

Электронная структура и параметры основного состояния жаропрочных сплавов $Ru_{1-x}Me_xAl$

© И.Д. Блесков¹, Э.И. Исаев^{1,2}, Ю.Х. Векилов¹

¹ Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“, Москва, Россия

¹ Университет г. Линчепинга, Линчепинг, Швеция

E-mail: ivan.bleskov@gmail.com

(Поступила в Редакцию 26 января 2010 г.)

В рамках теории функционала плотности в базисе точных МТ-орбиталей в сочетании с приближением когерентного потенциала исследованы электронная структура и параметры основного состояния жаропрочных сплавов на основе $B2 RuAl$. Показано, что число состояний на уровне Ферми для сплавов $Ru_{1-x}Me_xAl$ в зависимости от содержания легирующего металла имеет минимум, свидетельствующий об изменении топологии поверхности Ферми и о наличии особенностей в поведении упругих констант. Сделан вывод о том, что электронная структура сплавов может быть описана в рамках модели жесткой зоны. Дано объяснение нелинейному изменению параметров решетки сплавов.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 07-02-01266), Шведским фондом стратегических исследований (SSF) и Фондом Горана Йоханссона.

1. Введение

Современные жаропрочные сплавы на основе никеля способны работать при температурах, приближающихся к 70% от их температуры плавления ($T_m = 1638^\circ C$); при температуре порядка $1150^\circ C$ материал теряет свои прочностные свойства. Поэтому очевидно, что разработка новых моделей двигателей и турбин требует создания сплавов с более высокой рабочей температурой и прочностью. В связи с этим использование сплавов металлов группы платиноидов представляется новым и заслуживающим интереса подходом, поскольку эти металлы образуют интерметаллиды с кубической симметрией и высокой температурой плавления. Среди недавно предложенных материалов для указанных выше целей представляют интерес также сплавы на основе интерметаллида $RuAl$ со структурой $B2$ ($CsCl$).

Известно, что $B2 RuAl$ заметно превосходит по многим параметрам такие интерметаллиды со структурой $B2$, как $NiAl$, $CoAl$, $FeAl$ [1–6]. Температура плавления $RuAl$ составляет 2380 K (для $NiAl$, $FeAl$, $CoAl$ температура плавления соответственно равна 1911, 1583, 1921 K) [7]. $B2 RuAl$ обладает высокой прочностью при повышенных температурах и хорошим сопротивлением ползучести; имеет высокую ударную вязкость при комнатных температурах. Наличие большого количества независимых систем скольжения (векторы скольжения $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$) [8–10] обеспечивает $RuAl$ существенную пластичность, что резко отличает его от большинства интерметаллидов, которые преимущественно являются хрупкими при комнатной температуре. Тепло- и электропроводность $RuAl$ [11–13] сравнимы с таковыми для чистых металлов. Совокупность указанных характеристик наряду с отличной стойкостью к окислению и коррозии [8,11,14] делает этот интерметаллид привлека-

тельным материалом для создания жаропрочных структурных компонентов реактивных авиа- и ракетных двигателей, энергетических турбин (направляющие и рабочие лопатки турбин, камеры сгорания, защитные покрытия), а также для применения в химической промышленности (антикоррозийные покрытия) и энергетические отрасли (электроды свечей зажигания) [15].

Помимо преимуществ, которыми обладает $RuAl$, этот материал имеет также и некоторые недостатки, обусловленные в первую очередь свойствами самого рутения, который, будучи элементом платиновой группы, обладает высокой плотностью, что, очевидно, ограничивает возможности применения сплавов на его основе в качестве конструкционных материалов в реактивных двигателях. Кроме того, рутений сравнительно дорог. Поэтому возникает задача частичной замены атомов рутения атомами других элементов с целью уменьшения плотности сплава и его стоимости, не допуская при этом существенного ухудшения прочностных свойств сплава. В настоящей работе в качестве легирующих элементов рассматриваются Ni , Co , Fe , Ir . Выбор указанных элементов обусловлен тем, что эти атомы замещают атомы Ru в $RuAl$, поскольку они образуют фазы, изоструктурные с $B2 RuAl$, — $NiAl$ [16–22], $CoAl$ [17,23,24], $FeAl$ [23,24] и $IrAl$ [25,26]. Экспериментально [27] и теоретически [18,28] было показано, что энергетически выгодным является замещение именно атомов Ru атомами Ni и других указанных элементов.

Поскольку деформационные и прочностные характеристики исследуемых сплавов сильно зависят от кристаллической структуры, элементного состава и особенностей межатомного взаимодействия [29], знание электронной структуры является базисом, на основе которого возможно фундаментальное понимание прочностных и пластических свойств материалов, их зави-

симостей от концентрации легирующего компонента, а также предсказание широкого спектра параметров, характеризующих исследуемые жаропрочные сплавы.

2. Методика расчета

Расчеты полной энергии, выполненные для определения равновесного периода решетки a_0 , модуля всестороннего сжатия B_0 и плотности электронных состояний, были проведены в рамках теории функционала плотности с использованием метода точных МТ-орбиталей (ТМТО) [30] для решения уравнений Кона–Шэма. В рамках этого подхода МТ-потенциалы в межсферной области предполагаются перекрывающимися, что делает точность метода ТМТО сравнимой с точностью методов полного потенциала. Комбинация метода ТМТО с приближением когерентного потенциала [30,31] позволяет проводить исследования неупорядоченных сплавов замещения. Обменно-корреляционные эффекты в электронном газе учтены в рамках обобщенных градиентных поправок (GGA) [32] к приближению локального потенциала. Базисный набор волновых функций ТМТО включал s -, p -, d -, f -орбитали. При интегрировании по энергии в комплексной плоскости было взято 16 точек на полукруглом контуре. Атомные сферы Ru, Al и Me ($Me = Ni, Co, Fe, Ir$) были выбраны равными радиусу Вигнера–Зейтца в каждом сплаве. При интегрировании по неприводимой зоне Бриллюэна для простой кубической решетки использовалось около 3000 k -точек в обратном пространстве. Сходимость по энергии составляла 10^{-7} Ry. Для каждой концентрации задавался ряд значений радиуса Вигнера–Зейтца, варьирующийся с шагом 0.05 а. у. Полученные для каждого значения радиуса Вигнера–Зейтца полные энергии E_{tot} сплава были использованы для определения параметров основного состояния (параметр решетки a_0 и модуль всестороннего сжатия B_0) по методу, предложенному в [33]. Далее уже с равновесными значениями периода решетки проводился расчет электронной структуры и плотности состояний.

3. Результаты

В таблице представлены результаты расчетов основного состояния для чистых соединений со структурой $B2$. Для сравнения приведены также результаты экспериментальных и других теоретических работ. Можно видеть, что расчеты, выполненные в рамках приближения локальной плотности (LDA), для RuAl, NiAl и FeAl дают заниженное по сравнению с экспериментом значение параметра решетки. В то же время GGA-расчеты в основном превышают параметр решетки. Результаты наших GGA-расчетов аналогичны результатам работ [34–36], использующих такой же обменно-корреляционный функционал. Поведение модуля всестороннего сжатия для RuAl и NiAl похожи: LDA-расчеты

Параметры основного состояния (период решетки a и модуль всестороннего сжатия B) $B2$ RuAl, NiAl, FeAl, CoAl и IrAl (для каждого соединения первая строка соответствует результатам наших расчетов, следующие — результатам работ [34–54])

Соединение	$a, \text{Å}$	B, GPa
RuAl	3.0077	202
	2.9914, 2.9868 (Э) [17]	207 (Э) [9]
	3.005 (LAPW) [18]	230 (LDA) [39]
	2.994 (Э) [19]	208 (Э) [40]
	2.9916 (Э) [23]	223 (LDA) [41]
	3.03 (Э) [38]	213 (LDA) [42]
	2.96 (LDA) [39]	
NiAl	2.8939	158
	2.89 (Э) [43]	186 (LDA) [39]
	2.8864 (Э) [44]	184 (LDA) [41]
	2.84 (LDA) [45]	166 (Э) [43] 175 (LDA) [45]
FeAl	2.8703	180
	2.91 (Э) [44]	195 (LDA) [39]
	2.82 (LDA) [45]	188 (LDA) [41]
	2.86 (Э) [46]	201.5 (LDA) NM [49]
	2.875 (GGA) [34]	190 (LDA) FM [49]
	2.862 (Э) [47]	113, 116 (LDA) [37]
	2.81 (LDA) [48] 2.9084 (Э) [49] 2.856 (расчет FM) [49]	150 (Э) [50]
CoAl	2.8530	179
	2.86 (LDA) [39]	162 (Э) [39]
	2.8619 (Э) [44]	192 (LDA) [41]
	2.8611 (Э) [47] 2.80 (LDA) [45]	
IrAl	3.0189	228
	2.983 (Э) [47]	
	2.98 (Э) [51]	
	3.02 (GGA) [35]	
	2.9667 (Э) [52]	
	2.978 (Э) [53]	
	2.9860 (Э) [54] 3.028 (GGA) [36]	

Примечание. Э — экспериментальные значения, LAPW (linearized augmented planewaves) — метод линейризованных присоединенных плоских волн, NM (nonmagnetic) — немагнитный, FM (ferromagnetic) — ферромагнитный.

завышают величину B , GGA — дает заниженное значение B . С другой стороны, для FeAl LDA-расчеты, проведенные в работе [37], дают значительно меньшую величину для B , что может быть связано с использованием LDA-функционала, предложенного [55].

Расхождение между рассчитанными и экспериментальными значениями B составляет 5–10%, что является характерной ошибкой для расчетов из первых принципов, точность которых зависит от типа использованного обменно-корреляционного потенциала. Хорошее совпадение полученных результатов с экспериментальными данными и результатами других расчетов свидетельствует о достоверности полученных результатов.

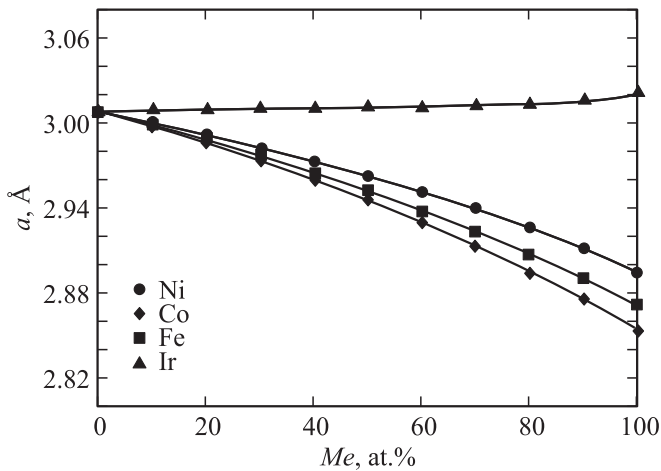


Рис. 1. Период решетки сплавов $Ru_{1-x}Me_xAl$ в зависимости от концентрации легирующего элемента.

На рис. 1 представлены зависимости равновесных периодов решетки от концентрации легирующего элемента. Для Ni, Co, Fe наблюдается некоторое отклонение от линейной зависимости, соответствующей правилу Вегарда. Подобное поведение периода решетки для системы $(Ru, Ni)Al$ наблюдалось в работе [18]. В связи с этим укажем, что атомные радиусы Ni, Co, Fe, равные соответственно 1.24, 1.25, 1.26 Å, и, как видно из рисунка, увеличение концентрации указанных элементов в сплаве $Ru_{1-x}Me_xAl$ приводит к уменьшению периода решетки, хотя и нелинейным образом. Анализ полученных результатов показывает, что на графиках зависимостей параметров решетки от содержания легирующего металла можно выделить два участка. Первый простирается от 0% примерно до 50%, и здесь зависимость периода решетки практически линейная. На втором участке (от 50 до 100%) наблюдается отклонение от линейной зависимости и более быстрое уменьшение периода решетки. Такое поведение периода решетки в указанных интервалах объясняется следующим образом. В первом из них по мере увеличения концентрации легирующего элемента характер связи в сплаве остается металлическим и играет роль только размерный эффект, благодаря которому период решетки уменьшается линейно. Во втором интервале с дальнейшим ростом содержания легирующего металла начинает проявляться ковалентная составляющая в химической связи [29], которая в сочетании с размерным эффектом приводит к отклонению от линейной зависимости и более быстрому уменьшению параметра решетки. Роль ковалентной составляющей, обуславливающей нелинейное поведение параметра решетки в сплавах $Fe_{1-x}Cu_xAl$, была отмечена в работе [34]. Зависимости модуля всестороннего сжатия от содержания легирующего металла являются для $Ru_{1-x}Me_xAl$ почти линейными (рис. 2). Некоторое отклонение, как и в случае с периодом решетки, явля-

ется следствием изменения характера связи с ростом концентрации легирующего элемента.

Заметно некоторое несоответствие рассчитанного значения периода решетки для $IrAl$ и эксперимента [47,51–54]. Следует отметить, что данные о значениях периода решетки для $IrAl$ довольно противоречивы. В работах [47,51–53] указано, что период решетки $IrAl$ меньше, чем у $RuAl$. Однако период решетки $IrAl$, рассчитанный в работах [35,36] (3.02 и 3.028 Å), оказывается больше, чем у $RuAl$, и практически совпадает со значением, полученным в настоящей работе (3.0189 Å). Отметим также, что концентрационная зависимость параметра решетки для сплавов $(Ru, Ir)Al$ ведет себя несколько необычно: он практически не зависит от состава. Рассчитанные равновесные параметры решеток $B2 RuAl$ и $IrAl$ различаются менее чем на 0.5% (3.0077 и 3.0189 Å соответственно). Логично предположить, что легирование Ir, атомный радиус которого равен 1.36 Å (всего +1.5% от атомного радиуса Ru), не приведет к заметному увеличению периода решетки сплавов $Ru_{1-x}Ir_xAl$, что и происходит согласно результатам наших расчетов.

Отметим, что $B2 FeAl$ рассматривался нами как немагнитный в соответствии с экспериментальными данными [49,56]. Природа магнетизма в $FeAl$ обсуждалась в работах [34,49]. В [56] было показано, что учет эффективного отталкивания d -электронов Fe в рамках методов LDA с учетом кулоновского взаимодействия между локализованными (d или f) электронами (LDA + U) и LDA с учетом поправки на самодействие (self-interaction correction) (LDA + SIC) приводит к сдвигу уровня Ферми к большим энергиям и, следовательно, к уменьшению плотности состояний на уровне Ферми, для которой критерий Стонера уже не выполняется. Однако использование этих методов выходит за рамки наших исследований. Укажем, кроме того, что немагнитный $FeAl$ был рассмотрен при исследовании фононных дисперсионных кривых [57], а также предела прочности [45].

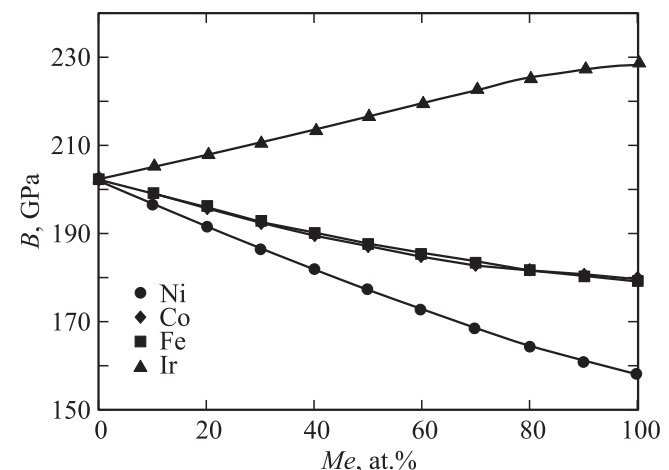


Рис. 2. Модуль всестороннего сжатия сплавов $Ru_{1-x}Me_xAl$ в зависимости от концентрации легирующего металла.

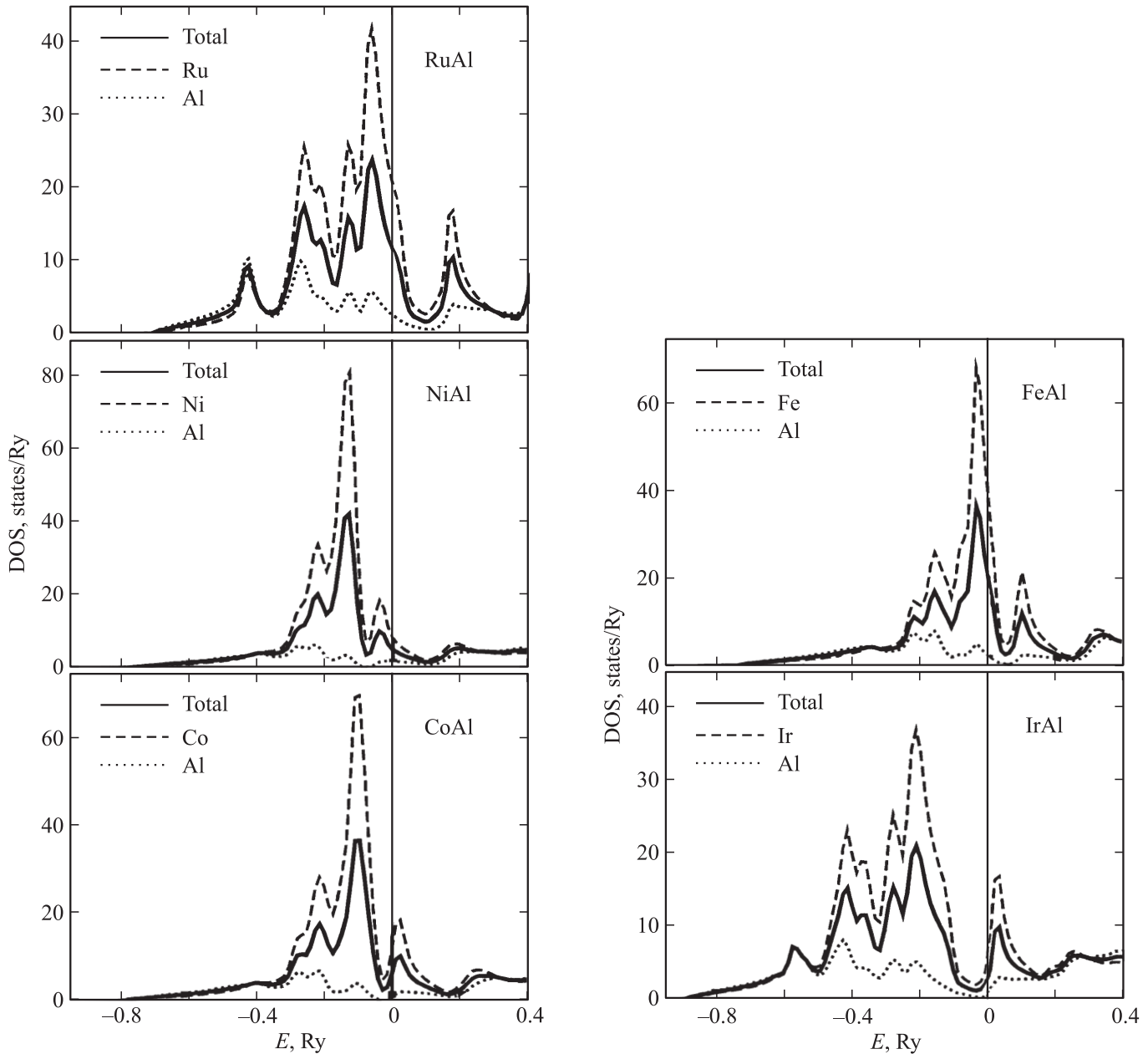


Рис. 3. Плотность электронных состояний для $B2$ структур.

На рис. 3 представлены плотности электронных состояний (DOS) чистых интерметаллидов со структурой $B2$. Форма DOS согласуется с результатами расчетов плотности электронных состояний, полученных в работах [41,45]. Видно, что основной вклад (по сравнению с атомами Al) в плотность электронных состояний вносят атомы переходных металлов. Из рис. 4, где представлена плотность электронных состояний $B2$ RuAl, можно заметить, что вклад Al, обусловленный в основном s -электронами, существен лишь для глуболежащих уровней энергии. На уровне Ферми вклад d -электронов Ru в плотность состояний является доминирующим. Эти d -электроны Ru гибридизуются с p -э-

лектронами Al на уровне Ферми, где есть также небольшой вклад от d -электронов Al и p -электронов Ru. Следует обратить внимание на то, что для DOS чистых интерметаллидов довольно хорошо работает модель жесткой зоны (см. также [45]). Если учесть положение легирующих металлов в периодической таблице и за основу взять DOS для RuAl, то можно заметить, что FeAl имеет DOS, довольно похожую на DOS для RuAl (в окрестностях уровня Ферми), поскольку Fe и Ru являются элементами VIII группы. Добавление одного электрона в RuAl (Co или Ir) сдвигает уровень Ферми направо, за псевдощель, а в случае Ni (добавление двух электронов) уровень Ферми перемещается за пик правее псевдощели.

В зависимости от содержания легирующего элемента число электронных состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ ведет себя в соответствии с рис. 5. Из рисунка видно, что в случае легирования атомами Ni, Co и Ir концентрационная зависимость $N(E_F)$ имеет особенности, тогда

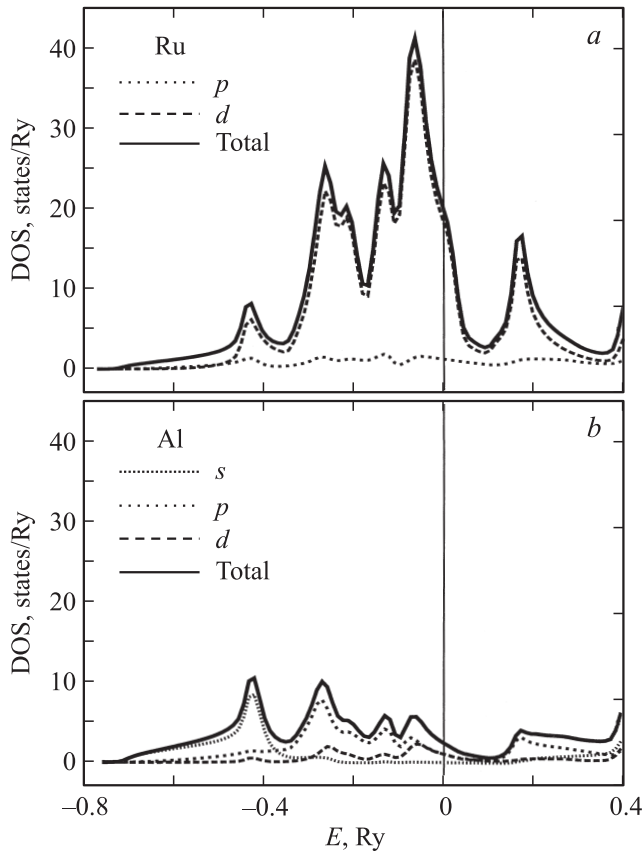


Рис. 4. Плотность электронных состояний $B2 RuAl$. Показаны наиболее важные парциальные вклады от Ru (p - и d -электроны) (a) и Al (s -, p - и d -электроны) (b).

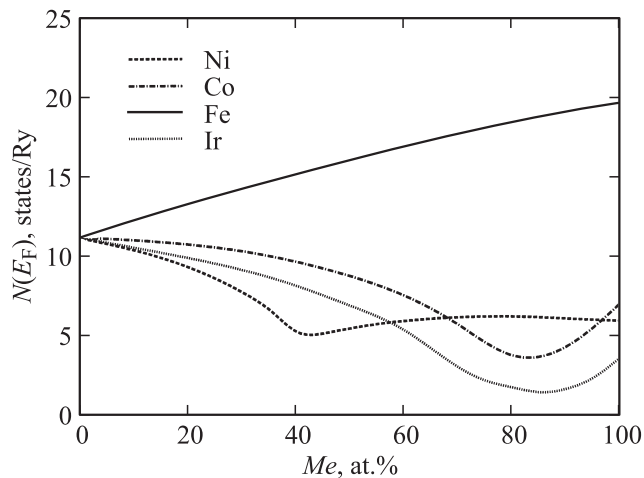


Рис. 5. Число состояний на уровне Ферми для сплавов $Ru_{1-x}Me_xAl$ в зависимости от содержания легирующего элемента.

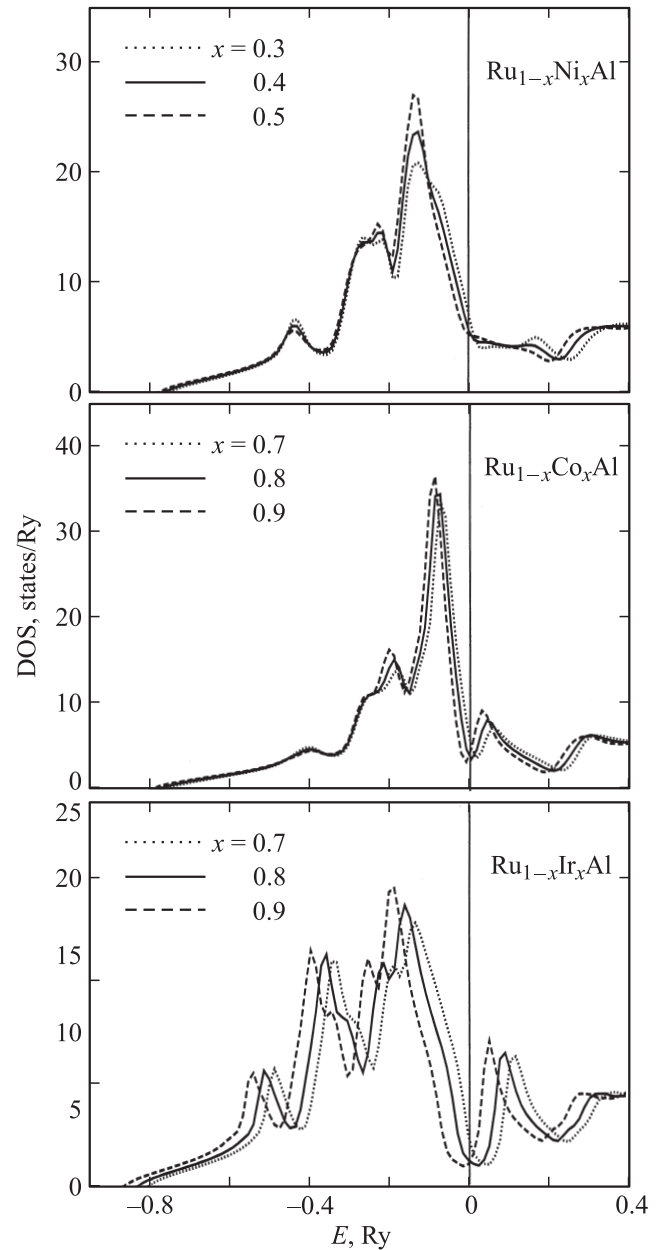


Рис. 6. Плотность электронных состояний в „критических“ концентрационных интервалах для $Ru_{1-x}Ni_xAl$ ($x = 0.3-0.5$) и для $Ru_{1-x}Co_xAl$, $Ru_{1-x}Ir_xAl$ ($x = 0.7-0.9$).

как в случае легирования атомами Fe число состояний на уровне Ферми монотонно увеличивается с ростом концентрации Fe. Это обусловлено тем, что в наших расчетах FeAl рассматривался как немагнитный материал, имеющий, следовательно, более высокую плотность состояний, для которой выполняется критерий Стонера. Как известно, традиционные *ab initio* методы неправильно описывают обменно-корреляционные эффекты в сильно коррелированных системах, вследствие чего завышают плотность состояний на уровне Ферми. Мы полагаем, что правильный учет обменно-корреляционных эффектов (или же отталкивания d -электронов Fe) изменит

наклон этой кривой, и с учетом DOS из [56] зависимость $N(E_F)$ в $Ru_{1-x}Fe_xAl$ станет постоянной. Если в качестве легирующего элемента выступает Ni, то на графике имеется довольно резкий минимум в районе 42 at.% Ni, что указывает на значительное изменение межатомного взаимодействия в сплаве. В случае легирования атомами Co и Ir внешний вид кривых качественно совпадает: они имеют минимум при концентрации легирующего элемента в области 80–85 at.%. Поведение DOS в указанных интервалах представлено на рис. 6, где также видно, что свойства этих сплавов могут быть описаны в рамках модели жесткой зоны. При этом форма DOS для сплавов (Ru, Ir)Al и (Ru, Co)Al остается практически неизменной, сдвигается только уровень Ферми. Для (Ru, Ni)Al-сплавов значительно меняется также главный пик — он становится острее.

Как было показано в [29], особенности в поведении зависимости числа состояний на уровне Ферми являются причиной наличия особенностей в зависимостях упругих констант от концентрации легирующего элемента.

4. Заключение

Электронная структура, параметр решетки и модуль всестороннего сжатия жаропрочных сплавов на основе $B2RuAl$ определены при помощи метода точных МТ-орбиталей и приближения когерентного потенциала. Полученные значения периода решетки и модуля всестороннего сжатия находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными и результатами ранее проведенных теоретических расчетов. Наблюдаемое отклонение от линейной зависимости периода решетки и модуля всестороннего сжатия и легирования Ni, Co, Fe объясняется изменением природы химической связи — усилением ковалентной составляющей при увеличении концентрации легирующего элемента. В случае легирования Ir наблюдается монотонный линейный рост (в пределах ошибки расчетов) модуля всестороннего сжатия, а период решетки остается практически постоянным. Последнее объясняется чрезвычайно малым различием атомных радиусов у Ru и Ir. Этот факт представляет интерес для возможных практических приложений сплавов (Ru, Ir)Al. Положение уровня Ферми в DOS в зависимости от содержания легирующего металла показывает применимость модели жесткой зоны для сплавов (Ru, Me)Al, при этом значение $N(E_F)$ проходит через минимум для Ni(42%) и Co, Ir (~82%). Уменьшение $N(E_F)$ свидетельствует об изменениях в межатомных взаимодействиях в сторону ковалентной (направленной) связи, что может привести к упрочнению сплава.

Список литературы

[1] R.L. Fleischer. *J. Mater. Sci.* **22**, 2281 (1987).
 [2] R. Fleischer, R. Gilmore, R. Zabala. *Acta Met.* **37**, 2801 (1986).

[3] R.L. Fleischer, A.I. Taub. *J. Metals* **41**, 8 (1989).
 [4] D. Anton, D. Shah, D. Duhl, A. Giamei. *J. Metals* **41**, 12 (1989).
 [5] R. Fleischer, R. Zabala. *Met. Mater. Trans. A* **21**, 2709 (1990).
 [6] R. Fleischer. In: *Intermetallic compounds* / Eds J. Westbrook, R. Fleischer. Wiley, N. Y. (1994). V. 2. P. 237.
 [7] *Binary alloy phase diagrams* /Eds T.B. Massalski, H. Baker, L.H. Bennett, J.L. Murray. ASM International, Materials Park (1986). 2224 p.
 [8] R. Fleischer, D. McKee. *Met. Mater. Trans. A* **24**, 759 (1993).
 [9] R. Fleischer, R. Field, C. Mriant. *Met. Mater. Trans. A* **22**, 403 (1991).
 [10] D.C. Lu, T.M. Pollock. *Acta Mater.* **47**, 1035 (1999).
 [11] W. Wopershow, C. Raub. *Metallwissenschaft Technik* **33**, 736 (1979).
 [12] E.G. Smith, C.I. Lang. *Scripta Met. Mater.* **33**, 1225 (1995).
 [13] S.A. Anderson, C.I. Lang. *Scripta Mater.* **38**, 493 (1998).
 [14] F. Soldera, N. Ilić, S. Brännström, I. Barrientos, H. Gobran, F. Mücklich. *Oxidation Metals* **59**, 529 (2003).
 [15] F. Mücklich, N. Ilić. *Intermetallics* **13**, 5 (2005).
 [16] I.J. Horner, N. Hall, L.A. Cornish, M.J. Witcomb, M.B. Cortie, T.D. Boniface. *J. Alloys Comp.* **264**, 173 (1998).
 [17] I.M. Wolff, G. Sauthoff. *Acta Mater.* **45**, 2949 (1997).
 [18] P. Gargano, H. Mosca, G. Bozzolo, R.D. Noebe. *Scripta Mater.* **48**, 695 (2003).
 [19] A. Sabariz, G. Taylor. In: *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, V. 460. Pittsburgh, PA, USA: MRS (1997). P. 611.
 [20] S. Chakravorty, D. West. *Scripta Met.* **19**, 1355 (1985).
 [21] S. Chakravorty, D. West. *J. Mater. Sci.* **21**, 2721 (1986).
 [22] K.W. Liu, F. Mücklich, W. Pitschke, R. Birringer, K. Wetzig. *Mater. Sci. Eng. A* **313**, 187 (2001).
 [23] R. Fleischer. *Acta. Met. Mater.* **41**, 863 (1993).
 [24] R. Fleischer. *Acta. Met. Mater.* **41**, 11997 (1993).
 [25] P.J. Hill, L.A. Cornish, M.J. Witcomb. *J. Alloys Comp.* **280**, 240 (1998).
 [26] L. Cornish, M. Witcomb, P. Hill, I. Horner. *South African J. Sci.* **95**, 517 (1999).
 [27] R. Fleischer. *J. Mater. Sci. Lett.* **7**, 525 (1988).
 [28] G.H. Bozzolo, R.D. Noebe, C. Amador. *Intermetallics* **10**, 149 (2002).
 [29] I.D. Bleskov, E.A. Smirnova, Y.K. Bekilov, P.A. Korzhavii, B. Johansson, M. Katsnelson, L. Vitos, I.A. Abrikosov, E.I. Isaev. *Appl. Phys. Lett.* **94**, 161901 (2009).
 [30] L. Vitos. *Computational quantum mechanics for materials engineers*. Springer, London (2007), 237 p.
 [31] L. Vitos, I.A. Abrikosov, B. Johansson. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 156401 (2001).
 [32] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
 [33] O.L. Anderson. *Equations of state of solids for geophysics and ceramic science*. Oxford University Press, Oxford (1995). 405 p.
 [34] Е.В. Шалаева, Н.И. Медведева, И.Р. Шеин. *ФТТ.* **49**, 1195 (2007).
 [35] C. Jiang, B. Gleeson. *Acta Mater.* **54**, 4101 (2006).
 [36] T. Abe, C. Kocer, M. Ode, H. Murakami, Y. Yamabe-Mitarai, K. Hashimoto, H. Onodera. *Calphad* **32**, 686 (2008).
 [37] S.H. Yang, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, M.B. Scott. *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, 1895 (2002).
 [38] W. Obrowski. *Naturwissenschaften* **47**, 14 (1960).

- [39] M. Mehl, B. Klein, D.A. Papaconstantopoulos. In: Intermetallic compounds: principles and practice / Eds J. Westbrook, R. Fleischer. John Wiley and Sons, London (1995). V. 1. P. 195.
- [40] R.L. Fleischer. ISIJ International **31**, 1186 (1991).
- [41] D. Nguyen-Manh, D.G. Pettifor. Intermetallics **7**, 1095 (1999).
- [42] W. Lin, J.-H. Xu, A. Freeman. J. Mater. Res. **7**, 592 (1992).
- [43] G. Simmons, H. Wang. Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: a handbook. MIT Press, Cambridge, MA, USA (1971). 370 p.
- [44] W.B. Pearson. A handbook of lattice spacings and structures of metals and alloys. International series of monographs on metal physics and physical metallurgy. Pergamon Press, N. Y. (1967). 1044 p.
- [45] T. Li, J.W. Morris, D.C. Chrzan. Phys. Rev. B **70**, 054 107 (2004).
- [46] C.J. Smithells. Metals reference book. Butterworths Sci. Publ., Ltd., London (1962). V. 2. 2080 p.
- [47] P. Villars, L. Calvert. Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases. ASM, Metals Park, OH USA (1985). 2886 p.
- [48] N.I. Medvedeva, Y.N. Gornostyrev, D.L. Novikov, O.N. Mryasov, A.J. Freeman. Acta Mater, **46**, 3433 (1998).
- [49] V. Moruzzi, P.M. Marcus. Phys. Rev. B **47**, 7878 (1993).
- [50] H. Leamy. Acta Met. **15**, 1839 (1967).
- [51] P. Esslinger, K. Schubert. Z. Metallkunde **48**, 126 (1957).
- [52] K. Axler, R. Roof. In: Advances in X-ray analysis. Plenum Press, N. Y., USA (1986). V. 29. P. 333.
- [53] H. Schulz, K. Ritapal, W. Bronger, W. Klemm. Z. Anorg. Allgem. Chem. **357**, 299 (1968).
- [54] A. Chiba, T. Ono, X.G. Li, S. Takahashi. Intermetallics **6**, 35 (1998).
- [55] L. Hedin, B.I. Lundqvist. J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 2064 (1971).
- [56] P. Mohn, C. Persson, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novák, H. Eschrig. Phys. Rev. Lett. **87**, 196 401 (2001).
- [57] B. Meyer, V. Schott, M. Fähnle. Phys. Rev. B **58**, R 14 673 (1998).