

01,16

Влияние примеси никеля на электронную структуру и оптические свойства соединения GdFeSi

© Ю.В. Князев, Ю.И. Кузьмин, А.В. Лукоянов, Р.Д. Мухачев, С.П. Платонов, А.Г. Кучин

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: knyazev@imp.uran.ru

Поступила в Редакцию 5 мая 2026 г.

В окончательной редакции 12 мая 2026 г.

Принята к публикации 15 мая 2026 г.

Представлены результаты теоретических расчетов электронной структуры и экспериментальных исследований оптических свойств соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ ($x = 0; 0.1; 0.2; 0.3$). Вычисления электронной структуры выполнены методом $\text{DFT} + U$ с учетом эффектов электронных корреляций и сдвига по жесткой полосе при легировании никелем. В спектральном диапазоне $0.28\text{--}15\text{ }\mu\text{m}$ исследованы дисперсионные зависимости оптических характеристик, определены вклады межзонного и внутризонного поглощения света. Экспериментальные спектры межзонной оптической проводимости сравниваются с теоретическими расчетами. С учетом результатов вычислений электронной структуры соединений обсуждается природа квантового поглощения света. Установлено, что формирование основной абсорбционной полосы, наблюдаемой в области $1\text{--}2\text{ eV}$, обусловлено переходами с участием $\text{Fe } 3d$ и $\text{Gd } 5d$ электронных состояний.

Ключевые слова: интерметаллиды, соединения гадолиния, электронная структура, оптические свойства.

DOI: 10.61011/FTT.2026.05.63436.9714

1. Введение

Тройные соединения $RT\text{Si}$ редкоземельных (R) и переходных (T) металлов с кремнием образуют большую группу магнитоупорядоченных материалов, привлекающих внимание разнообразием физико-химических характеристик, а также возможностями практического использования (обзоры [1–4]). В последние годы активно изучаются физические свойства таких интерметаллидов где $R = \text{Gd}$. Повышенный интерес к материалам на основе гадолиния в значительной мере связан обнаружением в системе $\text{Gd}_5\text{Ge}_{4-x}\text{Si}_x$ вблизи комнатной температуры гигантского магнитокалорического эффекта (МКЭ) [5,6], открывающего реальные перспективы создания устройств для твердотельного магнитного охлаждения. Большие значения МКЭ, составляющие $5\text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ в магнитном поле $\sim 17\text{ kOe}$, впоследствии были обнаружены в ферромагнитном слоистом соединении GdFeSi вблизи точки магнитного упорядочения (температура Кюри $T_C = 130\text{ K}$ [7,8]). Данный интерметаллид кристаллизуется в тетрагональной структуре типа CeFeSi . Магнитный момент соединения определяется атомами Gd , при том, что атомы Fe , благодаря полному заполнению $3d$ зоны, не обладают магнитным моментом [9,10].

Поскольку наибольший по величине МКЭ в GdFeSi наблюдается в области перехода из магнитоупорядоченного в неупорядоченное состояние, то одной из приоритетных задач является исследование воздействия различных факторов на температуру фазового перехода. При изучении влияния абсорбции водорода на МКЭ было установлено, что у гидрида GdFeSiH величина

МКЭ увеличилась в два раза относительно значения, полученного в исходном составе [11–13]. При этом в соединении наблюдался структурный переход в другую тетрагональную фазу, сопровождаемый увеличением кристаллического параметра c , а также резким (до 20 K) понижением T_C . Магнитные исследования, выполненные на наноструктурированном сплаве GdFeSi , полученном из расплава в виде аморфной ленты, показали, что T_C при аморфизации возрастает до 150 K , а высокие значения МКЭ сохраняются в широком температурном интервале $110\text{--}180\text{ K}$ [14]. К настоящему времени проведен ряд систематических исследований магнитных и магнитотепловых свойств ряда соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{T}_x\text{Si}$ с замещением железа атомами других металлов [7,8,15–21]. Такие замещения, как показали измерения, позволяют получать материалы с высоким МКЭ в широком диапазоне температур магнитного упорядочения, при сохранении большого магнитного момента, связанного с атомами Gd . В частности, установлено, что легирование исходного соединения атомами Ti в области концентраций $x = 0\text{--}0.1$ приводит к повышению T_C до 180 K [20], а замещение атомами Cr и V при $x = 0\text{--}0.4$ позволяет достигать значений T_C вплоть до 250 K [21]. Анализ магнитокалорических свойств изоструктурных соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ показал, что рост температуры Кюри и величины МКЭ сильно зависят от концентрации $3d$ электронов, инжектируемых в кристаллическую решетку при замещении Fe на Mn [17,19]. Следует отметить, что в системе $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ наблюдалась противоположная тенденция, а именно, уменьшение T_C до 106 K с изменением x от 0 до 0.3 [21].

Магнитные свойства и электронная структура интерметаллида GdFeSi и соединений на его основе, полученных при частичном замещении Fe атомами Cr, Ti и V [19–21], исследовались в ряде работ теоретически с помощью первопринципных методов [22–24]. Вычисления показали наличие прямой связи между модификацией магнитных свойств данных материалов и характером эволюции их электронных спектров в процессе легирования. В частности, увеличение концентрации атомов замещения для всех соединений сопровождается значительным подъемом плотности электронных состояний на уровне Ферми E_F . Предполагается, что этот фактор, в соответствии с моделью эффективного $d-f$ обменного взаимодействия для интерметаллидов типа $R-3d$ металл [25], является причиной повышения T_C с увеличением содержания примеси [19–21].

В настоящей работе для получения информации об электронных свойствах соединений GdFe_{1-x}Ni_xSi ($x = 0-0.3$) используется подход, сочетающий теоретические расчеты электронной структуры с экспериментальным исследованием оптических характеристик. Энергетические зависимости спектров оптической проводимости, полученных в широком интервале длин волн, сравниваются с соответствующими спектрами, рассчитанными из плотностей электронных состояний.

2. Образцы и методы исследования

Соединения GdFe_{1-x}Ni_xSi ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$) были приготовлены с помощью дуговой плавки в атмосфере аргона. Полученные слитки были подвергнуты отжигу в кварцевой ампуле в вакууме при 1073 K в течение 8 суток с последующей закалкой в воде. Для определения фазового состава, типа кристаллической структуры и параметров решетки применялся метод порошкового рентгенографического анализа с использованием дифрактометра Empyrean Series 2 (PANalytical), оснащенного CuK α источником излучения. Расчеты параметров решетки и анализ фазового состава были выполнены с применением программы HighScore v.4.x. При исследовании установлено, что данные соединения кристаллизуются в тетрагональную структуру типа CeFeSi (пространственная группа $P4/nmm$, № 129). Численные значения постоянных кристаллической решетки, а также подробный анализ фазового состава каждого соединения приведены в работе [21], где представлены результаты исследования магнитных и магнитотепловых свойств. Экспериментальные значения параметров решетки использованы при вычислении электронной структуры.

Теоретические расчеты электронной структуры интерметаллида GdFeSi были проведены методом DFT + U в программном пакете Quantum ESPRESSO [26] с использованием обменно-корреляционного функционала в обобщенном градиентном приближении GGA-PBE. Для достаточной сходимости в самосогласованных расчетах был установлен энергетический порог для плоских волн

60 Ry. Интегрирование в обратном пространстве проводилось с использованием сетки $10 \times 10 \times 10$ k-точек. Для учета сильных эффектов электронных корреляций в электронных состояниях Gd 4*f* использовалась поправка DFT + U для параметров прямого кулоновского взаимодействия $U = 6.7$ eV и взаимодействия Хунда (обменного взаимодействия) $J_H = 0.7$ eV [27]. Легирование никелем учитывалось с помощью использования метода сдвига по жесткой полосе, широко используемого для металлических сплавов [28,29]. Данный метод предполагает постепенное изменение числа электронных состояний без изменения формы их полной плотности путем сдвига E_F с учетом изменения числа электронов в переходных металлах [20]. Следует подчеркнуть, что метод сдвига по жесткой полосе дает хорошие результаты при небольших концентрациях легирования, а также, когда исходный и замещающий элементы имеют сходное строение электронных структур и располагаются близко в таблице химических элементов. В случае GdFeSi при частичном замещении Fe на Ni данный метод позволяет хорошо описать изменения свойств интерметаллида потому, что Fe в интерметаллиде GdFeSi не имеет магнитного момента [20]. Значения сдвигов уровня Ферми при различном содержании Ni составили: 0.12 eV ($x = 0.1$), 0.26 eV ($x = 0.2$), 0.41 eV ($x = 0.3$).

Оптические свойства соединений исследованы в области длин волн $\lambda = 0.28-15 \mu\text{m}$ (0.083–4.43 eV) при комнатной температуре с применением эллипсометрического метода Битти с вращающимся анализатором [30]. Измерения проводились на оптических эллипсометрах, созданных на базе двух призмённых спектрометров: Spectromom 204 (УФ и видимая области спектра) и ИКС-12 (ИК диапазон). Анализ изменения параметров поляризации света при его взаимодействии с поверхностью образца позволяет определить оптические постоянные — показатели преломления $n(\lambda)$ и поглощения $k(\lambda)$. По значениям n и k рассчитаны спектры действительных $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$ и мнимых $\varepsilon_2 = 2nk$ частей комплексной диэлектрической проницаемости, оптических проводимостей $\sigma = nk\omega/2\pi$ (ω — циклическая частота световой волны) и отражательных способностей $R = [(n-1)^2 + k^2]/[(n+1)^2 + k^2]$.

3. Расчеты электронной структуры

Фрагмент кристаллической структуры соединения GdFeSi представлен на рис. 1. Данная структура состоит из чередующихся слоев (001) в последовательности Gd-Si-Fe2-Si-Gd-Gd-Si-Fe2-Si-Gd. Атомы Gd и Si занимают кристаллографическую позицию 2c с координатами (1/4, 1/4, z); для Gd координата z составляет 0.6044, а для Si — 0.3922. Атомы Fe расположены в позиции 2a с координатами (1/4, 1/4, 0).

Полная $N(E)$ и парциальные плотности состояний GdFeSi, полученные в результате расчетов методом GGA + U , приведены на рис. 2. Уровень Ферми распо-

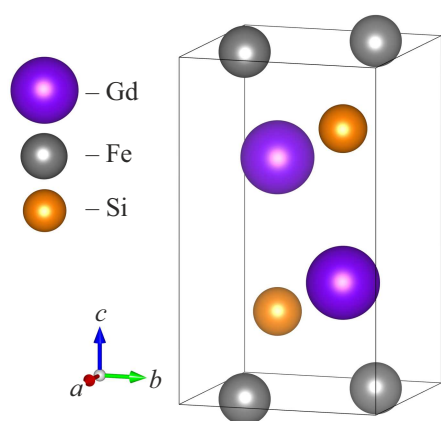


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры соединения GdFeSi.

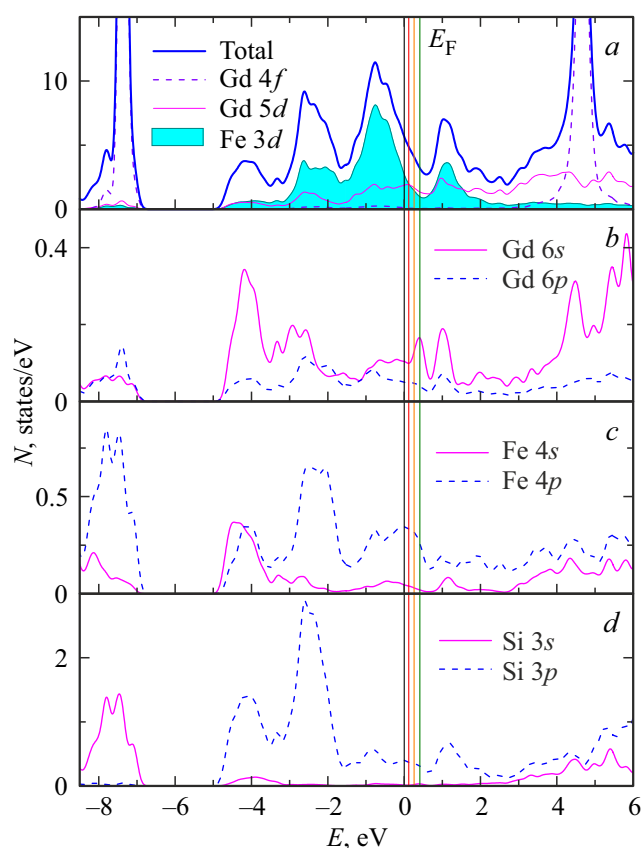


Рис. 2. Полная и частичная плотности электронных состояний соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$). Для GdFeSi уровень Ферми соответствует нулю на шкале энергий. Для соединений с $x = 0.1, 0.2$ и 0.3 уровень Ферми сдвинут вправо соответственно на 0.12, 0.26 и 0.41 eV.

лагается в нуле энергий и пересекает $N(E)$ при значении $\sim 5 \text{ states/eV}$, что свидетельствует о металлическом характере соединения. Три дополнительные линии, расположенные с правой стороны от нулевой отметки соответствуют значениям E_F , рассчитанным для соединений

с $x = 0.1, 0.2$ и 0.3 в рамках метода жесткой полосы. Структура $N(E)$ характеризуется рядом максимумов, наиболее интенсивные из которых представлены двумя узкими пиками, связанными с сильно локализованными Gd 4f состояниями. Заполненные 4f состояния расположены в валентной зоне при $-(7-8) \text{ eV}$, а свободные — в зоне проводимости при $4-5 \text{ eV}$. В интервале от -5 до 2 eV основной вклад в $N(E)$ вносят Fe 3d электронные состояния. Они формируют три выразительных пика вблизи E_F при энергиях $-2.8, -0.7$ и 1.2 eV и вносят небольшой вклад в образование подъема выше 3 eV . Электронные состояния Gd 5d, Gd 6s и Gd 6p типа представлены в виде протяженных полос с менее интенсивными структурами и расположены при энергиях, превышающих -5 eV . В интервале от $-(7-8) \text{ eV}$ локализованы максимумы, связанные с Fe 4p и Si 3s состояниями и с небольшими по величине вкладами от Gd 6s и Gd 6p состояний. В широкой металлической зоне, расположенной выше -5 eV , в частичных плотностях s и p состояний Gd, Fe и Si выделяются пики при -4.1 и 2.3 eV . Смещение уровня Ферми в высокоэнергетическом направлении, происходящее в рамках модели жесткой полосы, приводит к уменьшению значения $N(E_F)$ по мере возрастания концентрации примеси Ni. Качественно, такая тенденция коррелирует с наблюдаемым в эксперименте понижением температуры Кюри в данной системе сплавов [21].

4. Оптические свойства

Энергетические зависимости отражательной способности и обеих компонент диэлектрической проницаемости двух соединений с крайними значениями $x = 0$ и $x = 0.3$ (GdFeSi и $\text{GdFe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{Si}$) приведены на рис. 3. Для соединений с промежуточными величинами $x = 0.1$ и 0.2 соответствующие кривые не представлены, поскольку они почти идентичны по структуре. Основные особенности спектров $\varepsilon_1(E)$, $\varepsilon_2(E)$ и $R(E)$ характерны для материалов с металлической проводимостью. Они проявляются в том, что $\varepsilon_1 < 0$ во всем энергетическом диапазоне, а R стремится к единице при $E \rightarrow 0$. Монотонный рост $|\varepsilon_1|$, ε_2 и R в инфракрасной области ниже $\sim 0.8 \text{ eV}$ связан с внутризонным (друдевским) поглощением света, а структуры, наблюдаемые выше этой энергии — с межзонным характером поглощения.

На рис. 4 приведены спектры оптической проводимости $\sigma(E)$ всех исследуемых соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ (кривые сдвинуты друг относительно друга по оси ординат на 10 единиц). Данный параметр определяет соотношение между индуцируемой плотностью тока в среде и величиной электрического поля световой волны, падающей на образец. В низкоэнергетической области (ИК диапазон) с увеличением частоты света на всех кривых наблюдается друдевский спад проводимости ($\sigma_D \sim \omega^{-2}$), связанный с внутризонным механизмом поглощения света. С ростом энергии фотона в формировании спектров

определяющую роль играют межзонные переходы электронов, приводящие к образованию почти симметричной полосы поглощения. В исходном интерметаллиде GdFeSi такая полоса, имеющая вид острого максимума, локализована при энергии $\sim 1.2 \text{ eV}$. В процессе замещения Fe атомами Ni наблюдается заметное смещение максимума в высокоэнергетическом направлении. Существенной особенностью трансформации спектров $\sigma(E)$ при увеличении x является также значительное уширение данных структур. Отчетливо видно, что для соединения с $x = 0.3$ максимум, расположенный при более высокой энергии ($\sim 1.4 \text{ eV}$), становится более размытым.

Межзонный вклад в оптическую проводимость $\sigma_{ib}(E)$ каждого соединения был выделен путем вычитания внутризонной составляющей, определяемой с помощью соотношений Друде, из экспериментальной зависимости. Полученные таким способом спектры $\sigma_{ib}(E)$ представлены на рис. 5 кружками. Они свидетельствуют, что интенсивность межзонного поглощения света резко падает при $E \lesssim 0.3 \text{ eV}$. На всех кривых проявились интенсивные полосы поглощения в интервале $1\text{--}2 \text{ eV}$. Примечательно, что низкоэнергетические максимумы вблизи 0.5 eV , наблюдаемые в спектрах $\sigma_{ib}(E)$, незаметны на экспериментальных кривых (рис. 4) на фоне друдевского спада. Формирование основных структур межзонного поглощения света в изучаемых материалах можно объяснить с

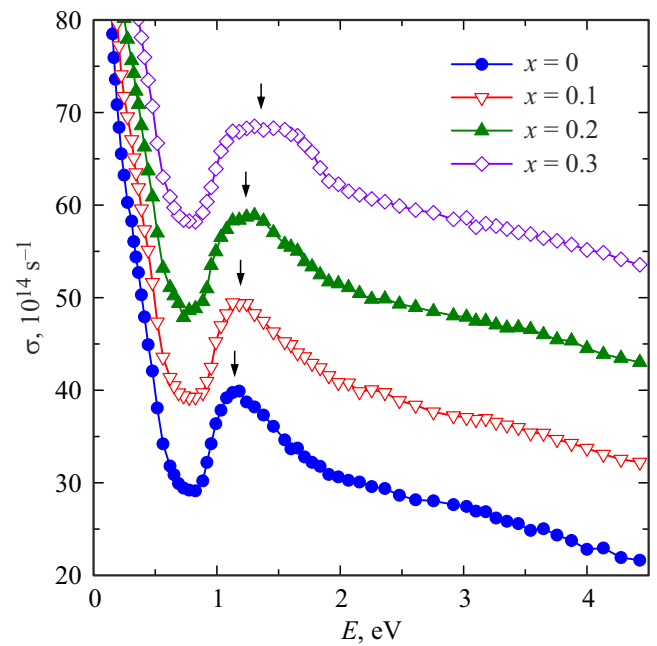


Рис. 4. Экспериментальные энергетические зависимости оптической проводимости соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$). Стрелки соответствуют положению максимумов. Кривые сдвинуты относительно друг друга по оси ординат на 10 единиц.

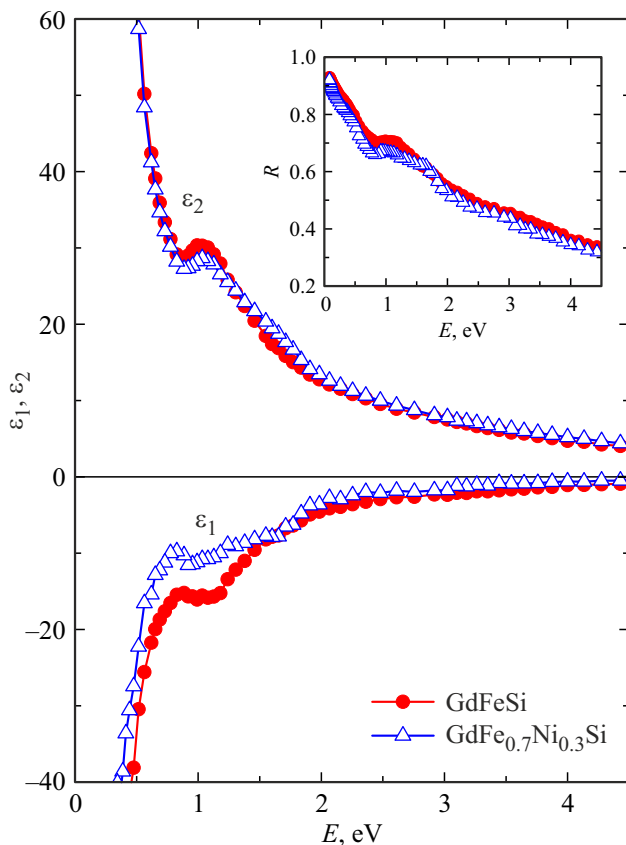


Рис. 3. Спектры диэлектрических функций ϵ_1 и ϵ_2 и отражательной способности R соединений GdFeSi и $\text{GdFe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{Si}$.

учетом результатов вычислений полных плотностей состояний $N(E)$, приведенных на рис. 2. С этой целью в соответствии с методом [31], на основе сверток $N(E)$ ниже и выше E_F , были проведены расчеты межзонных оптических проводимостей каждого соединения. Проведенные вычисления носят качественный характер, поскольку выполнены в приближении равной вероятности всех типов электронных переходов. Теоретические зависимости $\sigma_{ib}(E)$ представлены на рис. 5 в произвольных единицах толстыми сплошными линиями. Форма этих кривых при $E \gtrsim 0.8 \text{ eV}$ довольно хорошо описывает основные особенности, наблюдаемые в эмпирических спектрах. Воспроизводятся такие элементы дисперсионных зависимостей, как максимумы, расположенные в интервале $1\text{--}2 \text{ eV}$, а также монотонные, почти бесструктурные спады на высокоэнергетическом склоне полосы поглощения. Существенное расхождение в характере дисперсии сравниваемых спектров $\sigma_{ib}(E)$ наблюдается в области низких энергий. Если с понижением энергии света на экспериментальных кривых наблюдается резкое ослабление межзонного вклада, то на расчетных зависимостях высокие значения сохраняются. Мы связываем такое несоответствие с используемым в расчете приближением постоянства матричных элементов переходов, при котором вероятность оптических переходов в пределах одной зоны отлична от нуля, а рассчитанные значения $\sigma_{ib}(E)$ в низкоэнергетическом интервале оказываются завышенными. В целом, проведенные измерения оптических свойств и результаты первопринципных расчетов

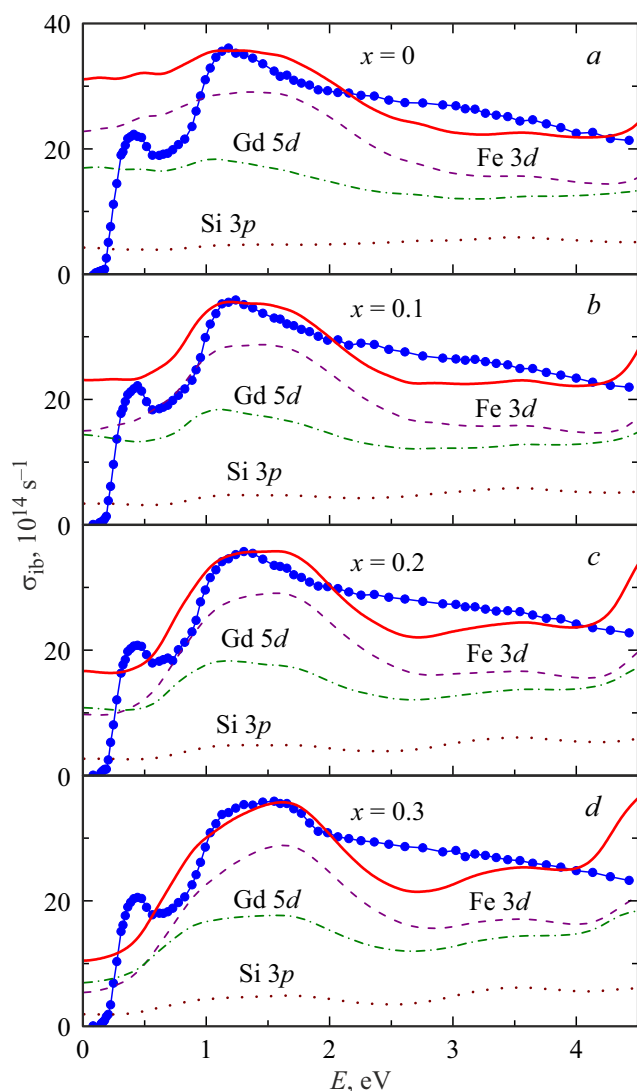


Рис. 5. Межзонный вклад в оптическую проводимость соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$) (кружки). Толстые сплошные линии — расчет. Также показаны рассчитанные парциальные вклады от межзонных переходов с участием Fe 3d, Gd 5d и Si 3p электронных состояний.

зонного спектра дают взаимно согласованное описание электронной структуры исследуемых интерметаллидов. При этом следует отметить, что структура вычисленных спектров межзонной проводимости, в отличие от экспериментальных, оказалась менее чувствительной к изменению концентрации атомов замещения.

На рис. 5 также представлены наиболее значительные вклады в межзонную оптическую проводимость соединений, связанные с различными электронными состояниями. Эти вклады рассчитывались также по методу [31] на основе данных об их парциальных плотностях. Рисунок свидетельствует, что основная особенность спектров (максимум в диапазоне 1–2 eV) идентифицируется с межзонными оптическими переходами с участием Fe 3d и Gd 5d электронов. Вклад, связанный с Si 3p электрон-

ными состояниями, существенно меньше по величине и имеет почти бесструктурный вид.

5. Заключение

Представлены совместные результаты исследования электронной структуры и оптических свойств соединений $\text{GdFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3$). В рамках самосогласованного *ab initio* расчета в интервале энергий $-8 < E_F < 6$ eV получена информация о полных и парциальных плотностях электронных состояний, которая использована для интерпретации экспериментальных результатов. Расчет показал, что структура полных плотностей состояний с высокими значениями на уровне Ферми, наблюдаемая во всех соединениях, соответствует материалам металлического типа. Основной вклад в $N(E)$ вблизи E_F вносят Gd 5d и Fe 3d состояния. Оптические характеристики интерметаллидов измерены методом эллипсометрии в энергетическом диапазоне 0.083–4.43 eV. Показано, что особенности их дисперсионных зависимостей также характерны для проводящих материалов. Форма спектров межзонной оптической проводимости и основные структурные особенности качественно описываются теоретическими расчетами данной функции. Высокий уровень межзонного поглощения при 1–2 eV связан с квантовыми переходами с участием Fe 3d и Gd 5d электронов. Полученная в расчетах картина зонного спектра соединений позволяет качественно объяснить особенности оптического поглощения в исследуемой области энергий.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Zhang, B.-G. Shen. *Chin. Phys. B* **24**, 12, 127504 (2015).
- [2] S. Gupta, K.G. Suresh. *J. Alloys. Compd.* **618**, 562 (2015).
- [3] H. Zhang, R. Gimaev, B. Kovalev, K. Kamilov, V. Zverev, A. Tishin. *Phys. B: Condens. Matter* **558**, 65 (2019).
- [4] L. Li, M. Yan. *J. Alloys. Compd.* **823**, 153810 (2020).
- [5] V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner Jr. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 23, 4494 (1997).
- [6] V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner Jr. *Appl. Phys. Lett.* **70**, 24, 3299 (1997).
- [7] P. Włodarczyk, L. Hawelek, P. Zackiewicz, T.R. Roy, A. Chrobak, M. Kaminska, A. Kolano-Burian, J. Szade. *Mater. Chem. Phys.* **162**, 273 (2015).
- [8] A.G. Kuchin, S.P. Platonov, V.S. Gaviko, M.Yu. Yakovleva. *J. Phys.: Conf. Ser.* **1389**, 012128 (2019).
- [9] R. Welter, G. Venturini, B. Malaman. *J. Alloys. Compd.* **189**, 1, 49 (1992).

- [10] M. Napoletano, F. Canepa, P. Manfrinetti, F. Merlo. *J. Mater. Chem.* **10**, 7, 1663 (2000).
- [11] B. Chevalier, M. Duttine, A. Wattiaux. *Z. Naturforsch.* **71**, 5, 419 (2016).
- [12] I.A. Ovchenkova, S.A. Nikitin, I.S. Tereshina, A.Yu. Karpenkov, Y.A. Ovchenkov, J. Ćwik, Yu.S. Koshkid'ko, H. Drulis. *J. Appl. Phys.* **128**, 14, 143903 (2020).
- [13] И.С. Терёшина, Ю.А. Овченкова, Г.А. Политова, Н.Ю. Панкратов. *Известия РАН. Серия физ.* **87**, 3, 353 (2023).
- [14] A. Sanz-Prada, P. Avarez-Alonso, J.L. Sánchez-Llamazares, L.G. Escobedo-Valadez, J.S. Garitaonandia, Pedro Gorria, Jesús A. Blanco, J. López-Garsia. *J. Mater. Chem. C* **14**, 4, 1641 (2026).
- [15] С.А. Никитин, Т.И. Иванова, И.Г. Махро, Ю.А. Цхададзе, Н.Ф. Ведерников. *ФТТ* **39**, 2, 325 (1997).
- [16] Ю.В. Князев, Л.Н. Граматеева, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин, А.Г. Кучин, С.П. Платонов. *ФММ* **122**, 5, 506 (2021).
- [17] С.А. Никитин, Ю.А. Овченкова, М.Е. Блинова, И.С. Терёшина. *Вестник МГУ сер. 3, физ., астрон.*, **4**, 47 (2022).
- [18] Н.Ю. Панкратов, И.С. Терёшина, С.А. Никитин. *ФММ* **124**, 11, 1093 (2023).
- [19] S.P. Platonov, A.G. Kuchin, A.S. Volegov, V.S. Gaviko, M.Yu. Yakovleva. *Intermetallics* **137**, 107304 (2021).
- [20] A.G. Kuchin, S.P. Platonov, A.V. Lukoyanov, A.S. Volegov, V.S. Gaviko, R.D. Mukhachev, M.Yu. Yakovleva. *Intermetallics* **133**, 107183 (2021).
- [21] A.G. Kuchin, S.P. Platonov, R.D. Mukhachev, A.V. Lukoyanov, A.S. Volegov, V.S. Gaviko, M.Yu. Yakovleva. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 22, 15508 (2023).
- [22] D.J. García, V. Vildosola, P.S. Cornaglia. *J. Phys.: Condens. Matter.* **32**, 28, 285803 (2020).
- [23] X.B. Liu, Z. Altounian. *J. Appl. Phys.* **107**, 9, 09E103 (2010).
- [24] S. Talakesh, Z. Nourbakhsh. *J. Supercond. Nov. Magn.* **30**, 8, 2143 (2017).
- [25] A. Cyrot, M. Lavagna. *J. Phys.* **40**, 763 (1979).
- [26] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M.B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R.A. DiStasio Jr, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. Küçükbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N.L. Nguyen, H.-V. Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Poncé, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni. *J. Phys.: Condens. Matter*, **29**, 46, 465901 (2017).
- [27] A.G. Kuchin, S.P. Platonov, R.D. Mukhachev, A.V. Lukoyanov, A.S. Volegov, V.S. Gaviko, M.Yu. Yakovleva. *Metals* **13**, 2, 290 (2023).
- [28] Z. Bu, X. Li, L. Zhang, Q. Xia, H. Fu, H. Liu, L. Qin, D. Chen, S. Yan, Q. Li. *Nano Lett.* **25**, 12, 4987 (2025).
- [29] W. Zhao, R. Chen, H. Li, B. Liu, Y. Zhao, X. Yin, G. Liu, C. Tan. *Comput. Mater. Sci.* **259**, 114209 (2025).
- [30] H. Fujiwara. *Spectroscopic ellipsometry: principles and applications*. New York, USA: John Wiley & Sons. Ltd., 2007. 375 p.
- [31] Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin, I.A. Nekrasov. *Phys. Rev. B* **73**, 094410 (2006).

Редактор В.В. Емцев