

01.05.11

Первопринципные исследования тенденции к сегрегации в сплавах Гейслера $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ с различным атомным упорядочением

© К.Р. Ерагер¹, В.В. Соколовский^{1,2}, В.Д. Бучельников^{1,2}

¹ Челябинский государственный университет,
Челябинск, Россия

² Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“,
Москва, Россия

E-mail: eragerk@rambler.ru

Поступила в Редакцию 8 июля 2021 г.

В окончательной редакции 13 июля 2021 г.

Принята к публикации 16 июля 2021 г.

С помощью расчетов из первых принципов исследованы вопросы стабильности серии сплавов Гейслера $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) с шахматным и послойным упорядочением атомов Mn. Показано, что композиции с избытком Mn являются устойчивыми по отношению к распаду на составляющие элементы и неустойчивыми по отношению к распаду на двухфазную систему, состоящую из ферромагнитной кубической $L2_1$ -фазы Ni_2MnSb и антиферромагнитной тетрагональной $L1_0$ -фазы $NiMn$. Таким образом, все нестехиометрические составы в аустенитной и мартенситной фазе с учетом различного магнитного и атомного упорядочения проявляют тенденцию к сегрегации. Стабильность сплавов возможна только в стехиометрических составах ($x = 0$ и 1).

Ключевые слова: Сплавы Гейслера, первопринципные вычисления, сегрегация, фазовая стабильность.

DOI: 10.21883/FTT.2021.11.51569.11s

1. Введение

В настоящее время перспективность сплавов Гейслера на основе Ni и Mn обусловлена наличием ряда различных функциональных свойств [1–18], таких как магнитокалорический эффект [7–10], магнитосопротивление [11,12], эффект памяти формы [9,13–15] и обменное смещение [16–17]. Широкое разнообразие функциональных свойств данных сплавов определяется наличием в них магнитных, структурных и связанных магнитоструктурных фазовых переходов. Благодаря чему, интерметаллические соединения Гейслера представляют особый интерес, как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения.

В отличие от семейства Ni-Mn-Ga сплавы Ni-Mn-Z ($Z = In, Sn, Sb$) претерпевают мартенситное превращение лишь в нестехиометрических составах при определенных соотношениях между Mn и Z [19–23]. Как следствие, проявление тех или иных функциональных свойств напрямую связано с композиционным составом. Общей особенностью сплавов Ni-Mn-Z является наличие сильных ферро (ФМ)-антиферромагнитных (АФМ) корреляций между атомами Mn, расположенными в неэквивалентных позициях кристаллической решетки. Наиболее яркое проявление ФМ-АФМ-корреляций проявляется в низкотемпературной мартенситной фазе в виду того, что атомы Mn располагаются на более близких расстояниях по сравнению с теми же расстояниями в кубической аустенитной фазе. В результате чего, мартенситная фаза обладает существенно меньшей намагниченностью, и в области мартенситного превращения

наблюдается скачкообразное изменение намагниченности, влекущее за собой большие значения обратного магнитокалорического эффекта (МКЭ) и магнитосопротивления [7–12].

Важно отметить, что в подавляющем большинстве экспериментальных работ нестехиометрические композиции были термически обработаны стандартными способами закалки и отжигом длительностью в несколько дней. Недавние экспериментальные исследования [24–29] влияния длительного отжига на фазовую стабильность сплавов Ni-Mn-(Ga, Sn, In Al) с высоким содержанием Mn показали следующее: двухступенчатый отжиг в течение 4 недель при температуре ≈ 1200 K и в течение 1 недели при температуре около 770 K приводит к исчезновению мартенситного превращения и сегрегации на двухфазную систему, состоящую из ФМ матрицы $Ni_2Mn(Ga, Sn, In Al)$ с кубической структурой и АФМ тетрагональной фазы $NiMn$.

Что касается сплавов семейства Ni-Mn-Sb, то данные соединения исследованы в меньшей степени в рамках экспериментальных и теоретических подходов. Тем не менее, в работах [30,31] представлены исследования композиционных фазовых диаграмм сплавов $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$, из которых следует сложная последовательность магнитных и структурных фазовых превращений при отклонении от стехиометрии ($x > 0.3$). При этом мартенситный переход и связанные с ним свойства весьма чувствительны к соотношению концентраций между Ni, Mn и Sb. В ряде работ [32,33] исследованы магнитокалорические и транспортные свойства в

области мартенситного превращения, демонстрирующие схожие результаты для сплавов Ni-Mn-(In, Sn). Теоретические исследования из первых принципов [34–36] также показывают чувствительность магнитных и структурных свойств аустенитной и мартенситной фазы сплавов Ni-Mn-Sb к изменению химического состава и степени заполнения кристаллографических позиций. Однако, вопросам фазовой стабильности данных сплавов уделено мало внимания.

В настоящей работе мы представляем исследования стабильности магнитной и кристаллической структуры аустенитной и мартенситной фазы сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ в рамках теории функционала плотности.

2. Детали и методология вычислений

Первопринципные вычисления свойств сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ выполнены с помощью метода присоединенных проекционных волн (PAW), реализованного в программном пакете VASP [37,39]. Для описания обменно-корреляционной энергии выбрано обобщенное градиентное приближение в параметризации Пердью–Бурке–Эрнзерхофа [39]. Интегрирование зоны Бриллюэна проведено методом Монкхорста–Пака, используя k -сетку $12 \times 12 \times 12$. Энергия обрезки плоских волн составляла 450 eV, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} eV/atom. В качестве PAW псевдопотенциалов выбраны следующие электронные конфигурации: $3p^6 4s^1 3d^7$ для Mn, $3p^6 4s^2 3d^8$ для Ni и $5p^3 5s^2$ для Sb. Геометрическая оптимизация кристаллических структур аустенитной и мартенситной фазы выполнена в рамках электронной и ионной релаксации. Кристаллическая структура аустенитной фазы задана 16-ти атомной кубической суперъчейкой пространственной группы симметрии № 225. Нестехиометрические композиции $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) сформированы путем расположения одного, двух и трех избыточных атомов Mn на позициях Sb.

Поскольку сплавы Гейслера с избытком Mn демонстрируют сложное поведение в действующих обменных взаимодействиях, особенно в мартенситной фазе, то необходимо учесть различную магнитную структуру. В данной работе рассмотрены два случая упорядочения магнитных моментов атомов Mn и Ni: ферромагнитный — FM (все спины $\uparrow\uparrow$) и ферримагнитный — FIM (спины избыточного Mn $\uparrow\downarrow$). На рис. 1 представлены кубические структуры соединений $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) с расположением атомов Mn в „шахматном“ (staggered) и „послойном“ (layered) порядке. Структура с послойным атомным упорядочением является результатом наличия антисайт дефекта между одной парой атомов Mn и Sb. Дополнительно рассмотрена дефектная структура, описанная авторами работы [36], с частичным расположением избыточных атомов Mn в позициях Ni.

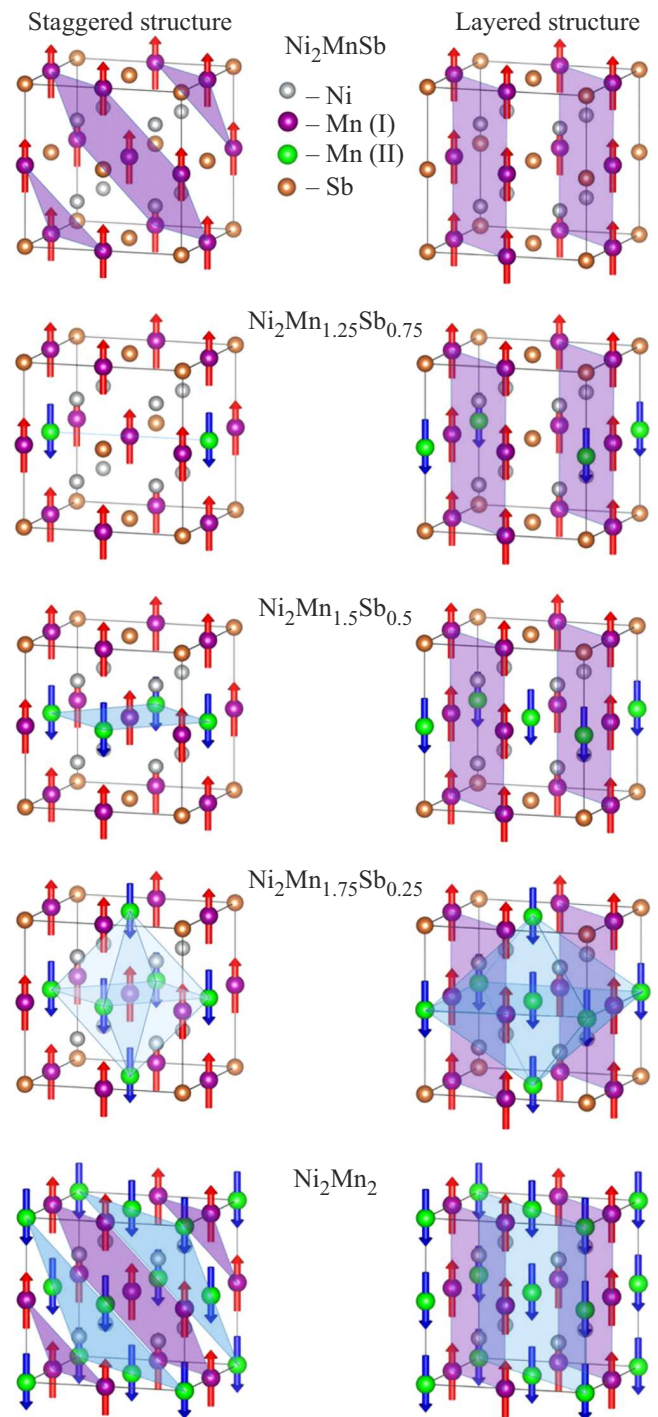


Рис. 1. Кубические структуры соединений $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) с шахматным (staggered) и послойным (layered) расположением атомов Mn, формирующих FIM-упорядочение. Зеленым цветом обозначены атомы Mn, замещающие Sb. Затененные области представлены для подчеркивания атомного и магнитного упорядочения.

Принимая во внимание экспериментальные данные [24–29], в настоящей работе исследованы возможные эффекты сегрегации сплавов Ni-Mn-Sb, приводящие

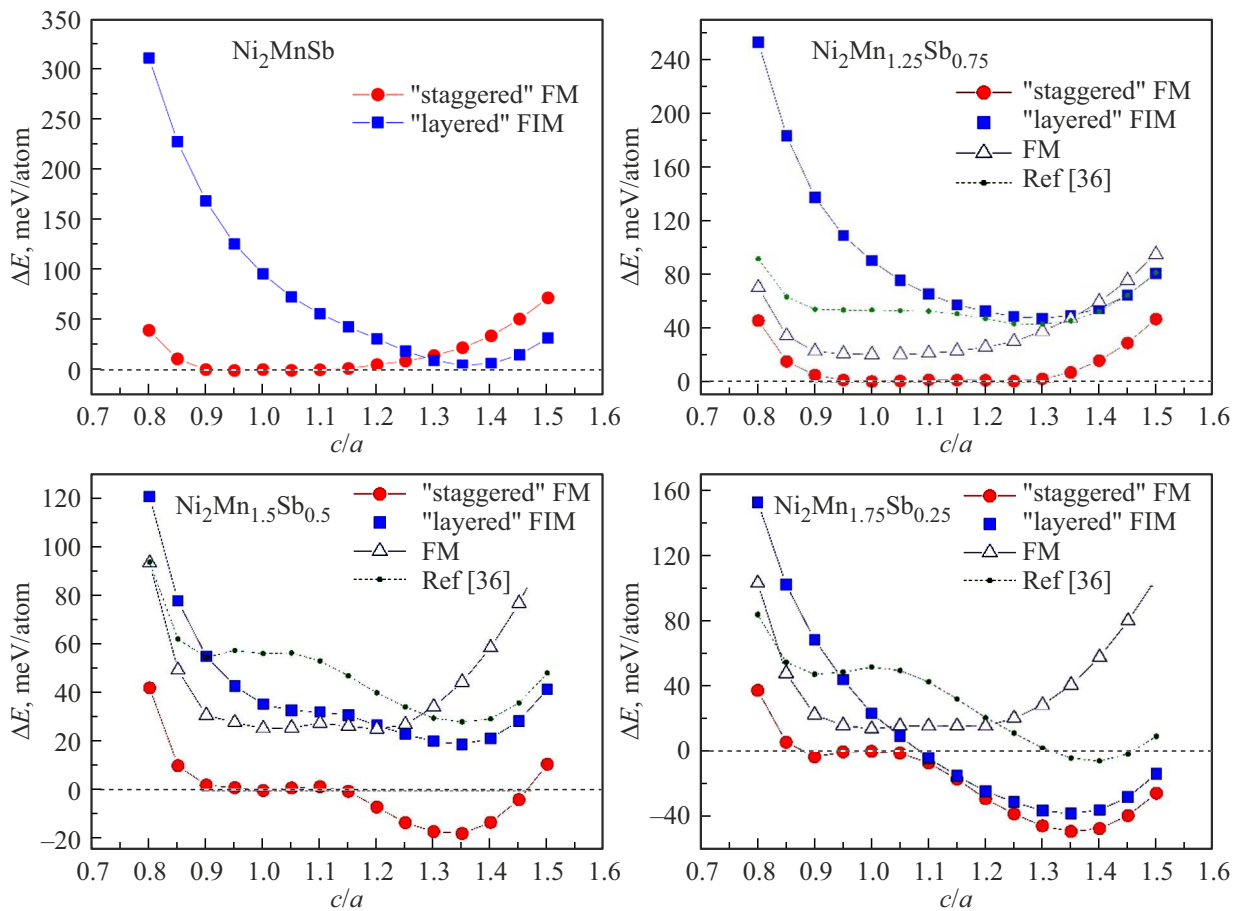


Рис. 2. Зависимость разницы энергии кристалла от тетрагонального искажения в системах $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$) с расположением атомов в „шахматном“ (staggered) и „послойном“ порядке (layered) с учетом FM- и FIM-упорядочения. Дополнительно приведены результаты расчетов для дефектных структур в нестехиометрических композициях, предложенных в работе [36].

к появлению двухфазных композитов с ФМ кубической стехиометрической фазой Ni_2MnSb и АФМ тетрагональной фазой $NiMn$. Наша методология состоит из трех этапов. На первом шаге рассчитываются энергии основного состояния с учетом выгодной магнитной конфигурации как для стехиометрических, так и для нестехиометрических составов. Второй шаг — анализ устойчивости соединений по отношению к распаду на составляющие элементы в рамках расчетов энергии (или энтальпии) формирования. Третий шаг — анализ устойчивости соединений по отношению к распаду на Ni_2MnSb и $NiMn$ в рамках расчетов энергии смешивания

$$E_{mix} = E_{Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}} - [(1-x)E_{Ni_2MnSb}^{L2_1} + xE_{(NiMn)_2}^{L1_0}], \quad (1)$$

где $E_{Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}}$ — полная энергия соответствующих соединений со структурой аустенита и мартенсита; $E_{Ni_2MnSb}^{L2_1}$ и $E_{(NiMn)_2}^{L1_0}$ — полные энергии стехиометрического тройного и бинарного соединений со структурой $L2_1$ и $L1_0$.

3. Результаты вычислений и обсуждение

Перейдем к обсуждению полученных результатов вычислений энергии основного состояния в кубической аустенитной и тетрагональной мартенситной фазах. На рис. 2 представлены зависимости разницы энергии от тетрагонального искажения (c/a) для систем $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$) с шахматным и послойным упорядочением Mn, формирующих FM- и FIM-упорядочение. Разница энергий взята по отношению к фазе аустенита ($c/a = 1$) с шахматным упорядочением Mn.

Рассмотрим результаты для стехиометрического состава Ni_2MnSb . Расчеты показывают, что шахматное упорядочение атомов Mn стабилизирует аустенитную $L2_1$ -фазу, также отсутствие мартенситной фазы ввиду ее невыгодности. Напротив, послойное расположение атомов Mn приводит к возникновению метастабильной мартенситной фазы с тетрагональным отношением $c/a = 1.35$. Примечательно, что фа-

Таблица 1. Равновесные значения параметров решеток аустенитной и мартенситной фазы, степень тетрагонального искажения (c/a) и разница энергии кристаллов по отношению к самым устойчивым фазам (ΔE) для каждой из композиций $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ с учетом различного магнитного и атомного упорядочения

Состав		c/a	a (Å)	b (Å)	c (Å)	ΔE (meV/atom)	
Ni_2MnSb	FM	Staggered	1	6.070	6.070	6.070	0
	FIM	Layered	1.35	5.450	5.450	7.433	4.424
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.25}\text{Sb}_{0.75}$ FIM	Staggered	1	5.989	5.989	5.989	0	
		1.25	5.529	5.528	7.023	0.257	
	Layered	1.3	5.366	5.366	7.378	47.169	
	Ref [36]	1	5.992	5.992	5.992	53.336	
1.3		5.481	5.479	7.109	42.802		
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ FIM	Staggered	1	5.932	5.932	5.945	17.591	
		1.35	5.343	5.343	7.200	0	
	Layered	1.35	5.269	5.269	7.339	36.552	
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.75}\text{Sb}_{0.25}$ FIM	Staggered	1	5.867	5.867	5.867	48.990	
		1.35	5.247	5.247	7.168	0	
	Layered	1.35	5.240	5.240	7.167	10.982	
Ni_2Mn_2 FIM	Ref [36]	1.4	5.219	5.210	7.225	44.869	
	Staggered	1.41	5.094	5.094	7.223	60.261	
NiMn FIM	Layered	1.41	5.125	5.125	7.166	0	

Таблица 2. Равновесные значения полного и поэлементного магнитного моментов в аустенитной и мартенситной фазах сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ с учетом различного магнитного и атомного упорядочения

Состав		c/a	M_A ($\mu_B/\text{f.u.}$)					
			Ni	Mn(I)	Mn(II)	Sb	Total	
Ni_2MnSb	FM	Staggered	1	0.165	3.439	–	–0.020	3.748
	FIM	Layered	1.35	0	3.112	–3.112	–0.068	0
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.25}\text{Sb}_{0.75}$ FIM	Staggered	1	0.107	3.358	–3.455	–0.029	2.686	
		1.25	0.219	3.268	–3.325	–0.046	2.841	
	Layered	1.3	0.167	3.007	–3.228	–0.084	2.470	
	Ref [36]	1	0.152	3.308	–2.765	–0.008	2.916	
1.3		0.217	3.155	–2.821	–0.034	2.858		
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ FIM	Staggered	1	0.049	3.286	–3.424	–0.040	1.652	
		1.35	0.017	3.072	–3.198	–0.078	1.459	
	Layered	1.35	0.039	2.916	–3.119	–0.090	1.389	
$\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.75}\text{Sb}_{0.25}$ FIM	Staggered	1	0.014	3.240	–3.376	–0.050	0.723	
		1.35	0.066	3.045	–3.115	–0.074	0.824	
	Layered	1.35	0.088	2.998	–3.042	–0.071	0.877	
NiMn FIM	Ref [36]	1.4	0.031	2.912	–3.017	–0.064	0.694	
	Staggered	1.41	0	3.027	–3.027	–	0	
NiMn FIM	Layered	1.41	0	3.158	–3.158	–	0	

за мартенсита с послойным упорядочением близка по энергии к фазе аустенита с шахматным упорядочением ($\Delta E \approx 4.424 \text{ meV/atom}$). В случае нестехиометрических композиций ферромагнитное шахматное упорядочение атомов Mn становится существенно выгодным по энергии как в аустенитной, так и мартенситной фазах. Кроме того, для композиции $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.25}\text{Sb}_{0.75}$ можно наблюдать практически вырожденное состояние аустенитной фазы ввиду наименьшей разницы между энергиями кубической и тетрагональной фазы ($\Delta E \approx 0.257 \text{ meV/atom}$). Последующее увеличение содержания Mn приводит к росту разницы энергий между аустенитной и мартенситной фазой для структур с шахматным атомным упорядочением, что косвенно указывает на рост температуры мартенситного перехода. Такая тенденция хорошо согласуется с экспериментальными наблюдениями [31,40,41], согласно которым температура мартенситного превращения T_M увеличивается с уменьшением концентрации сурьмы. Учет размещения избыточных атомов Mn в позициях Ni и Sb по аналогии с работой [36], приводит к повышению энергии аустенитной и мартенситной фаз примерно на 40 meV/atom . Кроме того, из рисунка можно видеть, что для композиции $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.75}\text{Sb}_{0.25}$ энергия аустенитной фазы, в которой избыточные атомы Mn полностью располагаются в подрешетке Sb, практически равна энергии мартенситной фазы, в которой избыточные атомы Mn занимают позиции Ni и Sb. Данное наблюдение также указывает на вырожденность аустенитной фазы в зависимости от степени заполнения кристаллографических позиций.

В табл. 1 представлены равновесные параметры решетки для сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ в аустенитной и мартенситной фазе с учетом различного атомного и магнитного упорядочения. Установлено, что с увеличением содержания Mn постоянные решеток обеих фаз уменьшаются, что может быть обусловлено меньшим атомным радиусом Mn (1.40 \AA) по сравнению с Sb (1.45 \AA). Рассчитанные значения согласуются с экспериментальными данными [31] и теоретическими исследованиями других авторов [36].

В табл. 2 представлены значения полного и поэлементного магнитных моментов для рассмотренных соединений. Наибольшая величина полного магнитного момента наблюдается для стехиометрической композиции с учетом шахматного расположения атомов Mn. Последующее уменьшение концентрации сурьмы приводит к снижению значения магнитного момента в фазах аустенита и мартенсита с шахматным и послойным ферромагнитным упорядочением. Наблюдаемая тенденция в поведении намагниченности хорошо согласуется с экспериментом [31]. АФМ-упорядочение наблюдается для стехиометрических составов Ni_2MnSb с послойным атомным упорядочением и NiMn с шахматным и послойным атомным упорядочением.

На рис. 3, а представлены зависимости энергии формирования от концентрации Mn для аустенитной и мартенситной фазы исследуемых композиций, которые

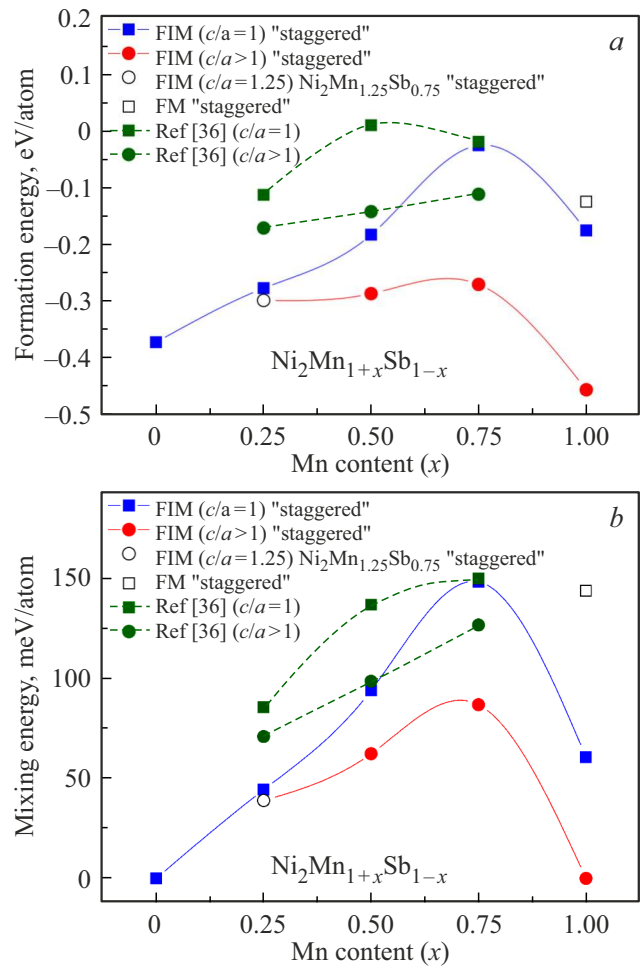


Рис. 3. Зависимость энергии (а) формирования и (б) смешивания от содержания Mn для кубической $L2_1$ и тетрагональной $L1_0$ -фазы сплавов $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1+x}\text{Sb}_{1-x}$ с учетом различного магнитного и атомного упорядочения.

упорядочены ферро-, антиферро- и ферромагнитно. Из рисунка следует, что все композиции являются устойчивыми по отношению к распаду на составляющие элементы в силу того, что энергия формирования принимает отрицательные значения и ее величина возрастает по модулю с ростом содержания Mn. Однако, если рассмотреть более сложные продукты распада, наблюдаемые экспериментально [24–29], то можно наблюдать противоположную тенденцию (рис. 3, б). Все нестехиометрические композиции в аустенитной и мартенситной фазе с различным атомным и магнитным упорядочением оказываются нестабильными ввиду положительного значения энергии смешивания, т.е. однофазность в таких соединениях в условиях равновесия может остаться под вопросом. Стоит упомянуть, что богатые марганцем сплавы Гейслера характеризуются сильными конкурирующими ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями, которые носят дальнедействующий колебательный характер. Следовательно, чем больше избыточных атомов Mn будет появляться в подрешетке

Sb, тем сильнее будет данная конкуренция. Из рис. 3, *b* следует, что энергия смешивания, как и ее разница для аустенитной и мартенситной фазы увеличиваются для всех составов с уменьшением содержания сурьмы, тем самым, подтверждая тенденцию к сегрегации на ФМ кубическую $L2_1$ фазу Ni_2MnSb и АФМ тетрагональную $L1_0$ фазу $NiMn$. Стабильными остаются лишь стехиометрические составы Ni_2MnSb и $NiMn$.

4. Заключение

В данной работе представлены исследования магнитных и структурных свойств сплавов Гейслера $Ni_2Mn_{1+x}Sb_{1-x}$ в зависимости от атомного и магнитного упорядочения. Показано, что для всех нестехиометрических композиций наиболее энергетически выгодным упорядочением является ферромагнитное с шахматным порядком атомов Mn, при этом мартенситный переход возможен для композиций $x > 0.25$. Напротив, послойное упорядочение атомов Mn для каждой композиции приводит к возникновению только мартенситной фазы. Обнаружено, что в стехиометрии кубическая фаза с шахматным атомным упорядочением и тетрагональная фаза с послойным расположением атомов Mn близки по энергиям, разница с более выгодной кубической фазой составляет около 4.424 meV/atom, что говорит о возможной вырожденности аустенитной фазы и ее многофазности. Исследование тенденций к сегрегации сплавов с избыточным содержанием марганца в аустенитной и мартенситной фазе с учетом различного магнитного и атомного упорядочения показывает их неустойчивость по отношению к распаду на двухфазную систему, состоящую из трехкомпонентного стехиометрического соединения кубической фазы $L2_1$ и бинарного соединения тетрагональной фазы $L1_0$. Устойчивость демонстрируют только стехиометрические составы Ni_2MnSb и $NiMn$.

Финансирование работы

Расчеты структур с расположением атомов в шахматном порядке выполнены при поддержке проекта РНФ № 17-72-20022. Расчеты структур с расположением атомов в послойном порядке выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-00992-21-00.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K. Ullakko, J. Huang, C. Kantner, R. O'Handley, V. Kokorin. *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1966 (1996).
- [2] S.J. Murray, M. Marioni, S. Allen, R. O'Handley, T.A. Lograsso. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 886 (2000).
- [3] A. Sozinov, A. Likhachev, N. Lanska, K. Ullakko. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1746 (2002).
- [4] M. Chmielus, X. Zhang, C. Witherspoon, D. Dunand, P. Müllner. *Nature Mater.* **8**, 863 (2009).
- [5] J. Marcos, A. Planes, L. Mañosa, F. Casanova, X. Batlle, A. Labarta, B. Martínez. *Phys. Rev. B* **66**, 224413 (2002).
- [6] F.-X. Hu, B.-G. Shen, J.-R. Sun, G.-H. Wu. *Phys. Rev. B* **64**, 132412 (2001).
- [7] T. Krenke, E. Duman, M. Acet, E.F. Wassermann, X. Moya, L. Mañosa, A. Planes, E. Suard, B. Ouladdiaf. *Phys. Rev. B* **75**, 104414 (2007).
- [8] M. Pasquale, C.P. Sasso, L.H. Lewis, L. Giudici, T. Lograsso, D. Schlagel. *Phys. Rev. B* **72**, 094435 (2005).
- [9] А.П. Каманцев, Ю.С. Кошкидько, Э.О. Быков, В.С. Калашников, А.В. Кошелев, А.В. Маширов, И.И. Мусабиров, М.А. Пауков, В.В. Соколовский. *ФТТ* **62**, 727 (2020).
- [10] О.Н. Мирошкина, В.В. Соколовский, М.А. Загребин, С.В. Таскаев, В.Д. Бучельников. *ФТТ* **62**, 697 (2020).
- [11] C. Biswas, R. Rawat, S. Barman. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 202508 (2005).
- [12] V. Sharma, M. Chattopadhyay, K. Shaeb, A. Chouhan, S. Roy. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 222509 (2006).
- [13] R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, Y. Sutou, H. Morito, S. Okamoto, O. Kitakami, K. Oikawa, A. Fujita, T. Kanomata, K. Ishida. *Nature* **439**, 957 (2006).
- [14] R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, H. Morito, Y. Sutou, K. Oikawa, A. Fujita, K. Ishida, S. Okamoto, O. Kitakami, T. Kanomata. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 192513 (2006).
- [15] V. Khovaylo, K. Skokov, O. Gutfleisch, H. Miki, R. Kainuma, T. Kanomata. *Appl. Phys. Lett.* **97**, 052503 (2010).
- [16] Z. Li, C. Jing, J. Chen, S. Yuan, S. Cao, J. Zhang. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 112505 (2007).
- [17] M. Khan, I. Dubenko, S. Stadler, N. Ali. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 072510 (2007).
- [18] О.Н. Мирошкина, М.А. Загребин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников. *ФТТ* **60**, 1127 (2018).
- [19] K. Koyama, H. Okada, K. Watanabe, T. Kanomata, R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa, K. Ishida. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 182510 (2006).
- [20] S. Yu, Z. Liu, G. Liu, J. Chen, Z. Cao, G. Wu, B. Zhang, X. Zhang. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 162503 (2006).
- [21] M.K. Ray, B. Maji, M. Modak, S. Banerjee. *J. Magn. Magn. Mater.* **429**, 110 (2017).
- [22] N.V. Rama Rao, R. Gopalan, V. Chandrasekaran, K.G. Suresh. *Appl. Phys. A* **99**, 265 (2010).
- [23] Z. Han, D. Wang, C. Zhang, H. Xuan, B. Gu, Y. Du. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 042507 (2007).
- [24] W.M. Yuhasz, D.L. Schlagel, Q. Xing, K.W. Dennis, R.W. Mc Callum, T.A. Lograsso. *J. Appl. Phys.* **105**, 07A921 (2009).
- [25] W.M. Yuhasz, D.L. Schlagel, Q. Xing, R.W. Mc Callum, T.A. Lograsso. *J. Alloys Compd.* **492**, 681 (2010).
- [26] T. Krenke, A. Çakir, F. Scheibel, M. Acet, M. Farle. *J. Appl. Phys.* **120**, 243904 (2016).
- [27] A. Çakir, M. Acet, M. Farle. *Sci. Rep.* **6**, 28931 (2016).
- [28] A. Çakir, M. Acet. *AIP Adv.* **7**, 056424 (2017).
- [29] A. Çakir, M. Acet, U. Wiedwald, T. Krenke, M. Farle. *Acta Mater.* **127**, 117 (2017).
- [30] Y. Sutou, Y. Imano, N. Koeda, T. Omori, R. Kainuma, K. Ishida, K. Oikawa. *Appl. Phys.* **85**, 4358 (2004).
- [31] M. Khan, I. Dubenko, S. Stadler, N. Ali. *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 235204 (2008).

- [32] W.J. Feng, Q. Zhang, L.Q. Zhang, B. Li, J. Du, Y.F. Deng, Z.D. Zhang. *Solid State Commun.* **150**, 949 (2010).
- [33] B. Kwon, Y. Sakuraba, H. Sukegawa, S. Li, G. Qu, T. Furubayashi, K. Hono. *J. Appl. Phys.* **119**, 023902 (2016).
- [34] J. Ruzs, L. Bergqvist, J. Kudrnovský, I. Turek. *Phys. Rev. B* **73**, 214412 (2006).
- [35] J. Ruzs, J. Kudrnovský, I. Turek. *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1654 (2007).
- [36] S. Ghosh, S. Ghosh. *Phys. Rev. B* **99**, 064112 (2019).
- [37] G. Kresse, J. Furthmüller. *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [38] G. Kresse, D. Joubert. *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [39] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [40] M. Khan, N. Ali, S. Stadler. *J. Appl. Phys.* **101**, 053919 (2007).
- [41] W.J. Feng, J. Du, B. Li, W.J. Hu, Z.D. Zhang, X.H. Li, Y.F. Deng. *J. Phys. D* **42**, 125003 (2009).

Редактор Т.Н. Василевская