04

# Влияние замещения ионов никеля ионами кобальта на градиент электрического поля в $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$

© М.С. Павловский, С.Н. Софронова

Институт физики им. Л.В. Киренского —
обособленное структурное подразделение Федерального исследовательского центра
„Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук“,
Красноярск, Россия

E-mail: ssn@iph.krasn.ru

*Поступила в Редакцию 7 октября 2025 г.*
*В окончательной редакции 9 ноября 2025 г.*
*Принята к публикации 12 ноября 2025 г.*

С помощью программного пакета VASP проведены расчеты главных компонент тензора градиента электрического поля для ионов никеля и кобальта в кристаллах $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$. Сравнение параметров градиента электрического поля на ионах Ni и Co в каждом кристалле, полученных с использованием экспериментальных и теоретических структурных данных, позволяет предположить, что в $Ni_2CoB_2O_6$ происходит замещение в кристаллографической позиции 2a ионов кобальта ионами никеля, а в $Co_2NiB_2O_6$ происходит замещение в кристаллографической позиции 2a ионов никеля ионами кобальта.

**Ключевые слова:** котоиты, катионное упорядочение, расчеты *ab initio*.

DOI: 10.61011/FTT.2025.11.62131.270-25

## 1. Введение

Твердый раствор замещения образуется в том случае, когда размеры, валентности и электроотрицательности замещаемого и замещающего атома находятся в определенных соотношениях [1]. В разупорядоченных твердых растворах замещающий и замещаемый атомы равномерно распределены по образцу [2]. Однако в том случае, если в соединении существует несколько неэквивалентных кристаллографических позиций, смешение атомов в разных кристаллографических позициях может быть неравномерным. Так, например, в структуре людвигита существуют четыре кристаллографические позиции, которые занимают металлические ионы, и, в зависимости от состава, может быть как полностью катионно-упорядоченное соединение [3,4], так и разупорядоченное [5–8], причем в некоторых составах в каждой позиции присутствуют два типа атомов, но с разной вероятностью, что значительно влияет на свойства [4].

Соединения $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ являются прекрасными кандидатами для образования твердых растворов замещения во всем диапазоне концентраций, поскольку существуют два крайних изоструктурных соединения: $Co_3B_2O_6$ и $Ni_3B_2O_6$; кроме этого, атомы никеля и кобальта соседствуют в периодической таблице Менделеева, оба иона входят в состав в двухвалентном состоянии и имеют практический одинаковый ионный радиус. Однако в структуре котоита, в которой реализуются соединения $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$, металлические ионы занимают две кристаллографические позиции: 2a и 4f (рис. 1), и встает вопрос о распределении ионов никеля и кобальта по кристаллографическим позициям при различных концентрациях ($0 < x < 3$).

Во многих случаях метод рентгеновской дифракции позволяет определить степень заселенности каждой позиции разными атомами, однако для соединений, в состав которых входят атомы, соседствующие в периодической таблице Менделеева, метод дифракции нейтронов становится практически единственным методом, с помощью которого можно исследовать распределение

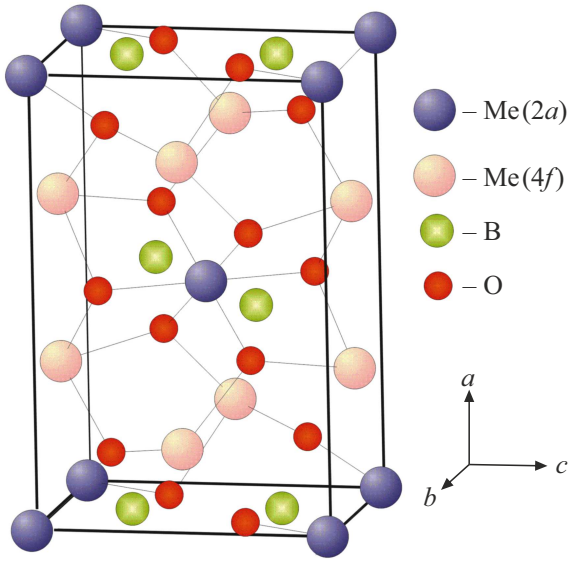



**Рис. 1.** Структура котоита. Темно-фиолетовыми и светло-розовыми окружностями обозначены позиции атомов переходных металлов 2a и 4f.

атомов по позициям и обнаружить сверхструктурное упорядочение [9]. Однако метод дифракции нейтронов не относится к широкодоступным и имеет ряд ограничений (например, для соединений, содержащих изотоп $^{10}$B из-за его высокого поглощения).

Развитие методов расчета физических свойств соединений *ab initio* позволяет описывать физические свойства соединений, а в ряде случаев даже предсказывать их [10]. Как было показано недавно, замещение ионов железа ян–теллеровскими ионами $Mn^{3+}$ в кристаллах $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ приводит к сильному повышению температуры спин-переориентационного перехода [11]. Изменения углов и расстояний в кислородных октаэдрах $(Fe,Mn)O_6$ играют важную роль, приводя к изменению градиента электрического поля (ГЭП) и баланса обменных констант в 3d-подсистеме [11,12], что может свидетельствовать о влиянии искажений кислородного октаэдра на магнитные свойства ортоферрита. Градиент электрического поля очень чувствителен к химическим и структурным изменениям. Изменения градиента электрического поля при катионном замещении может позволить смоделировать предпочтительное распределение ионов переходных металлов по кристаллографическим позициям в твердых растворах.

В качестве объектов исследования в работе выбраны соединения $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ со структурой котоита, в которой металлические ионы занимают две неэквивалентные позиции. Для соединений $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ вопрос о распределении металлических ионов по позициям остается открытым. В работе [13] были исследованы спектры диффузного рассеяния соединений $Ni_3B_2O_6$ и $Co_2NiB_2O_6$, определены параметры Рака (Racah); сравнение параметров Рака для соединений $Ni_3B_2O_6$ и $Co_2NiB_2O_6$ показало, что ионы никеля предпочитают занимать кристаллографическую позицию 4f [13]. Однако этот метод не является прямым методом для определения распределения ионов по кристаллическим позициям. В работе [14] было показано, что распределение металлических ионов по позициям оказывает значительное влияние на основное магнитное состояние в соединениях $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$.

В настоящей работе мы изучаем влияние замещения ионов никеля на ионы кобальта на ГЭП в кристаллах $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ в рамках расчетов *ab initio*.

## 2. Метод расчета

Расчеты проведены в рамках теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционных функционалов Пердью–Бурка–Эрнцерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof) с обобщенной градиентной аппроксимацией (PBE-GGA), реализованных в пакете VASP [15,16]. Число плоских волн ограничивалось энергией 400 eV. Сетка Монкхорста–Пака (Monkhorst–Pack) [17] выбиралась равной $7 \times 5 \times 9$. В расчете был использован метод GGA + $U$ в приближении Дударева [18], при котором параметр $U$ для ионов кобальта и никеля выбирался 4 eV. Конфигурация валентных электронов для ионов Co — $3d^84s^1$, Ni: $3d^94s^1$, B — $2s^22p^1$ и ионов O — $2s^22p^4$. Величины компонент тензора градиента электрического поля вычислялись по методике описанной в работах [19] и реализованной в пакете VASP.

## 3. Результаты и обсуждение

В настоящей работе были проведены теоретические расчеты *ab initio* тензоров ГЭП для ионов кобальта и никеля в соединениях $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$. Кристаллическая структура исследуемых соединений подобна структуре природного минерала котоита и описывается пространственной группой симметрии Pnmn ромбической сингонии; элементарная ячейка содержит две формульные единицы ($Z = 2$) (рис. 1). Ионы кобальта и/или никеля занимают в элементарной ячейке две неэквивалентные позиции 2a и 4f (позиции Вайкова). Предполагается, что в соединениях $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ ионы кобальта и никеля распределяются по неэквивалентным позициям следующим образом: четыре иона кобальта в позиции 4f и два иона никеля в позиции 2a для $Co_2NiB_2O_6$, четыре иона никеля в позиции 4f и два иона кобальта в позиции 2a для $Ni_2CoB_2O_6$ (рис. 2). Однако можно ожидать и „подмешивания“ одних ионов другими в обеих позициях, так как ионы никеля и кобальта имеют одинаковую валентность и близкие ионные радиусы.

Ионы никеля и кобальта в изоструктурных соединениях будут иметь некоторые отличия в формах ближайшего окружения. И здесь, как нам кажется, уместно сравнивать ГЭП на этих ионах. Величины компонент тензора

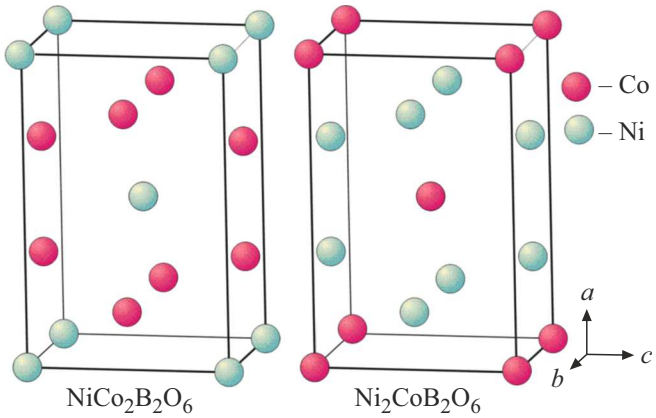



**Рис. 2.** Распределение ионов кобальта (темно-красные круги) и никеля (светло-зеленые круги) по неэквивалентным кристаллографическим позициям 2a и 4f в соединениях $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$.

**Таблица 1.** Параметры решетки и координаты атомов исследуемых соединений, вычисленные в настоящей работе и полученные экспериментально в работах [13,21]

| | | $Co_3B_2O_6$ | | $Co_2NiB_2O_6$ | | $Ni_2CoB_2O_6$ | | $Ni_3B_2O_6$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Параметры решетки | | | | | | | | | |
| | | эксп. | теор. | эксп. | теор. | эксп. | теор. | эксп. | теор. |
| $a$, Å | | 5.462 | 5.4011 | 5.4582 | 5.4026 | 5.4314 | 5.3677 | 5.396 | 5.3404 |
| $b$, Å | | 8.436 | 8.3995 | 8.4269 | 8.4139 | 8.3789 | 8.2395 | 8.297 | 8.2561 |
| $c$, Å | | 4.529 | 4.5347 | 4.5149 | 4.4742 | 4.4917 | 4.4924 | 4.459 | 4.4495 |
| Атом | Позиция | Относительные координаты атомов | | | | | | | |
| | | эксп. | теор. | эксп. | теор. | эксп. | теор. | эксп. | теор. |
| Co/Ni | 2a | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 | 0; 0; 0 |
| Co/Ni | 4f | 0.5<br>0.8136<br>0 | 0.5<br>0.8125<br>0 | 0.5<br>0.8144<br>0 | 0.5<br>0.8170<br>0 | 0.5<br>0.8152<br>0 | 0.5<br>0.8163<br>0 | 0.5<br>0.81572<br>0 | 0.5<br>0.81658<br>0 |
| B | 4g | 0.2446<br>0.5<br>0.0417 | 0.2435<br>0.5<br>0.0442 | 0.2457<br>0.5<br>0.0439 | 0.2487<br>0.5<br>0.0445 | 0.2457<br>0.5<br>0.0432 | 0.2426<br>0.5<br>0.0412 | 0.2449<br>0.5<br>0.0439 | 0.2450<br>0.5<br>0.0441 |
| O1 | 4g | 0.1807<br>0.5<br>0.7480 | 0.1801<br>0.5<br>0.7504 | 0.1788<br>0.5<br>0.7483 | 0.1780<br>0.5<br>0.7490 | 0.1771<br>0.5<br>0.7475 | 0.1742<br>0.5<br>0.7449 | 0.1757<br>0.5<br>0.7489 | 0.1738<br>0.5<br>0.7466 |
| O2 | 8h | 0.2928<br>0.6385<br>0.1975 | 0.2925<br>0.6396<br>0.2010 | 0.2956<br>0.6390<br>0.1996 | 0.3004<br>0.6393<br>0.2023 | 0.2975<br>0.6396<br>0.2013 | 0.2944<br>0.6425<br>0.1977 | 0.2989<br>0.6399<br>0.2012 | 0.2994<br>0.6417<br>0.2034 |

ГЭП и направления соответствующих им собственных векторов очень чувствительны к малым искажениям формы ближайшего окружения рассматриваемого иона.

Ранее нами была опробована методика расчета ГЭП в работе [20], где исследовалось влияние концентрации примесного иона марганца на структурные и магнитные свойства в кристалле ортоферрита гольмия.

В настоящей работе для каждого исследуемого соединения использовалось два набора параметров решетки и координат атомов. Первый — экспериментальный, полученный с помощью рентгеноструктурного анализа, проведенного в работах [13,21]. Второй — теоретический, полученный в настоящей работе путем минимизации полной энергии кристалла при варьировании структурных параметров.

Расчеты ГЭП проводились с использованием экспериментальных и теоретических структурных данных и сравнивались между собой для каждого соединения. Таким образом мы получали информацию о структурных отличиях экспериментальных и теоретических данных для конкретного соединения.

В рамках метода функционала электронной плотности были произведены расчеты минимума полной энергии при варьировании параметров решетки и свободных координат атомов для соединений $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$. Полученные равновесные структурные параметры приведены в табл. 1.

Для сравнения приведены экспериментальные данные [13,21]. Можно видеть хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных. Отклонение в параметрах решетки не превысило 2%.

Для исследуемых соединений с использованием теоретических и экспериментальных структурных данных были произведены расчеты величин компонент диагонализованных тензоров градиента электрического поля $V_{xx}, V_{yy}, V_{zz}$ $(|V_{zz}| > |V_{xx}| > |V_{yy}|)$, параметра асимметрии поля $\eta$ $(\eta = |V_{xx} - V_{yy}|/|V_{zz}|)$ и координат собственных векторов $\mathbf{e}_{xx}, \mathbf{e}_{yy}, \mathbf{e}_{zz}$, соответствующих главным компонентам тензора ГЭП. Результаты приведены в табл. 2, вектора изображены на рис. 3.

Табл. 2 демонстрирует хорошее согласие значений главных компонент тензора ГЭП и параметров асимметрии, полученных с использованием теоретических и экспериментальных структурных данных для $Co_3B_2O_6$. На рис. 3, $a$–$d$ можно видеть, что направления собственных векторов, соответствующих главным компонентам тензора ГЭП, практически полностью совпадают. Это говорит о том, что хорошо согласуются между собой теоретические и экспериментальные параметры решетки и координаты атомов (это также можно видеть в табл. 1), и, главное, имеют хорошую схожесть между собой формы ближайшего окружения ионов кобальта в экспериментальной и теоретической структурах данного соединения. Аналогичную ситуацию можно наблюдать в

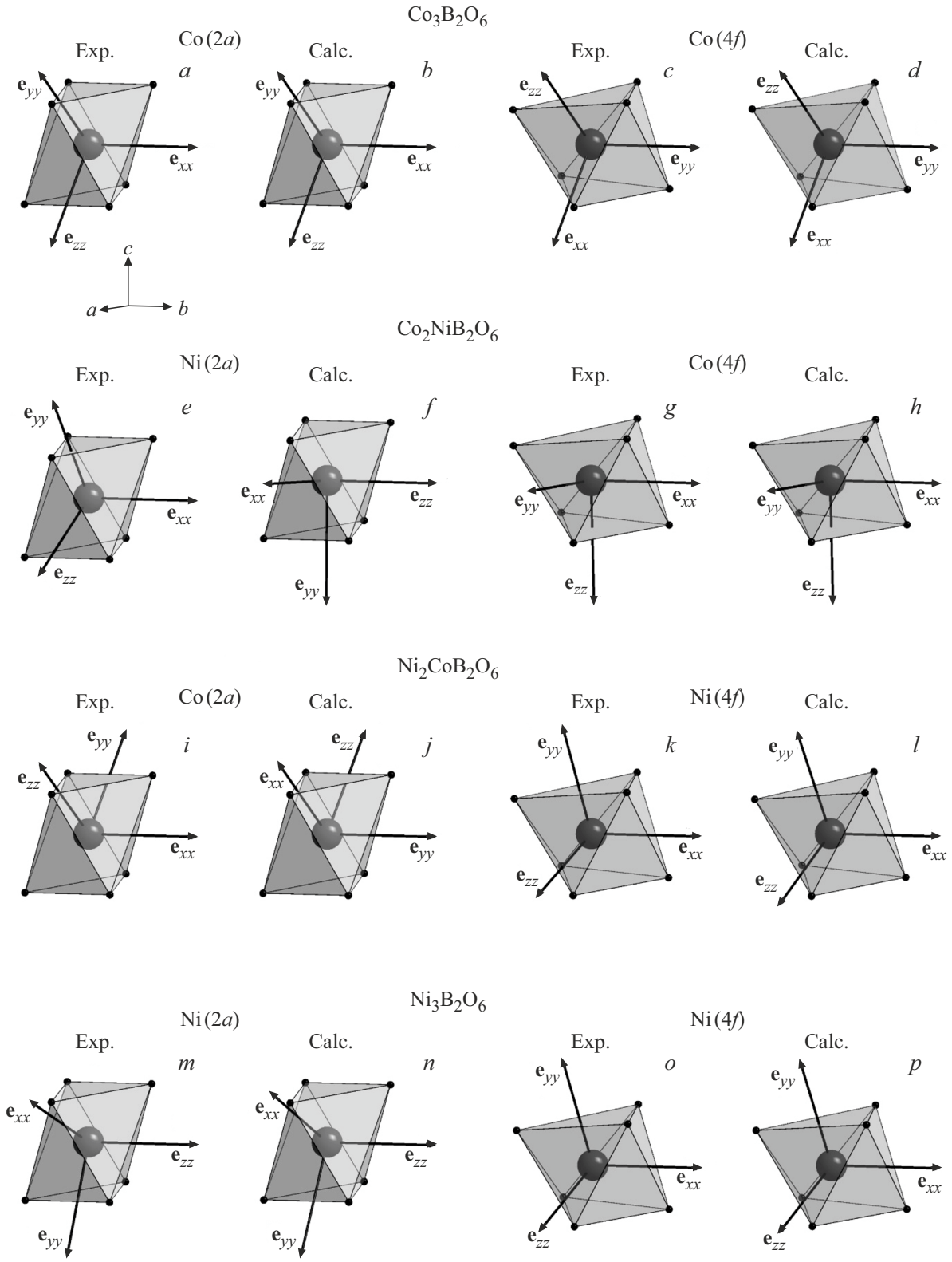



**Рис. 3.** Собственные вектора $\mathbf{e}_{xx}$, $\mathbf{e}_{yy}$, $\mathbf{e}_{zz}$, соответствующие главным компонентам тензора ГЭП для ионов никеля и кобальта в исследуемых соединениях.

**Таблица 2.** Главные компоненты тензора ГЭП и параметра асимметрии, полученные с использованием вычисленных в настоящей работе параметров решетки (верхняя строка в ячейке) и установленных экспериментально в работах [13,21] (нижняя строка в ячейке)

| | $V_{xx}$, V/Å$^2$ | $V_{yy}$, V/Å$^2$ | $V_{zz}$, V/Å$^2$ | $\eta$ |
|---|---|---|---|---|
| $Co_3B_2O_6$ | | | | |
| Co (2a) | −59.823<br>−60.167 | −56.524<br>−52.961 | 116.347<br>113.128 | 0.028<br>0.064 |
| Co (4f) | −88.800<br>−91.666 | −13.122<br>−8.466 | 101.922<br>100.132 | 0.743<br>0.831 |
| $Co_2NiB_2O_6$ | | | | |
| Ni (2a) | −10.493<br>−10.315 | −1.177<br>−3.560 | 11.670<br>13.875 | 0.798<br>0.487 |
| Co (4f) | −70.854<br>−66.804 | −40.807<br>−41.440 | 111.661<br>108.243 | 0.269<br>0.234 |
| $CoNi_2B_2O_6$ | | | | |
| Co (2a) | −61.990<br>−175.366 | −56.740<br>−91.015 | 118.730<br>266.381 | 0.044<br>0.317 |
| Ni (4f) | −24.434<br>−21.661 | −4.300<br>−4.066 | 28.733<br>25.727 | 0.701<br>0.684 |
| $Ni_3B_2O_6$ | | | | |
| Ni (2a) | −12.619<br>−13.050 | −0.080<br>−1.288 | 12.699<br>14.338 | 0.987<br>0.820 |
| Ni (4f) | −23.436<br>−24.009 | −4.012<br>−4.711 | 27.448<br>28.720 | 0.708<br>0.672 |

табл. 2 и на рис. 3, *m*–*p* для соединения $Ni_3B_2O_6$. Таким образом, можно сделать вывод о том, что используемая в настоящей работе методика теоретического расчета очень хорошо описывает структурные свойства исследуемых соединений.

Также в табл. 2 и на рис. 3 можно видеть, что значения компонент тензора ГЭП и направления соответствующих векторов, а также значения фактора асимметрии для иона кобальта в $Co_3B_2O_6$ значительно отличаются от таковых для иона никеля в $Ni_3B_2O_6$. Это говорит о том, что, несмотря на одинаковый структурный тип соединений $Co_3B_2O_6$ и $Ni_3B_2O_6$, ионы кобальта и никеля формируют вокруг себя ближайшее окружение одинаковой симметрии, но разной формы.

Из расчетов, полученных с использованием теоретических структурных параметров, можно видеть следующее. В соединениях $Ni_3B_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ для иона никеля в кристаллографической позиции 4f параметры ГЭП ($V_{xx}$, $V_{yy}$, $V_{zz}$, $\mathbf{e}_{xx}$, $\mathbf{e}_{yy}$, $\mathbf{e}_{zz}$, $\eta$) имеют близкие значения (рис. 3, *l* и *p*, табл. 2). В $Co_3B_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ для иона кобальта в кристаллографической позиции 2a имеют близкие значения главные компоненты тензора ГЭП и фактора асимметрии (табл. 2). Можно видеть отличие в направлении собственных векторов, соответствующих главным компонентам тензора ГЭП (рис. 3, *b* и *j*). Однако мы можем получить расположение векторов в пространстве для иона кобальта в $Ni_2CoB_2O_6$, как для иона кобальта в позиции 2a в $Co_3B_2O_6$. Для этого в соединении $Ni_2CoB_2O_6$ для иона кобальта необходимо поменять местами компоненты тензора ГЭП $V_{xx}$ и $V_{yy}$ и соответствующие им вектора $\mathbf{e}_{xx}$ и $\mathbf{e}_{yy}$, а также переобозначить их: $V_{xx} \to V_{yy}$ и $V_{yy} \to V_{xx}$, $\mathbf{e}_{xx} \to \mathbf{e}_{yy}$ и $\mathbf{e}_{yy} \to \mathbf{e}_{xx}$. Такую процедуру можно провести, так как компоненты тензора принято обозначать по порядку возрастания величины следующим образом: $V_{zz} > V_{xx} > V_{yy}$, а в нашем случае значения компонент $V_{xx}$ и $V_{yy}$ достаточно близки между собой. Чтобы тройка собственных векторов была правой, необходимо поменять направление вектора ezz на обратное. По рис. 3 и табл. 2 можно заметить существенные отличия параметров ГЭП для ионов никеля в кристаллографической позиции 2a и ионов кобальта в позиции 4f в соединении $Co_2NiB_2O_6$ по сравнению с параметрами ГЭП этих ионов в исходных $Ni_3B_2O_6$ и $Co_3B_2O_6$. Таким образом, можно сделать вывод о том, что ионы никеля и кобальта сохраняют форму ближайшего окружения в одном соединении ($Ni_2CoB_2O_6$) такой же, как и в исходных составах ($Ni_3B_2O_6$ и $Co_3B_2O_6$), только в кристаллографических позициях 4f и 2a соответственно.

Проведем сравнение полученных результатов для экспериментальной и теоретической структур соединений $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$. В $Co_2NiB_2O_6$ для иона кобальта в позиции 4f имеет место очень хорошее согласие параметров ГЭП, полученных с использованием экспериментальных и теоретических структурных данных (рис. 3, **g** и *h*, табл. 2). Аналогичная ситуация наблюдается и для иона никеля в кристаллографической позиции 4f в соединении $Ni_2CoB_2O_6$ (рис. 3, *k* и *l*, табл. 2). Главные отличия можно видеть в соединении $Ni_2CoB_2O_6$ для иона кобальта в кристаллографической позиции 2a. Величины главных компонент тензора ГЭП $V_{xx}$ и $V_{zz}$, вычисленные с использованием экспериментальных структурных данных, более чем в два раза превосходят величины $V_{xx}$ и $V_{zz}$, вычисленные с использованием теоретических структурных параметров (табл. 2). Значения параметров асимметрии также существенно отличаются. На рис. 3, *i* и *j* заметно несоответствие в направлениях собственных векторов $\mathbf{e}_{xx}$, $\mathbf{e}_{yy}$, $\mathbf{e}_{zz}$, полученных для экспериментальной и теоретической структур соединения $Ni_2CoB_2O_6$. В $Co_2NiB_2O_6$ для иона никеля в позиции 2a величина компоненты тензора ГЭП $V_{yy}$, полученная для экспериментальной структуры, в три раза превышает таковую, вычисленную для теоретической структуры (табл. 2). Это, в свою очередь, приводит к значительному различию факторов асимметрии. Несоответствие направлений векторов $\mathbf{e}_{xx}$, $\mathbf{e}_{yy}$, $\mathbf{e}_{zz}$, отвечающих главным компонентам тензора ГЭП для иона никеля в позиции 2a, полученных для экспериментальной и теоретической структур соединения $Co_2NiB_2O_6$, можно видеть на рис. 3, *e* и *f*.

Учитывая хорошее согласие параметров ГЭП, вычисленных с использованием экспериментальных и теоретических структурных параметров, для ионов кобальта и никеля в $Co_3B_2O_6$ и $Ni_3B_2O_6$, а также для ионов кобальта и никеля, находящихся в кристаллографической позиции 4f в соединениях $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$

соответственно, можно сделать следующий вывод. Установленные в настоящей работе отличия параметров ГЭП, полученных с использованием экспериментальных и теоретических структурных параметров для ионов кобальта и никеля, находящихся в кристаллографической позиции 2a в соединениях $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$, говорят о том, что заполнение позиции 2a только ионами никеля в $Co_2NiB_2O_6$ и только ионами кобальта в $Ni_2CoB_2O_6$ не соответствует экспериментальной кристаллической структуре исследуемых соединений. По всей видимости, в соединении $Ni_2CoB_2O_6$ происходит замещение в кристаллографической позиции 2a ионов кобальта ионами никеля. Концентрацию никеля в данной позиции в рамках данной работы установить не представляется возможным. Химическую формулу данного образца можно записать как $Ni_{2+\Delta}Co_{1-\Delta}B_2O_6$, где $\Delta$ — концентрация никеля в позиции 2a. Аналогичным образом мы можем предположить, что в соединении $Co_2NiB_2O_6$ происходит замещение в кристаллографической позиции 2a ионов никеля ионами кобальта, и химическую формулу в данном случае можно записать $Co_{2+\Delta}Ni_{1-\Delta}B_2O_6$, где $\Delta$ — концентрация кобальта в кристаллографической позиции 2a.

## 4. Заключение

Проведены расчеты главных компонент тензора градиента электрического поля $V_{xx}$, $V_{yy}$, $V_{zz}$, координат соответствующих собственных векторов $\mathbf{e}_{xx}$, $\mathbf{e}_{yy}$, $\mathbf{e}_{zz}$ и параметра асимметрии поля $\eta$ $(\eta = |V_{xx} - V_{yy}|/|V_{zz}|)$ для ионов никеля и кобальта в соединениях $Co_3B_2O_6$, $Ni_3B_2O_6$, $Co_2NiB_2O_6$ и $Ni_2CoB_2O_6$ с использованием параметров решетки и координат атомов, вычисленных в настоящей работе и полученных экспериментально в работах [13,21]. Прямое сравнение параметров ГЭП, полученных с использованием экспериментальных и теоретических структурных данных, на соответствующих ионах в каждом кристалле, позволяет предположить, что в $Ni_2CoB_2O_6$ происходит замещение ионов кобальта в кристаллографической позиции 2a ионами никеля. Аналогичным образом, в $Co_2NiB_2O_6$ происходит замещение ионов никеля в кристаллографической позиции 2a ионами кобальта, что согласуется с экспериментальными данными [13].

### Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, проект № 23-12-20012 (https://rscf.ru/project/23-12-20012/).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

[1] В. Юм-Розери. Введение в физическое материаловедение. Металлургия, М. (1965). 203 с. [W. Hume-Rothery. Elements of Structural Metallurgy. Institute of Metals, London (1961).]
[2] В.С. Урусов. Теория изоморфной смесимости. Наука, М. (1977). 251 с.
[3] K. Bluhm, H. Müller-Buschbaum. Z. anorg. allg. Chemie 582, 1, 15 (1990).
[4] D.C. Freitas, M.A. Continentino, R.B. Guimarães, J.C. Fernandes, E.P. Oliveira, R.E. Santelli, J. Ellena, G.G. Eslava, L. Ghivelder. Phys. Rev. B **79**, *13*, 134437 (2009).
[5] J.A. Hriljac, R.D. Brown, A.K. Cheetham, L.C. Satek. J. Solid State Chem. **84**, *2*, 289 (1990).
[6] D.A. Perkins, J.P. Attfield. J. Chem. Soc., Chem. Commun. *4*, 229 (1991).
[7] R. Norrestam, M. Kritikos, K. Nielsen, I. Søtofte, N. Thorup. J. Solid State Chem. **111**, *2*, 217 (1994).
[8] С.Н. Софронова, А.В. Чернышев, А.Д. Васильев, А.В. Шабанов. ФТТ **66**, *10*, 1736 (2024).
[9] M.S. Lucas, G.B. Wilks, L. Mauger, J.A. Muñoz, O.N. Senkov, E. Michel, J. Horwath, S.L. Semiatin, M.B. Stone, D.L. Abernathy, E. Karapetrova. Appl. Phys. Lett. **100**, *25*, 251907 (2012).
[10] П.А. Агзамова, С.В. Стрельцов. ФТТ **64**, *1*, 144 (2022). [P.A. Agzamova, S.V. Streltsov. Phys. Solid State **64**, *1*, 140, (2022).]
[11] К.А. Шайхутдинов, С.А. Скоробогатов, Ю.В. Князев, Т.Н. Камкова, А.Д. Васильев, С.В. Семенов, М.С. Павловский, А.А. Красиков. ЖЭТФ **165**, *5*, 685 (2024).
[12] G. Kotnana, V.R. Reddy, S.N. Jammalamadaka. J. Magn. Magn. Mater. **429**, 353 (2017).
[13] S. Sofronova, E. Moshkina, A. Chernyshev, A. Vasiliev, N.G. Maximov, A. Aleksandrovsky, T. Andryushchenko, A. Shabanova. CrystEngComm **26**, *19*, 2536 (2024).
[14] S.N. Sofronova, D.A. Velikanov, E.M. Moshkina, A.V. Chernyshev. Bull. RAS: Phys. **88**, *Suppl. 1*, S47 (2024).
[15] G. Kresse, J. Furthmüller. Phys. Rev. B **54**, *16*, 11169 (1996).
[16] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, *18*, 3865 (1996).
[17] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B **1**3, *12*, 5188 (1976).
[18] S.L. Dudarev, G.A. Botton, S.Y. Savrasov, C. Humphreys, A.P. Sutton. Phys. Rev. B **57**, *3*, 1505 (1998).
[19] H.M. Petrilli, P.E. Blöchl, P. Blaha, K. Schwarz. Phys. Rev. B **57**, *23*, 14690 (1998).
[20] Y.V. Knyazev, M.S. Pavlovskii, T.D. Balaev, S.V. Semenov, S.A. Skorobogatov, A.E. Sokolov, D.M. Gokhfeld, K.A. Shaykhutdinov. Crystals **14**, *12*, 1025 (2024).
[21] H. Effenberger, F. Pertlik. Z. Kristallogr. — Cryst. Mater, **166**, *1–4*, 129 (1984).

*Редактор Е.В. Толстякова*