

01,09

## Структура электронных состояний соединений $Gd_5Sb_3$ и $Gd_5Ge_2Sb$ по данным зонных расчетов и оптической спектроскопии

© Ю.В. Князев<sup>1</sup>, А.В. Лукоянов<sup>1,2,¶</sup>, Ю.И. Кузьмин<sup>1</sup>, S. Shanmukharao Samatham<sup>3</sup>,  
Akhilesh Kumar Patel<sup>4,5</sup>, K.G. Suresh<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup> Department of Physics, Chaitanya Bharathi Institute of Technology, Gandipet, Hyderabad 500 075, India

<sup>4</sup> Department of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering, Tel Aviv University, Ramat Aviv, Tel Aviv 6997801, Israel

<sup>5</sup> Magnetic Materials Laboratory, Department of Physics, Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai 400076, Maharashtra, India

¶ E-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

Поступила в Редакцию 28 октября 2021 г.

В окончательной редакции 28 октября 2021 г.

Принята к публикации 28 октября 2021 г.

Представлены результаты исследования электронной структуры и оптических свойств интерметаллических соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$ . В приближении локальной электронной плотности с поправкой на сильные электронные взаимодействия в  $4f$ -оболочке редкоземельного иона (метод  $DFT + U + SO$ ) проведены расчеты зонного спектра. В широком интервале длин волн методом эллипсометрии измерены оптические постоянные данных материалов, определены энергетические зависимости ряда спектральных параметров. Природа квантового поглощения света обсуждается на основе сравнительного анализа экспериментальных и теоретических спектров межзонной оптической проводимости.

**Ключевые слова:** соединения  $Gd_5Sb_3$   $Gd_5Ge_2Sb$ , оптические свойства, электронная структура.

DOI: 10.21883/FTT.2022.03.52088.229

### 1. Введение

Бинарные интерметаллические соединения  $R_5M_3$  (где  $R$  — редкоземельный металл,  $M$  —  $p$ -элемент) кристаллизуются в гексагональной структуре  $Mn_5Si_3$ -типа, в которой элементарная ячейка состоит из пяти слоев атомов в направлении оси  $c$ . К настоящему времени синтезировано и изучено большое количество таких материалов. Соединения указанной серии характеризуются большим разнообразием магнитных свойств, в частности, наличием различных магнитных фаз, метамагнитных переходов, состояния спинового стекла, больших магниторезистивных и магнетокалорических эффектов [1–13]. В данной кристаллической структуре ионы редкоземельного металла локализованы в двух неэквивалентных кристаллографических позициях, формирующих различные  $R$ -подрешетки [14]. Это обстоятельство приводит к анизотропии внутренних магнитных взаимодействий, что является причиной образования неколлинеарных магнитных структур, а также сложному поведению температурных зависимостей магнитных и электронных параметров. Результаты экспериментальных исследований указывают на сильную взаимозависимость магнитных, электронных и структурных характеристик таких материалов. Для ряда соединений

этой серии были проведены расчеты энергетического спектра, в которых были вычислены атомные магнитные моменты и определена природа электронных состояний вблизи уровня Ферми  $E_F$  [15–19]. Электронная структура некоторых материалов данной группы исследована экспериментально методами фотоэмиссионной и оптической спектроскопии [17–21].

В последние годы повышенное внимание уделяется изучению интерметаллидов  $R_5M_3$ , где редкоземельным элементом является гадолиний. Такой интерес обусловлен тем, что в сходной по составу системе сплавов  $Gd_5(Ge_{4-x}Si_x)$  был обнаружен гигантский магнетокалорический эффект [22–24]. Исследовались магнитные и электронные свойства бинарных  $Gd_5M_3$  ( $M = Ge, Si, Bi, Sb$ ) [25–30], а также псевдобинарных сплавов, где  $p$ -элементы частично замещены другими металлами [31–34]. Данная работа посвящена изучению электронной структуры и оптических характеристик интерметаллидов  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$ . Ряд структурных, электронных и магнитных параметров этих материалов представлен в [30,34], где показано, что ниже температур  $T_N = 95.9$  К ( $Gd_5Sb$ ) и  $T_N = 136$  К ( $Gd_5Ge_2Sb$ ) соединения находятся в антиферромагнитном (АФМ) состоянии с неколлинеарным упорядочением спиновых моментов. Переход в АФМ-фазу характеризуется воз-

никновением сильных аномалий на температурных зависимостях намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости и электросопротивления.

## 2. Расчет электронной структуры

Электронная структура интерметаллидов  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$  моделировалась методом DFT +  $U$  + SO [35,36]. Этот *ab initio* вычислительный метод сочетает в себе приближение локальной плотности на основе теории функционала плотности (DFT) с поправками на электронные корреляции (+ $U$ ) и на спин-орбитальную связь (+SO) в  $4f$ -оболочке ионов гадолиния. В данном подходе орбитальный базис включал атомные состояния Gd ( $6s$ ,  $6p$ ,  $5d$ ,  $4f$ ), Ge ( $4s$ ,  $4p$ ,  $4d$ ) и Sb ( $5s$ ,  $5p$ ,  $5d$ ). Были взяты следующие радиусы маффин-тин орбиталей:  $R_{Gd} = 3.7$  а.у.,  $R_{Ge} = 3.0$  а.у. и  $R_{Sb} = 3.4$  а.у. Для учета эффектов электрон-электронных корреляций были использованы значения  $U$  (параметр кулоновского взаимодействия), равный  $6.7$  eV и  $J$  (параметр обменного взаимодействия), равный  $0.7$  eV для Gd  $4f$ . Данные значения  $U$  и  $J$  обычно используются для Gd в интерметаллических соединениях, например, [37–39]. Для достаточной сходимости полных энергий, использовалась точность  $10^{-7}$  Ry. Интегрирование в обратном пространстве производилось по сетке с  $k$  точками  $10 \times 10 \times 10 = 1000$  с использованием метода тетраэдров.

На рис. 1 и 2 для исследуемых интерметаллидов представлены энергетические зависимости полных и парциальных плотностей состояний  $N(E)$  для  $5d$ -,  $4f$ -

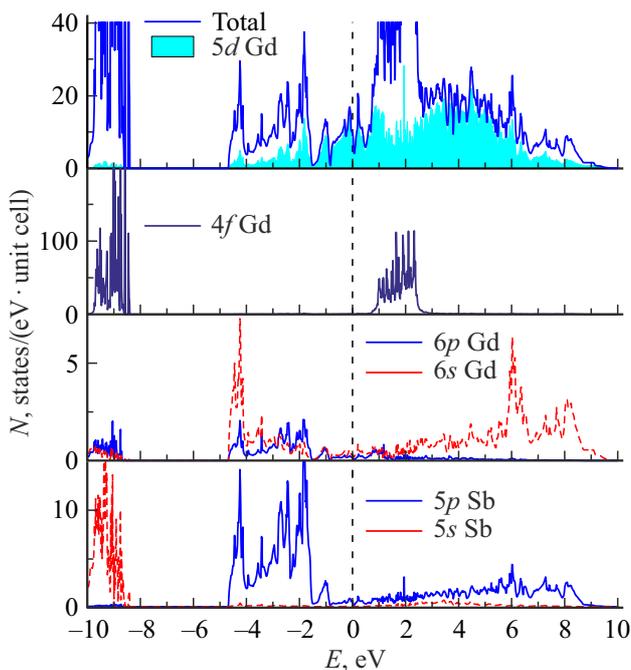


Рис. 1. Полная и парциальные плотности электронных состояний соединения  $Gd_5Sb_3$ .

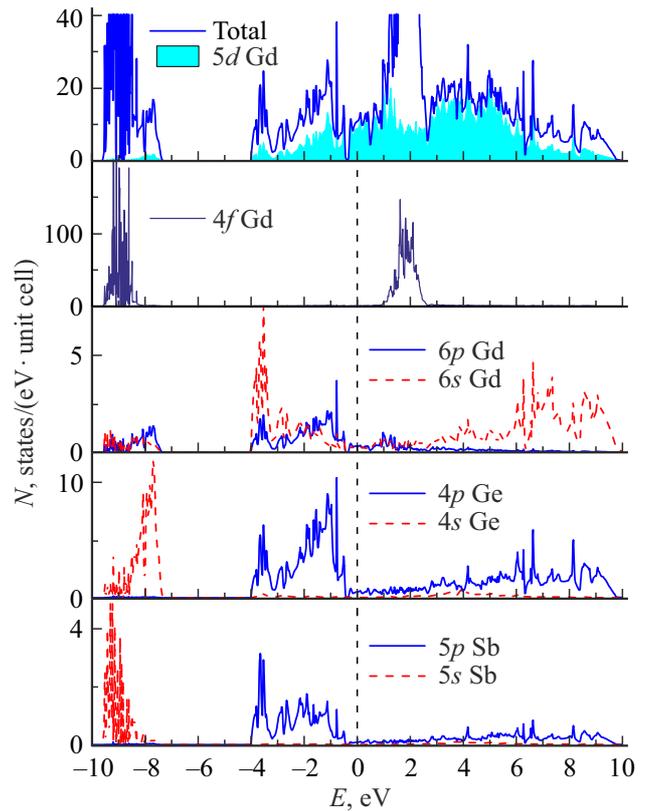


Рис. 2. Полная и парциальные плотности электронных состояний соединения  $Gd_5Ge_2Sb$ .

$6s$ - и  $6p$ -электронов Gd,  $5s$ - и  $5p$ -электронов Sb и  $4s$ -,  $4p$ -электронов Ge. Расчеты показали, что для обоих соединений в диапазоне  $-5 < E_F < 9$  eV спектр  $N(E)$  состоит из многочисленных максимумов, основной вклад в формирование которых связан с  $5d$ - и  $4f$ -электронами Gd. Вклады в  $N(E)$  от других парциальных плотностей распределены неравномерно по всей области энергий и существенно слабее по величине. Интенсивные всплески  $N(E)$  шириной  $\sim 1.5$  eV, наблюдаемые в интервалах  $8-9.5$  eV ниже  $E_F$  и  $1-3$  eV выше  $E_F$ , соответствуют парциальным плотностям  $4f$ -электронов Gd в заполненной и свободной зонах. Металлический характер проводимости соединений обеспечивается выходящими на уровень Ферми  $5d$ -состояниями гадолиния. В целом структурные особенности энергетических зависимостей полных плотностей состояний для обоих сплавов довольно схожи. Наблюдаемые различия связаны с изменениями, вносимыми в  $N(E)$  тройного соединения вкладом от  $4s$ - и  $4p$ -электронов Ge.

## 3. Эксперимент

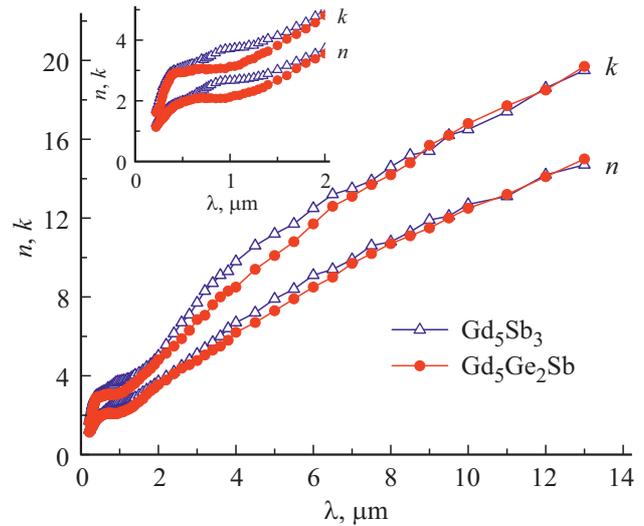
Исследуемые образцы соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$  были приготовлены методом дуговой плавки стехиометрических пропорций металлов высокой чистоты (99.99%) в атмосфере чистого аргона. Выплавленные

слитки с целью гомогенизации отжигались в вакууме в течение семи суток при температуре  $\sim 1000^\circ\text{C}$ . Рентгеноструктурный анализ порошковых образцов был проведен на дифрактометре высокого разрешения PANalytical X'Pert PRO в  $\text{CuK}\alpha$  излучении. Исследование фазового состава соединений и расчет параметров решетки выполнен на базе программы FullProf. Результаты анализа показали, что оба сплава кристаллизуются в однофазной гексагональной кристаллической структуре типа  $\text{Mg}_5\text{Si}_3$  с параметрами решетки  $a = b = 9.02\text{ \AA}$ ,  $c = 6.32\text{ \AA}$  ( $Gd_5Sb_3$ ) и  $a = b = 8.73\text{ \AA}$ ,  $c = 6.40\text{ \AA}$  ( $Gd_5Ge_2Sb$ ).

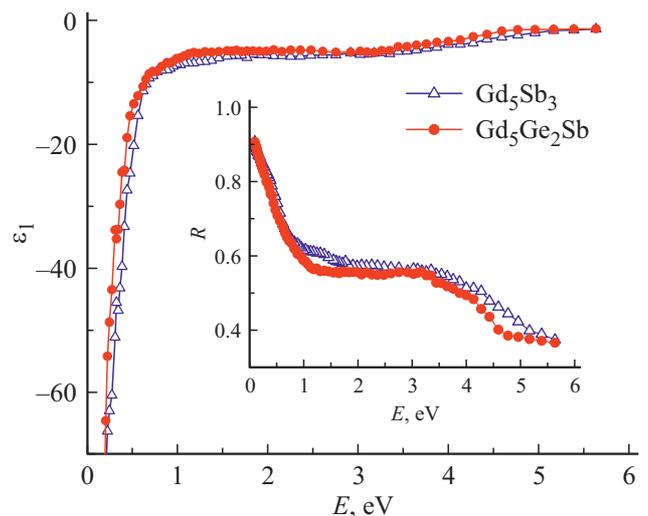
Оптические свойства образцов исследованы в интервале длин волн  $\lambda = 0.22\text{--}13\text{ }\mu\text{m}$  ( $0.095\text{--}5.64\text{ eV}$ ), включающем ультрафиолетовую, видимую и инфракрасную области спектра. Эллипсометрическим методом Битти, основанным на измерении амплитуд и разностей фаз отраженных световых волн  $s$ - и  $p$ -поляризации, были определены оптические постоянные соединений: показатели преломления  $n(\lambda)$  и коэффициенты поглощения  $k(\lambda)$ . Значения данных параметров использованы для расчета дисперсионных зависимостей ряда спектральных функций, характеризующих оптический отклик отражающей среды — действительной  $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$  и мнимой  $\varepsilon_2 = 2nk$  частей комплексной диэлектрической проницаемости, отражательной способности  $R = [(n-1)^2 + k^2] / [(n+1)^2 + k^2]$ , оптической проводимости  $\sigma = \varepsilon_2\omega / 4\pi$  ( $\omega$  — частота световой волны). Плоские зеркальные поверхности образцов, соответствующие 14 классу чистоты (высота неровностей  $\sim 0.01\text{ }\mu\text{m}$ ) были приготовлены полированием на алмазных пастах различной зернистости. Глубина проникновения света  $\delta = c/k\omega$  ( $c$  — скорость света) в исследуемом интервале длин волн возрастает от нескольких десятков (УФ-область) до нескольких сотен атомных слоев (ИК-диапазон), что позволяет рассматривать полученные оптические параметры как объемные характеристики изучаемых материалов.

#### 4. Результаты и обсуждение

Зависимости оптических постоянных  $n$  и  $k$  от длины волны для соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$  представлены на рис. 3 (на вставке выделен интервал  $\lambda < 2\text{ }\mu\text{m}$ ). С ростом  $\lambda$  наблюдается существенный рост этих величин, а выполнение соотношения  $k > n$  во всем диапазоне подтверждает металлический характер проводимости данных материалов. Характер изменения оптических постоянных обоих сплавов является монотонным за исключением коротковолнового диапазона, где имеется ряд структур в виде сглаженных максимумов. Рассчитанные по значениям  $n$  и  $k$  зависимости  $\varepsilon_1(E)$  и  $R(E)$  приведены на рис. 4. Поведение данных характеристик также типично для проводящих сред. Это проявляется в том, что действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости отрицательна при всех энергиях световых квантов, а отражательная способность с умень-



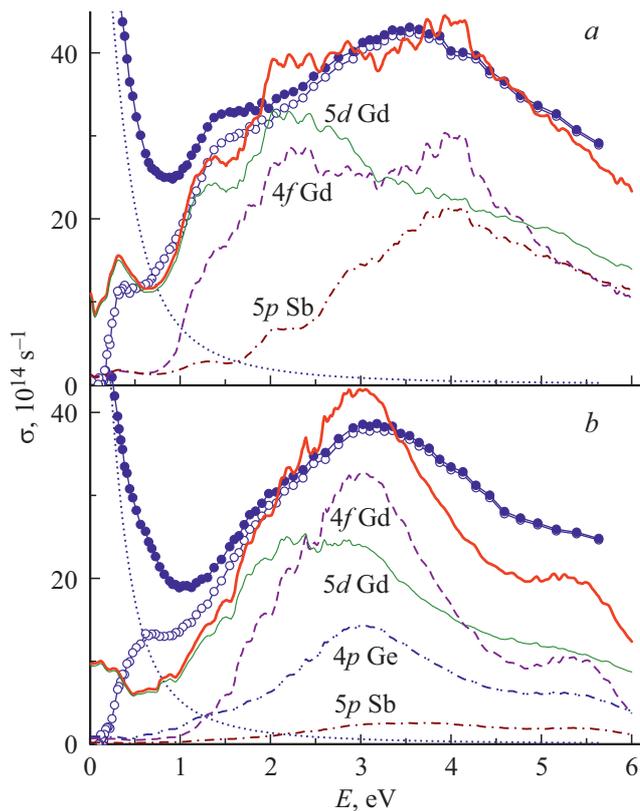
**Рис. 3.** Зависимости оптических постоянных  $n$  и  $k$  соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$  от длины волны света, падающего на образец. На вставке выделен коротковолновый интервал.



**Рис. 4.** Энергетические зависимости действительной части диэлектрической проницаемости и отражательной способности (вставка) соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$ .

шением частоты света существенно возрастает, достигая на низкоэнергетическом крае интервала значения 0.9.

Энергетические зависимости оптической проводимости  $\sigma(E)$  представлены на рис. 5 темными кружками. Данный параметр наиболее выразительно описывает частотные и амплитудные особенности спектрального отклика отражающей среды. В спектральном профиле указанных зависимостей отчетливо проявились две области, соответствующие различным механизмам фотовозбуждения электронов — внутри- и межзонному поглощению света. В ИК-области при  $E \lesssim 0.8\text{ eV}$  в спектрах  $\sigma(E)$  обоих соединений наблюдается резкий спад, соответствующий поглощению



**Рис. 5.** Спектры оптической проводимости соединений  $Gd_5Sb_3$  (a) и  $Gd_5Ge_2Sb$  (b). Темные кружки — эксперимент, светлые кружки — межзонный вклад, сплошные линии — расчет по полным плотностям состояний (в относительных единицах). Пунктирные линии — внутризонный вклад. Показаны также рассчитанные вклады от межзонных переходов с участием электронных состояний Gd 4f, 5d, Sb 5p и Ge 4p.

друдевского типа ( $\sigma \sim \omega^2$ ), при котором взаимодействие электрона с полем световой волны происходит в пределах одной энергетической зоны. В этом частотном интервале интерпретация оптических свойств, основанная на уравнении движения электрона в переменном электромагнитном поле [40], позволяет вычислить плазменные  $\omega_p = [\omega^2(n^2 + k^2)^2 / (k^2 - n^2)^2]^{1/2}$  и релаксационные  $\gamma = 2nk\omega / (k^2 - n^2)$  частоты носителей тока. Данные параметры определяют, соответственно, частоты коллективных колебаний и рассеяния электронов проводимости и принимают значения  $\omega_p = 7.0 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $\gamma = 5.1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$  ( $Gd_5Sb_3$ ) и  $\omega_p = 7.1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $\gamma = 5.3 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$  ( $Gd_5Ge_2Sb$ ). Соотношение  $N = \omega_p^2 m / 4\pi e^2$  позволяет рассчитать концентрации электронов проводимости исследуемых материалов, которые близки по величине и составляют  $N \sim 8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Полученные значения  $\omega_p$  и  $\gamma$ , согласно выражению  $\sigma_D(E) = \omega_p^2 \gamma / 4\pi(\omega^2 + \gamma^2)$ , дают возможность выделить друдевский вклад в оптическую проводимость каждого соединения. Соответствующие энергетические зависимости  $\sigma_D(E)$  представлены для обоих интерметаллидов пунктирными линиями. Ход этих

кривых показывает, что при  $E \lesssim 2 \text{ eV}$  внутризонные и межзонные вклады в оптическую проводимость сосуществуют, а выше указанной энергии роль внутризонного механизма поглощения света становится практически несущественной.

Принципиально другой характер поведения зависимостей  $\sigma(E)$  наблюдается в интервале энергий выше  $E \gtrsim 1 \text{ eV}$  (видимая и УФ-области). В данном диапазоне доминирует механизм квантового поглощения света, обусловленный переходами электронов из занятых состояний в свободные. С этим механизмом связано возникновение ряда особенностей, форма которых индивидуальна для каждого материала и определяется его электронной структурой. Спектры  $\sigma(E)$  исследуемых соединений в этом диапазоне также существенно различаются: если широкая полоса поглощения в  $Gd_5Sb_3$  характеризуется двумя максимумами (вблизи 1.5 и 3.5 eV), то в соответствующей зависимости для  $Gd_5Ge_2Sb$  присутствует один максимум при  $\sim 3 \text{ eV}$ . Вклады межзонного поглощения  $\sigma_{\text{inter}}(E)$  в оптическую проводимость каждого интерметаллида (светлые кружки на рис. 5) выделены путем вычитания внутризонных составляющих из экспериментальных зависимостей  $\sigma_{\text{inter}}(E) = \sigma(E) - \sigma_D(E)$ .

Основной особенностью спектров  $\sigma_{\text{inter}}(E)$  в данных соединениях является высокий уровень межзонного поглощения почти во всем исследуемом интервале энергий. Для понимания его природы имеет смысл сделать сравнение экспериментальных зависимостей  $\sigma_{\text{inter}}(E)$  с теоретическими кривыми, полученными из плотностей электронных состояний (рис. 1 и 2). Такое сопоставление представлено на рис. 5, где рассчитанные межзонные проводимости показаны непрерывными линиями. Вычисления проведены в соответствии с методом [41] на основе сверток полных плотностей состояний ниже и выше уровня Ферми. Ввиду качественного характера расчета, выполненного при условии равной вероятности всех типов электронных переходов, указанные зависимости представлены в относительных единицах. Структура данных кривых, в целом, довольно хорошо воспроизводит характер дисперсии эмпирических зависимостей, а также локализацию и протяженность основных особенностей, хотя в мелких деталях полная корреляция не наблюдается. На рис. 5 также представлены расчеты наиболее значительных парциальных вкладов в  $\sigma_{\text{inter}}(E)$ , связанных с различными электронными состояниями. Доминирующие вклады, как показывает рисунок, в обоих соединениях формируются квантовыми переходами с участием 5d- и 4f-электронов Gd. В  $Gd_5Sb_3$  существенный вклад в межзонное оптическое поглощение вносят переходы, захватывающие 5p-электроны Sb, а в  $Gd_5Ge_2Sb$  — 4p-электроны Ge. Поглощение с участием других типов межзонных переходов существенно слабее и не показано на рисунке. Таким образом, проведенное сравнение показывает, что интенсивное межзонное поглощение в исследуемых материалах имеет близкий по природе характер. В целом качественное сходство спектрального профиля экспериментальных и теоретических

зависимостей  $\sigma_{\text{inter}}(E)$  свидетельствует, что проведенные расчеты электронной структуры дают адекватное описание оптических свойств данных соединений.

## 5. Заключение

В работе представлены результаты LDA +  $U$  + SO вычислений электронной структуры интерметаллических соединений  $Gd_5Sb_3$  и  $Gd_5Ge_2Sb$ . Расчеты показали, что полная плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми определяется главным образом  $5d$ - и  $4f$ -состояниями Gd, а вклады, связанные с  $s$ - и  $p$ -состояниями Sb и Ge, имеют существенно меньшую величину. Методом эллипсометрии выполнены исследования оптических свойств данных материалов в интервале длин волн 0.22–13  $\mu\text{m}$ . На основе рассчитанных плотностей электронных состояний интерпретирована природа межзонного поглощения и возникновения главных структурных особенностей спектров оптической проводимости. Вычисленные энергетические зависимости  $\sigma_{\text{inter}}(E)$  качественно воспроизводят форму экспериментальных кривых. По значениям оптических постоянных, измеренных в инфракрасной области спектра, определены плазменные и релаксационные частоты электронов проводимости.

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема „Электрон“, № АААА-А18-118020190098-5). Расчеты проведены на суперкомпьютере „Уран“ ИММ УрО РАН.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] J. Roger, M. Ben Yahia, V. Babizhetskyy, J. Bauer, S. Cordier, R. Guérin, K. Hiebl, X. Rocquefelte, J.-Y. Saillard, J.-F. Halet. *J. Solid State Chem.* **179**, 8, 2310 (2006).
- [2] T. Tsutaoka, Y. Nishiume, T. Tokunaga. *JMMM* **272–276**, e421 (2004).
- [3] T. Tsutaoka, A. Tanaka, Y. Narumi, M. Iwaki, K. Kindo. *Physica B: Condens. Matter* **405**, 1, 180 (2010).
- [4] D.A. Joshi, A. Thamizhavel, S.K. Dhar. *Phys. Rev. B* **79**, 1, 014425 (2009).
- [5] B. Maji, K.G. Suresh, A.K. Nigam. *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 50, 506002 (2011).
- [6] R. Nirmala, A.V. Morozkin, A.K. Nigam, J. Lamsal, W.B. Yelon, O. Isnard, S.A. Granovsky, K.K. Bharathi, S. Quezado, S.K. Malik. *J. Appl. Phys.* **109**, 7, 07A716 (2011).
- [7] A.V. Morozkin, O. Isnard, P. Henry, P. Manfrinetti. *JMMM* **307**, 1, 124 (2006).
- [8] A.V. Morozkin, O. Isnard, P. Henry, P. Manfrinetti. *J. Alloys Compd.* **464**, 219 (2008).
- [9] G. Tian, H. Du, Y. Zhang, Y. Xia, C. Wang, J. Han, S. Liu, J. Yang. *J. Appl. Phys.* **107**, 9, 09A917 (2010).
- [10] N. Mohapatra, K. Mukherjee, K.K. Iyer, E.V. Sampathkumar. *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 49, 496001 (2011).
- [11] M. Falkowski, A. Kowalczyk, T. Toliński. *JMMM* **331**, 144 (2013).
- [12] S.N. Jammalamadaka, N. Mohapatra, S.D. Das, E.V. Sampathkumar. *Phys. Rev. B* **79**, 6, 060403 (2009).
- [13] B. Maji, K.G. Suresh, A.K. Nigam. *Europhys. Lett.* **91**, 3, 37007 (2010).
- [14] N. Mohapatra, S.D. Das, K. Mukherjee, K.K. Iyer, E.V. Sampathkumar. *Phys. Rev. B* **80**, 21, 214425 (2009).
- [15] M. Djermouni, M. Belhadj, S. Kacimi, A. Zaoui. *Mod. Phys. Lett. B* **25**, 32, 2427 (2011).
- [16] N.A. Zabidi, H.A. Kassim, K.N. Shrivastava. *AIP Conf. Proc.* **1325**, 1, 198 (2010).
- [17] Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, B. Maji, K.G. Suresh. *J. Alloys Compd.* **588**, 725 (2014).
- [18] Ю.В. Князев, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин. *ФТТ* **56**, 9, 1680 (2014).
- [19] Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min. *Physica B: Condens. Matter* **442**, 12 (2014).
- [20] L. Braicovich, E. Puppini, I. Lindau, A. Iandelli, G.L. Olcese, A. Palenzona. *Phys. Rev. B* **41**, 5, 3123 (1990).
- [21] C. Chemelli, S. Luridiana, M. Sancrotti, L. Braicovich, F. Ciccacci, A. Iandelli, G.L. Olcese, A. Palenzona. *Phys. Rev. B* **42**, 3, 1829 (1990).
- [22] V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner Jr. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 23, 4494 (1997).
- [23] K.A. Gschneidner Jr., V.K. Pecharsky, A.O. Tsokol. *Rep. Prog. Phys.* **68**, 6, 1479 (2005).
- [24] V.K. Pecharsky, A.P. Holm, K.A. Gschneidner Jr., R. Rink. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 19, 197204 (2003).
- [25] P. Kushwaha, R. Rawat. *Solid State Commun.* **152**, 19, 1824 (2012).
- [26] M. Nagai, A. Tanaka, Y. Haga, T. Tsutaoka. *JMMM* **310**, 2, 1775 (2007).
- [27] J.M. Cadogan, D.H. Ryan, Ya. Mudryk, V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner Jr. *J. Appl. Phys.* **115**, 17, 17A901 (2014).
- [28] F. Canepa, S. Cirafici, M. Napoletano. *J. Alloys Compd.* **335**, L1 (2002).
- [29] Ю.В. Князев, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин. *ФТТ* **59**, 3, 419 (2017).
- [30] S.S. Samatham, A.K. Patel, A.V. Lukoyanov, K.G. Suresh. *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 29, 295802 (2018).
- [31] V. Svitlyk, F. Fei, Y. Mozharivskiy. *J. Solid State Chem.* **181**, 5, 1080 (2008).
- [32] T. Zhang, Y. Chen, Y. Tang, M. Tu. *J. Alloys Compd.* **422**, 1–2, 25 (2006).
- [33] E. Yüzüak, I. Dincer, Y. Elerman. *J. Rare Earths* **28**, 3, 477 (2010).
- [34] S.S. Samatham, A.K. Patel, A.V. Lukoyanov, K.G. Suresh. *J. Alloys Compd.* **806**, 575 (2019).
- [35] A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov. *Phys. Rev. B* **72**, 2, 024458 (2005).

- [36] H.-J. Lee, Y.-N. Choi, A.V. Lukoyanov, E.G. Gerasimov, A.N. Pirogov. *JMMM* **475**, 593 (2019).
- [37] S. Gupta, K.G. Suresh, A.V. Lukoyanov. *J. Mater. Sci.* **50**, 5723 (2015).
- [38] Ю.В. Князев, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин, В.С. Гавико. *Физика низких температур* **44**, 2, 208 (2018).
- [39] F. Guillou, A.K. Pathak, T.A. Hackett, D. Paudyal, Y. Mudryk, V.K. Pecharsky. *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 48, 485802 (2017).
- [40] А.В. Соколов. *Оптические свойства металлов*. ГИФМЛ, М. (1961). 464 с.
- [41] I.I. Mazin, D.J. Singh, C. Ambrosch-Draxl. *Phys. Rev. B* **59**, 1, 411 (1999).

*Редактор Ю.Э. Китаев*