако, сплавы с меньшим содержанием кобальта демонстрируют не только более высокие значения Γ , но и более сильную температурную зависимость этого параметра. Вследствие этого, при температурах выше ~ 400 К выполняются следующие соотношения между значениями параметра Грюнайзена для исследуемых сплавов: $\Gamma(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Si}) < \Gamma(\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}) < \Gamma(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si})$.

4. Заключение

Из расчетов, выполненных в настоящей работе, следует, что зависимости от температуры некоторых свойств сплава Fe_{0.9}Co_{0.1}Si несколько отличаются от таковых для двух других сплавов, исследуемых в настоящей работе, т.е. Fe_{0.7}Co_{0.3}Si и Fe_{0.5}Co_{0.5}Si. В частности, это проявляется в отсутствии инварного эффекта в Fe_{0.9}Co_{0.1}Si в отличие от Fe_{0.7}Co_{0.3}Si и Fe_{0.5}Co_{0.5}Si, а также в более высоких значениях нерешеточных составляющих теплоемкости (при $T > 100$ К) и ОКТР (см. вставки к рис. 2 и 3 соответственно). Можно ожидать, что эти отличия возникают вследствие различной структурной киральности сплавов, поскольку Fe_{0.9}Co_{0.1}Si является правовращающимся, в то время как сплавы Fe_{0.7}Co_{0.3}Si и Fe_{0.5}Co_{0.5}Si — левовращающиеся. Для окончательного решения этого вопроса необходимы первопринципные теоретические исследования электронной структуры этих сплавов в области существования в них спиновых спиралей. Очевидно, что представления об электронной и магнитной структурах должны описывать установленные при анализе экспериментальных данных нерешеточные составляющие тепловых свойств. Представляют интерес также исследования ангармонизма фононных спектров, указания на который получены в нейтронографическом исследовании [5], где была выявлена существенная роль взаимодействия электронной подсистемы с кристаллической решеткой.

Список литературы

[1] A.L. Schmitt, J.M. Higgins, S. Jin. Nano Lett. **8**, 810 (2008).

- [2] G. Shirane, R. Cowley, C. Majkrzak. Phys. Rev. B **28**, 6251 (1983).
- [3] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L881 (1980).
- [4] S.V. Grigoriev, D. Chernyshov, V.A. Dyadkin, V. Dmitriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvina, D. Menzel, J. Schoenes, H. Eckerlebe. Phys. Rev. Lett. **102**, 037 204 (2009).
- [5] O. Delaire, K. Marty, M.B. Stone, P.R.C. Kent, M.S. Lucas, D.L. Abernathy, D. Mandrus, B.C. Sales. Proc. Nat. Acad. Sci. (USA) **108**, 4725 (2011).
- [6] П.П. Паршин, П.А. Алексеев, К.С. Немковский, Й. Перссон, А.И. Чумаков, Р. Рюффер. ЖЭТФ **145**, 279 (2014).
- [7] A.A. Povzner, A.N. Filanovich. Physica B **456**, 371 (2015).
- [8] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, Р.П. Кренцис. ДАН СССР **297**, 1359 (1987).
- [9] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, В.Н. Сафонов. ДАН СССР **289**, 351 (1986).
- [10] M.K. Chattopadhyay, S.B. Roy, S. Chaudhary. Phys. Rev. B **65**, 132 409 (2002).
- [11] P. Sinha, N.A. Porter, C.H. Marrows. Phys. Rev. B **89**, 134 426 (2014).
- [12] Y. Onose, N. Takeshita, C. Terakura, H. Takagi, Y. Tokura. Phys. Rev. B **72**, 224 431 (2005).
- [13] Y. Liu, Shi-Na Li, Zhi-Zhou Wang. Physica B **407**, 4700 (2012).
- [14] A.E. Petrova, V.N. Kransnorussky, A.A. Shikov, W.M. Yuhasz, T.A. Lograsso, J.C. Lashley, S.M. Stishov. Phys. Rev. B **82**, 155 124 (2010).
- [15] G.P. Zinoveva, L.F. Romasheva, V.A. Saperov. Solid State Phys. **26**, 3509 (1984).
- [16] G.P. Zinoveva, L.P. Andreeva, P.V. Geld. Phys. Status Solidi **23**, 711 (1974).
- [17] G. Grimvall. Thermophysical Properties of Materials. Hardbound, North-Holland, (1999). 424 с.