

01.05.11

## Исследования из первых принципов структурных свойств сплавов Гейслера Co–Ni–Sn

© А.А. Саносян<sup>1</sup>, В.В. Соколовский<sup>1,2</sup>, О.Н. Мирошкина<sup>1,3</sup>, В.Д. Бучельников<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Челябинский государственный университет,  
Челябинск, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“,  
Москва, Россия

<sup>3</sup> Университет Дуйсбурга–Эссена,  
Дуйсбург, Германия

E-mail: arthursanosyan@mail.ru

Поступила в Редакцию 8 июля 2021 г.

В окончательной редакции 13 июля 2021 г.

Принята к публикации 16 июля 2021 г.

С помощью первопринципного подхода исследованы структурные и магнитные свойства сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1-x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ). Получены зависимости полной энергии кристаллической структуры от степени тетрагональных искажений и выявлено наиболее выгодное кристаллическое упорядочение. Для всех рассматриваемых композиций вычислена энергия магнитокристаллической анизотропии. Показано, что все композиции с обратной гейслеровской структурой обладают анизотропией типа „легкая плоскость“, тогда как в случае регулярной гейслеровской структуры наблюдается смена типа анизотропии с типа „легкая плоскость“ на „легкую ось“ с увеличением содержания Ni. Наибольшая величина анизотропии обнаружена для нестехиометрических композиций  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1.5}\text{Sn}_{0.5}$  и  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1.75}\text{Sn}_{0.25}$ .

**Ключевые слова:** сплавы Гейслера, магнитокристаллическая анизотропия, структурные свойства, устойчивость сплавов.

DOI: 10.21883/FTT.2021.11.51570.12s

### 1. Введение

Современный мир невозможно представить без постоянных магнитов на основе магнитотвердых материалов. Они используются при производстве как ставших уже давно привычными аппаратов, так и только появляющихся высокотехнологичных устройств. Примерами могут служить телефоны, наушники, микроволновые устройства, дисковые накопители и другая техника, неотъемлемой частью которой являются постоянные магниты. В производстве магнитотвердые материалы применяются при сортировке отходов, очистке мелкодисперсных составов от металлических примесей, магнитно-резонансных исследованиях и робототехнике. Важное место постоянные магниты занимают также в передовых экологически безопасных технологиях при конструировании электродвигателей и ветряных турбин.

В новейших технологиях наиболее популярными постоянными магнитами являются высокоэнергетические редкоземельные составы на основе Nd, Dy и Sm [1–7]. Их уникальность объясняется высокими показателями намагниченности, коэрцитивной силы и магнитокристаллической анизотропии (МКА), обусловленными сильным спин-орбитальным взаимодействием. В результате чего несколько граммов такого сплава (например,  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ) [1] обладают магнитными характеристиками, сопоставимыми по величине с килограммом карбоновой стали, что позволяет создавать новые миниатюрные

высокотехнологичные устройства. Однако высокая стоимость редкоземельных постоянных магнитов препятствует их массовому производству. В связи с этим перед фундаментальной и прикладной наукой стоят задачи поиска и разработки технологии получения высокоэнергетических магнитотвердых материалов, не содержащих редкоземельных элементов. С фундаментальной точки зрения, материал может претендовать на роль постоянного магнита, если он характеризуется высокими значениями спонтанной намагниченности (магнитным моментом), одноосной анизотропии и температуры Кюри. Известно, что магнитные материалы с малой симметрией кристаллической решетки имеют естественный показатель пространственной анизотропии, что дает возможность получить на них большие значения МКА. Можно полагать, что соединения с низкой симметрией кристаллической структуры также могут представлять интерес в производстве постоянных магнитов нового поколения.

Поиски материалов с такими характеристиками активно ведутся среди бинарных соединений Fe–Ni [8–10], Fe–N [11], Fe–B [12], Co–Ni, Mn–Al, Mn–Ga [8], а также трех- и четырехкомпонентных соединений на их основе: Fe–Co–C [13], Fe–P–B с добавкой Co [14], Fe–Si–B с добавками P, S, и Co [15], Fe–Co–B [12,16]. В течение последних десятилетий на роль постоянных магнитов серьезно рассматриваются сплавы Гейслера  $X_2YZ$ . В ряде работ [17–19], посвященных первопринцип-

ным исследованиям новых магнитотвердых материалов, рассматривались сплавы Гейслера на основе Ni [17,18], Fe [18,19], Co [18,19], Rh, Au, Mn, а также бинарные составы Fe<sub>3</sub>Ga и Fe<sub>3</sub>Ge [18]. Следует отметить, что в сплавах Гейслера могут наблюдаться тетрагональные искажения кристаллической структуры, вызванные особенностями плотности электронных состояний на уровне Ферми. Таким образом, есть основания полагать, что они должны обладать высокой МКА. В работе [17] для сплавов Ni<sub>2</sub>YZ, где Y = Mn, Fe, Co и Z = V, Al, Ga, In, Si, Ge, Sn исследовано влияние элементов Y и Z, добавки четвертого элемента, а также деформации решетки на энергию МКА. В работе [19] рассмотрены сплавы Fe<sub>2</sub>YZ (Y = Ni, Co, Pt) и Co<sub>2</sub>YZ (Y = Ni, Fe, Pt), где Z = Al, Ga, Ge, In, Sn для обеих серий. Показано, что для семейств Co<sub>2</sub>NiZ, Co<sub>2</sub>PtZ и Fe<sub>2</sub>PtZ, а также стехиометрических композиций Fe<sub>2</sub>NiGe и Fe<sub>2</sub>NiSn с тетрагональной структурой L1<sub>0</sub> значения МКА лежат в диапазоне от -12 MJ/m<sup>3</sup> для Co<sub>2</sub>PtAl до +5.19 MJ/m<sup>3</sup> для Fe<sub>2</sub>PtGe. Для композиций, не содержащих атомов Pt, энергия МКА значительно меньше по величине: от -2.38 MJ/m<sup>3</sup> для Co<sub>2</sub>NiGa до 1.09 MJ/m<sup>3</sup> для Fe<sub>2</sub>NiSn. В данном случае отрицательный знак говорит о МКА „легкая плоскость“, а положительный — „легкая ось“. Важно отметить, что в большинстве теоретических работ рассматриваются стехиометрические композиции, и мало внимания уделяется исследованиям роли химического и атомного беспорядка в вопросах усиления МКА.

Настоящая работа посвящена исследованию структурных и магнитных свойств сплавов Гейслера Co–Ni–Sn нестехиометрического состава с целью исследования влияния химического беспорядка и атомного упорядочения на МКА. Сообщается, что стехиометрический состав Co<sub>2</sub>NiSn в обратной тетрагональной структуре обладает нулевой МКА [19] и демонстрирует тенденцию к декомпозиции [20] на Co, Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub> и CoNi<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub>. В связи с этим интересным представляется рассмотреть возможность стабилизации данного сплава посредством добавки избыточных атомов Co и оценить МКА в получившихся нестехиометрических композициях Co<sub>2</sub>Ni<sub>1+x</sub>Sn<sub>1-x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1).

## 2. Детали вычислений

Первопринципные расчеты выполнены с помощью программного пакета VASP [21,22] в рамках приближения обобщенного градиента (generalized gradient approximation, GGA), реализованного в функционале Пердю, Бурке и Эрнзерхофа (Perdew, Burke, Ernzerhof, PBE) [23]. Вычисления выполнены на 16-атомной супер-ячейке для двух типов кристаллических структур (рис. 1). Прямая гейслеровская структура L2<sub>1</sub> (пространственная группа *Fm*-3*m*, № 225, прототип Cu<sub>2</sub>MnAl) задается следующим атомным упорядочением: атомы Co располагаются в эквивалентных позициях 8*c* (1/4, 1/4, 1/4) и (3/4, 3/4, 3/4), в то время как атомы

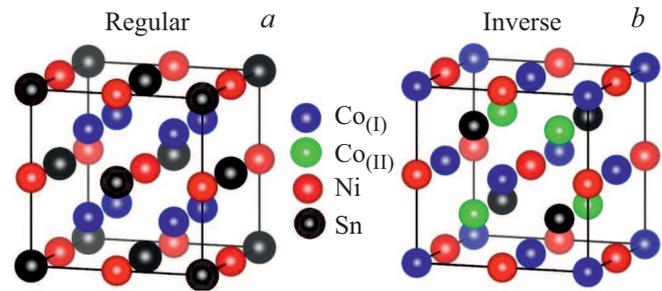


Рис. 1. Прямая и обратная кристаллические структуры сплавов Гейслера Co–Ni–Sn.

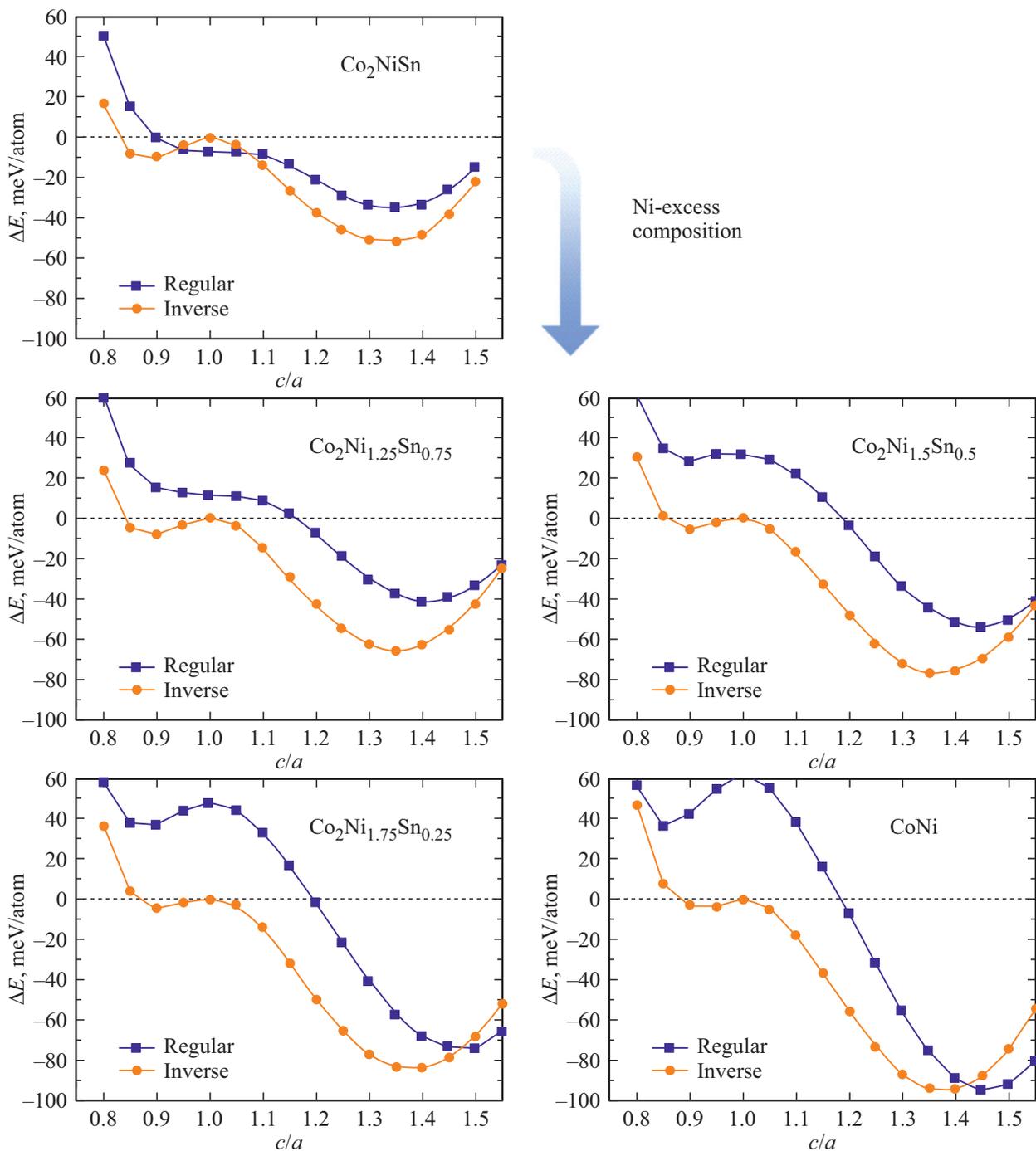
Sn и Ni занимают 4*a* (0,0,0) и 4*b* (1/2, 1/2, 1/2) позиции Вайкоффа, соответственно. Обратная гейслеровская структура (пространственная группа *F*-43*m*, № 216, прототип Hg<sub>2</sub>TiCu) характеризуется расположением атомов Co в неэквивалентных 4*a* (0,0,0) и 4*c* (1/4, 1/4, 1/4) позициях, тогда как Ni и Sn занимают 4*b* (1/2, 1/2, 1/2) и 4*d* (3/4, 3/4, 3/4) узлы, соответственно.

Расчеты тетрагональных искажений выполнены при условии равенства объемов аустенитной и мартенситной фаз:  $a_0^3 = a_t^2 c$ . Здесь  $a_0$  и  $a_t$ ,  $c$  — равновесные параметры кубической и тетрагональной решеток, соответственно. Величина кинетической энергии обрезания составляет 700 eV, а кинетической энергии обрезания плоских волн — 500 eV. Выбор точек обратной решетки ( $k$ -точек) осуществлен автоматически при помощи метода Монкхорста–Пака на сетке  $16 \times 16 \times 16$ .

Энергия магнитокристаллической анизотропии (magneto-crystalline anisotropy energy, MAE) определена следующим образом:  $MAE = E_{100} - E_{001}$ , где  $E_{100}$  и  $E_{001}$  — полные энергии сплавов для случаев ориентации магнитных моментов атомов по направлениям [001] и [100], соответственно. Отрицательный знак MAE указывает на МКА вдоль легкой плоскости, а положительный — вдоль легкой оси. Расчеты MAE реализованы в два этапа. Изначально выполнены самосогласованные расчеты для структуры с коллинеарным упорядочением спиновых магнитных моментов. Затем исследовано неколлинеарное магнитное упорядочение с учетом спин-орбитального взаимодействия. В данном случае расчеты выполнены для ориентаций спинов вдоль [001] и [100].

## 3. Результаты и обсуждение

Зависимости полной энергии сплавов Co<sub>2</sub>Ni<sub>1+x</sub>Sn<sub>1-x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) от степени тетрагональности  $c/a$  для прямой и обратной гейслеровских структур представлены на рис. 2. Для всех композиций кривые  $E(c/a)$  не демонстрируют минимума при  $c/a = 1$ , свидетельствуя об энергетической невыгодности кубической структуры. Данный факт подтверждается расчетами в рамках полной геометрической оптимизации (ионной

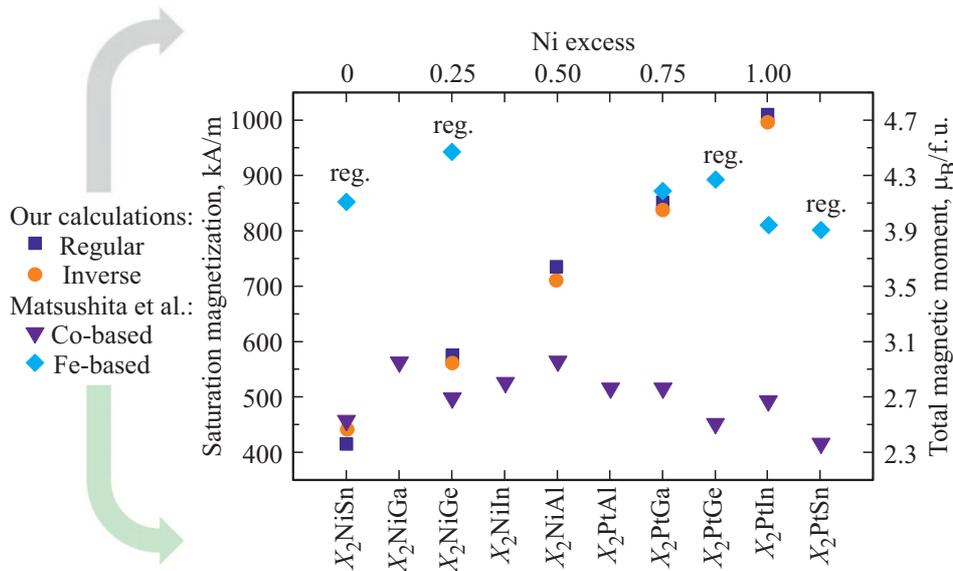


**Рис. 2.** Полная энергия сплавов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) как функция степени тетрагональных искажений  $c/a$  для случаев прямой и обратной гейслеровских структур. За ноль взята полная энергия сплава в обратной гейслеровской структуре при  $c/a = 1$ .

релаксации), которая показывает, что кубическая симметрия в данных сплавах не сохраняется.

Расчеты показывают, что все исследуемые композиции обладают обратной тетрагональной структурой в мартенситной фазе, являющейся энергетически выгодной. Для всех композиций соотношение тетрагональности  $c/a$  мартенситной фазы близко к 1.35, за исключением бинарного соединения  $\text{CoNi}$  ( $c/a = 1.4$ ). Кроме того,

из рис. 2 можно видеть, что энергетические решения для прямой гейслеровской структуры также демонстрируют минимумы при  $c/a \approx 1.45$ . Увеличение концентрации Ni приводит к уменьшению разницы энергий между прямой и обратной структурой. Данная разница становится минимальной ( $\Delta E \approx 0.43$  meV/atom) для композиции  $\text{CoNi}$ , что говорит о наличии вырожденного состояния в мартенситной фазе. Отметим, что возможность существова-



**Рис. 3.** Намагниченность насыщения серии сплавов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) в сравнении с другими сплавами Гейслера на основе Co и Fe [19]. Результаты расчетов и литературные данные приведены для мартенситных фаз в обратной гейслеровской структуре за исключением композиций на основе Fe с прямой решеткой, отмеченных на рисунке как „reg.“. Справа для удобства представлена шкала полных магнитных моментов сплавов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ). Для бинарного соединения ( $x = 1$ ) величина полного магнитного момента представлена из расчета на 4 атома в формульной единице ( $\text{Co}_2\text{Ni}_2$ ).

ния мартенситной фазы является чрезвычайно важной, так как тетрагональная структура может обладать ненулевой энергией магнитокристаллической анизотропии.

Равновесные параметры для композиций с прямой и обратной гейслеровской структурой чувствительны к содержанию Ni и Sn, демонстрируют тенденцию к их уменьшению при снижении концентрации Sn. Данное наблюдение может быть обусловлено большим атомным радиусом Sn по сравнению с Co и Ni. Напротив, степень тетрагональности мартенсита для обоих типов решетки возрастает с уменьшением концентрации Sn (см. таблицу).

Важной характеристикой состава, претендующего на роль постоянного магнита, является высокая намагниченность насыщения ( $M_s$ ). На рис. 3 представлены результаты вычисления намагниченности насыщения

для исследуемой серии  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ), а также для сравнения приведены теоретические данные работы [19] для других сплавов Гейслера на основе Co и Fe [19]. Можно видеть, что величина  $M_s$  для  $\text{Co}_2\text{NiSn}$  согласуется с результатами теоретического исследования [19]. Авторы работы [19] показали, что намагниченность насыщения сплавов  $\text{Co}_2\text{NiZ}$  и  $\text{Co}_2\text{PtZ}$  лежит в пределах от 400 до 600 kA/m. По сравнению с ними, сплавы на основе Fe обладают в два раза большей  $M_s$ , причем для некоторых из них предсказана прямая гейслеровская структура. Таким образом видно, что сильное влияние на намагниченность насыщения стехиометрических сплавов  $X_2YZ$  оказывает элемент X, тогда как замена элементов Y и Z сказывается незначительно. Однако из наших расчетов видно, что намагниченность насыщения можно значительно

Равновесные параметра решетки  $a$  и  $c$ , соотношение тетрагональности  $c/a$ , плотность сплава  $\rho$  и энергия МАЕ в  $[\text{MJ}/\text{m}^3]$ . Плотность сплава приведена для удобства перевода величин МАЕ из  $[\text{meV}/\text{f.u.}]$  в  $[\text{MJ}/\text{m}^3]$

X	Прямая гейслеровская структура					Обратная гейслеровская структура				
	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$c/a$	$\rho, \text{kg}/\text{m}^3$	МАЕ, $\text{MJ}/\text{m}^3$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$c/a$	$\rho, \text{kg}/\text{m}^3$	МАЕ, $\text{MJ}/\text{m}^3$
0	5.36	7.22	1.34	9457	-1.275	5.37	7.20	1.34	9434	-0.106
0.25	5.23	7.31	1.40	9305	-0.404	5.31	7.08	1.33	9317	-1.106
0.50	5.10	7.36	1.44	9187	0.675	5.18	7.01	1.35	9362	-1.792
0.75	5.01	7.30	1.45	9080	1.874	5.11	7.00	1.37	9097	-0.661
1.0	4.92	7.18	1.46	8998	1.216	5.02	6.90	1.38	8997	-0.396

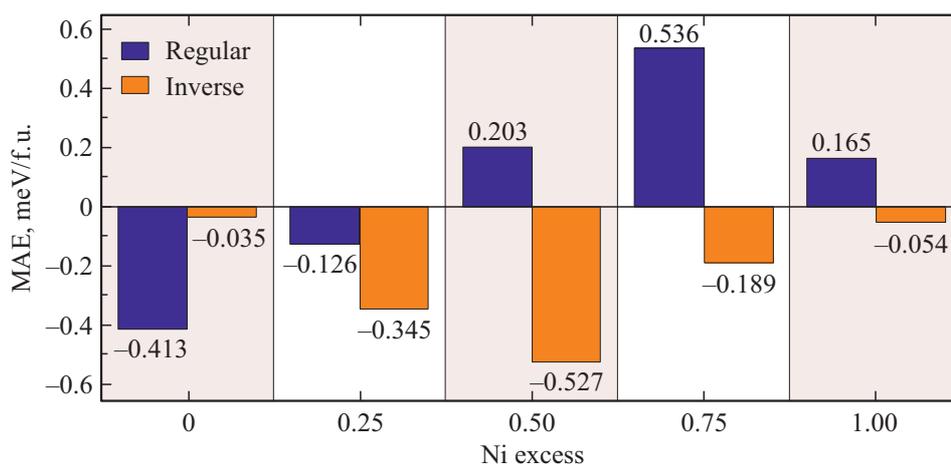


Рис. 4. Магнитокристаллическая анизотропия сплавов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) в мартенситной фазе.

увеличить путем введения химического беспорядка. Так,  $M_s$  монотонно увеличивается с ростом концентрации избыточных атомов Ni в исследуемой серии композиций Co–Ni–Sn. В результате можно видеть, что величина намагниченности насыщения сплава  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1.75}\text{Sn}_{0.25}$  практически равна  $M_s$  сплава  $\text{Fe}_2\text{PtGa}$ , который будет значительно дороже в производстве из-за входящей в его состав Pt. Намагниченность бинарной композиции CoNi является наибольшей среди всех рассмотренных соединений и составляет 1010 и 998 kA/m для прямой и обратной структур, соответственно.

На рис. 4 представлены результаты вычисления магнитокристаллической анизотропии сплавов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) в мартенситной фазе. Все сплавы с обратным кристаллическим упорядочением демонстрируют отрицательные значения MAE (анизотропия типа „легкая плоскость“), причем, магнитокристаллическая анизотропия увеличивается по модулю с малой добавкой Ni и достигает максимального абсолютного значения ( $-0.527$  eV/f.u. или  $-1.79$  MJ/m<sup>3</sup>) при  $x = 0.5$ . Дальнейшее увеличение избытка Ni приводит к значительному уменьшению величины MAE: приблизительно в три раза для  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1.75}\text{Sn}_{0.75}$  и в четыре раза CoNi по сравнению с композицией  $x = 0.5$ .

В случае прямой решетки наблюдается знакопеременное поведение MAE, т.е. наблюдается смена типа анизотропии с типа „легкая плоскость“ на „легкую ось“ с увеличением содержания Ni. Особый интерес представляют композиции  $x \geq 0.5$ , обладающие ненулевой положительной MAE и, таким образом, наиболее перспективные с точки зрения их применимости в качестве постоянных магнитов. Наибольшим значением MAE = 0.536 meV/f.u. (1.8741 MJ/m<sup>3</sup>) обладает сплав  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1.75}\text{Sn}_{0.75}$ , тогда как в случае полного замещения Sn атомами Ni MAE уменьшается в 1.8 раза.

Для удобства сравнения в таблице представлены значения MAE в MJ/m<sup>3</sup>. В целом, можно видеть, что полученные результаты для нестехиометрических

составов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  являются близкими к значениям авторов работы [19]:  $\text{Co}_2\text{NiAl}$  ( $-2.11$  MJ/m<sup>3</sup>),  $\text{Co}_2\text{NiGa}$  ( $-2.38$  MJ/m<sup>3</sup>),  $\text{Co}_2\text{NiIn}$  ( $-2.22$  MJ/m<sup>3</sup>),  $\text{Co}_2\text{NiGe}$  ( $0.86$  MJ/m<sup>3</sup>) — сплавы с обратной гейслеровской тетрагональной структурой и  $\text{Fe}_2\text{NiGe}$  ( $1.07$  MJ/m<sup>3</sup>),  $\text{Fe}_2\text{NiSn}$  ( $1.09$  MJ/m<sup>3</sup>) — сплавы с прямой гейслеровской тетрагональной структурой.

#### 4. Заключение

В настоящей работе с помощью методов *ab initio* исследованы возможность структурных фазовых превращений и магнитные свойства сплавов Co–Ni–Sn с избытком Ni. Для всех составов  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) показано, что они кристаллизуются в тетрагональную фазу, тогда как кубическая фаза неустойчива. Ненулевая энергия магнитокристаллической анизотропии предсказана для всех композиций как в прямой, так и в обратной гейслеровских структурах. MAE обратной кристаллической решетки всегда отрицательна, т.е. магнитному моменту атомов Co и Ni выгодно ориентироваться вдоль плоскости. Напротив, в случае прямой решетки MAE демонстрирует знакопеременное поведение в зависимости от концентрации избытка Ni, и становится положительной при  $x \geq 0.5$ . Положительные значения энергии магнитокристаллической анизотропии соответствуют ориентации магнитных моментов вдоль осей тетрагональной симметрии и являются важной характеристикой материала как твердотельного магнита. Таким образом, композиции  $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$  при  $x \geq 0.5$  заслуживают особого внимания и продолжения исследования их магнитных свойств. Стоит также отметить, что помимо химического состава большую роль играет кристаллическое упорядочение, поэтому в будущем будет интересно рассмотреть другие типы атомного порядка и исследовать их влияние на величину магнитокристаллической анизотропии.

## Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Челябинской области в рамках научного проекта 20-42-740003.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] R. Skomski, J.M.D. Coey. Permanentmagnetism. Routledge (2019).
- [2] R.W. McCallum, L.H. Lewis, R. Skomski, M.J. Kramer, I.E. Anderson. *Annu. Rev. Mater. Res.* **44**, 1, 451 (2014).
- [3] J.M.D. Coey. *IEEE Trans. Magn.* **47**, 12, 4671 (2011).
- [4] J.M.D. Coey. *Scripta Mater.* **67**, 6, 524 (2012).
- [5] M.J. Kramer, R.W. McCallum, I.A. Anderson, S. Constantinides. *JOM* **64**, 7, 752 (2012).
- [6] K.P. Skokov, O. Gutfleisch. *Scripta Materialia* **154**, 289 (2018).
- [7] J. Mohapatra, J.P. Liu. *Handbook. Magn. Mater.* **27**, 1 (2018).
- [8] A. Edström, J. Chico, A. Jakobsson, A. Bergman, J. Ruzs. *Phys. Rev. B* **90**, 1, 014402 (2014).
- [9] M. Werwiński, W. Marciniak. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50**, 49, 495008 (2017).
- [10] L.-Y. Tian, H. Levämäki, O. Eriksson, K. Kokko, Á. Nagy, E.K. Déléczeg-Czirják, L. Vitos. *Sci. Rep.* **9**, 1, 8172 (2019).
- [11] S. Bhattacharjee, S.-C. Lee. *Sci. Rep.* **9**, 1, 8381 (2019).
- [12] L. Reichel, L. Schultz, D. Pohl, S. Oswald, S. Fähler, M. Werwiński, A. Edström, E.K. Delczeg-Czirjak, J. Ruzs. *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 47, 476002 (2015).
- [13] E.K. Delczeg-Czirjak, A. Edström, M. Werwiński, J. Ruzs, N.V. Skorodumova, L. Vitos, O. Eriksson. *Phys. Rev. B* **89**, 14, 144403 (2014).
- [14] M. Werwiński, A. Edström, J. Ruzs, D. Hedlund, K. Gunnarsson, P. Svedlindh, J. Cedervall, M. Sahlberg. *Phys. Rev. B* **98**, 21, 214431 (2018).
- [15] M. Werwiński, S. Kontos, K. Gunnarsson, P. Svedlindh, J. Cedervall, V. Höglin, M. Sahlberg, A. Edström, O. Eriksson, J. Ruzs. *Phys. Rev. B* **93**, 17, 174412 (2016).
- [16] A. Edström, M. Werwiński, D. Iuşan, J. Ruzs, O. Eriksson, K.P. Skokov, I.A. Radulov, S. Ener, M.D. Kuz'min, J. Hong, M. Fries, D.Yu. Karpenkov, O. Gutfleisch, P. Toson, J. Fidler. *Phys. Rev. B* **92**, 17, 174413 (2015).
- [17] H.C. Herper. *Phys. Rev. B* **98**, 1, 014411 (2018).
- [18] Q. Gao, I. Opahle, O. Gutfleisch, H. Zhang. *Acta Mater.* **186**, 1, 355 (2020).
- [19] Y.-I. Matsushita, G. Madjarova, J.K. Dewhurst, S. Shallcross, C. Felser, S. Sharma, E.K.U. Gross. *J. Phys. D* **50**, 9, 095002 (2017).
- [20] M. Klicpera, M. Kratochvílová, F. Malý, T. Kovaliuk, J. Valent, R.H. Colman. *Intermetallics* **130**, 1, 107060 (2021).
- [21] G. Kresse, J. Furthmüller. *Phys. Rev. B* **54**, 16, 11169 (1996).
- [22] G. Kresse, D. Joubert. *Phys. Rev. B* **59**, 3, 1758 (1999).
- [23] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 18, 3865 (1996).

Редактор *Е.В. Толстякова*