

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 538.958

### ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОЕДИНЕНИЯ $Mn_3Al$

© 2021 г. Ю. В. Князев<sup>a</sup>, А. В. Лукоянов<sup>a, b, \*</sup>, Ю. И. Кузьмин<sup>a</sup>, Шубра Даш<sup>c</sup>,  
Аджит К. Патра<sup>c</sup>, М. Васундхара<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

<sup>b</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

<sup>c</sup>Центральный университет Раджастана, NH-8 Бандарсиндри, Аймер, Раджастан, 305817 Индия

<sup>d</sup>Отдел полимеров и функциональных материалов, CSIR-Индийский институт  
химических технологий Тарнака, Хайдарабад, Телангана, 500007 Индия

\*e-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 18.05.2021 г.

После доработки 16.06.2021 г.

Принята к публикации 16.06.2021 г.

Представлены результаты расчета электронной структуры и исследования оптических свойств соединения  $Mn_3Al$ , находящегося в двухфазном кристаллическом состоянии. Рассчитанные плотности электронных состояний определяются широкой (~8 эВ)  $3d$ -зоной атомов Mn, уровень Ферми локализован в области высокой плотности состояний. Природа квантового поглощения света обсуждается на основе сопоставления экспериментальных и теоретических спектров межзонной оптической проводимости. Показано, что вычисленная структура энергетических зон соединения позволяет качественно интерпретировать частотную дисперсию данного спектрального параметра.

*Ключевые слова:* электронная структура, оптические свойства, соединение  $Mn_3Al$

**DOI:** 10.31857/S0015323021100041

#### ВВЕДЕНИЕ

Среди многочисленного семейства сплавов Гейслера особый интерес вызывают соединения на основе марганца  $Mn_2YAl$  ( $Y$  – переходный металл). Данные материалы обладают вариативными магнитными и структурными фазовыми диаграммами, а также целым рядом необычных физических свойств [1–6]. Экспериментальные и теоретические [7–12] исследования подтвердили возможность реализации в этих соединениях состояния полуметаллического ферромагнетика (ПМФ), характеризуемого сильной поляризацией носителей заряда. Расчеты зонного спектра данных соединений показали, что в плотности электронных состояний в одной из систем спин-поляризованных полос на уровне Ферми  $E_F$  образуется энергетическая щель, тогда как в системе с противоположным направлением спина энергетические зоны пересекают  $E_F$ . Величина щели, возникающей в результате сильной гибридизации между  $d$ -состояниями Mn и  $Y$ -элемента, по теоретическим оценкам может существенно отличаться и варьируется в пределах 0.6–1.5 эВ. В экспериментах полуметаллический тип проводи-

мости ряда соединений  $Mn_2YAl$  проявился косвенно в виде аномалий магнитных и транспортных свойств, характер которых не всегда позволяет однозначно оценивать степень спиновой поляризации. В связи с этим следует отметить результаты теоретических исследований [13–16], в которых показано, что атомный беспорядок, термически активированное межэлектронное взаимодействие, а также учет квантовых эффектов электрон-магнетонного типа могут привести к деполяризации и появлению электронных состояний внутри щели, тем самым частично разрушая состояние ПМФ. Как правило, соединения  $Mn_2YAl$ , проявляющие полуметаллические свойства, упорядочены в структурах одного из двух типов: кубической  $L2_1$  ( $Cu_2MnAl$ , пространственная группа  $Fm-3m$ , 225) или инверсной  $X_\alpha$  ( $Hg_2CuTi$ , группа  $F-43m$ , 216). При определенных условиях в данных материалах возможно образование геометрически фрустрированной кубической  $\beta$ -Mn ( $P4_32$ , 213) и тетрагональной ( $P4/mmm$ , 123) структур с антиферромагнитным упорядочением магнитных моментов [3, 17–20]. Расчеты электронной структуры, выполненные для  $Mn_2FeAl$  [21–25], показали, что

энергетический спектр соединения, находящегося в  $\beta$ -Mn фазе, соответствует металлическому состоянию сплава.

Одним из материалов, относящихся к рассматриваемой системе, является ферримагнитный сплав  $Mn_3Al$ . Зонные расчеты в случае идеальных  $L_{21}$ - и  $X_\alpha$ -структур дают полуметаллическое состояние с почти 100%-ной спиновой поляризации [21–24]. Данные для реальных образцов свидетельствуют о свойствах антиферромагнетика или компенсированного ферримагнетика [21]. В данном сплаве наблюдается аномальное поведение электросопротивления, когда на кривой  $\rho(T)$  присутствуют участки с отрицательным и нулевым температурным коэффициентом [9, 10, 21]. При этом концентрация носителей тока  $N \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$  типична для сред с металлическим типом проводимости. Температурная зависимость намагниченности  $Mn_3Al$  демонстрирует наличие особенности, локализация которой коррелирует с указанной аномалией  $\rho(T)$ , что, как отмечается в [9], может быть связано с фазовым магнитным переходом. В данной работе для изучения электронных характеристик  $Mn_3Al$  используется метод, сочетающий оптический эксперимент и расчеты электронной структуры в рамках *ab initio* подхода.

## ЭКСПЕРИМЕНТ

Поликристаллический сплав  $Mn_3Al$  был выплавлен в атмосфере очищенного аргона из металлов высокой чистоты (99.99%), взятых в стехиометрических пропорциях. С целью гомогенизации полученные слитки сначала отжигали при температуре  $\sim 1000^\circ\text{C}$  в течение 24 ч, а затем при  $650^\circ\text{C}$  в течение 4 сут. Рентгеноструктурные исследования порошковых образцов проведены на дифрактометре высокого разрешения PANanalytical Empyrean в Cu  $K\alpha$ -излучении с шагом сканирования  $0.013^\circ$  в интервале углов  $20^\circ$ – $80^\circ$ . Расчет параметров решетки и анализ фазового состава осуществлен на базе программы FullProf. Результаты исследования показали, что сплав кристаллизуется в двухфазном состоянии: помимо кубической фазы типа  $\beta$ -Mn (группа  $P4_132$ , номер 213, параметры решетки  $a = b = c = 6.416 \text{ \AA}$ , массовая доля  $\approx 70\%$ ) реализуется также тетрагональная структура (группа  $P4/mmm$ , номер 123, параметры решетки  $a = b = 2.7746 \text{ \AA}$ ,  $c = 3.534 \text{ \AA}$ , массовая доля  $\approx 30\%$ ). Дифрактограмма порошкового сплава  $Mn_3Al$  представлена на рис. 1.

Оптические свойства сплава изучены при комнатной температуре в интервале длин волн  $\lambda = 0.22$ – $16 \text{ мкм}$  (энергия фотонов  $E = 0.078$ – $5.64 \text{ эВ}$ ), охватывающем ультрафиолетовую, видимую и инфракрасную области спектра. В экс-

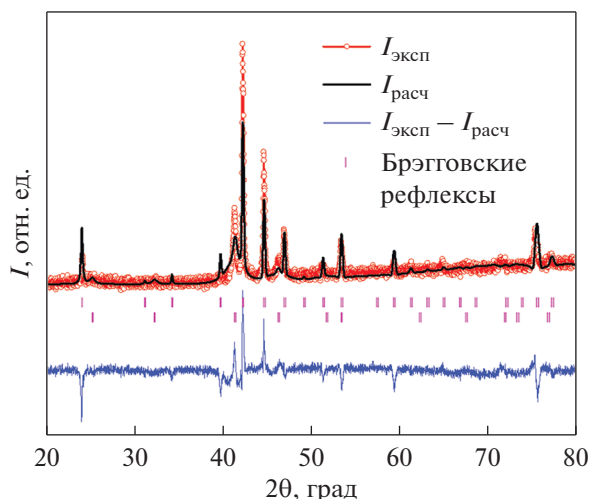
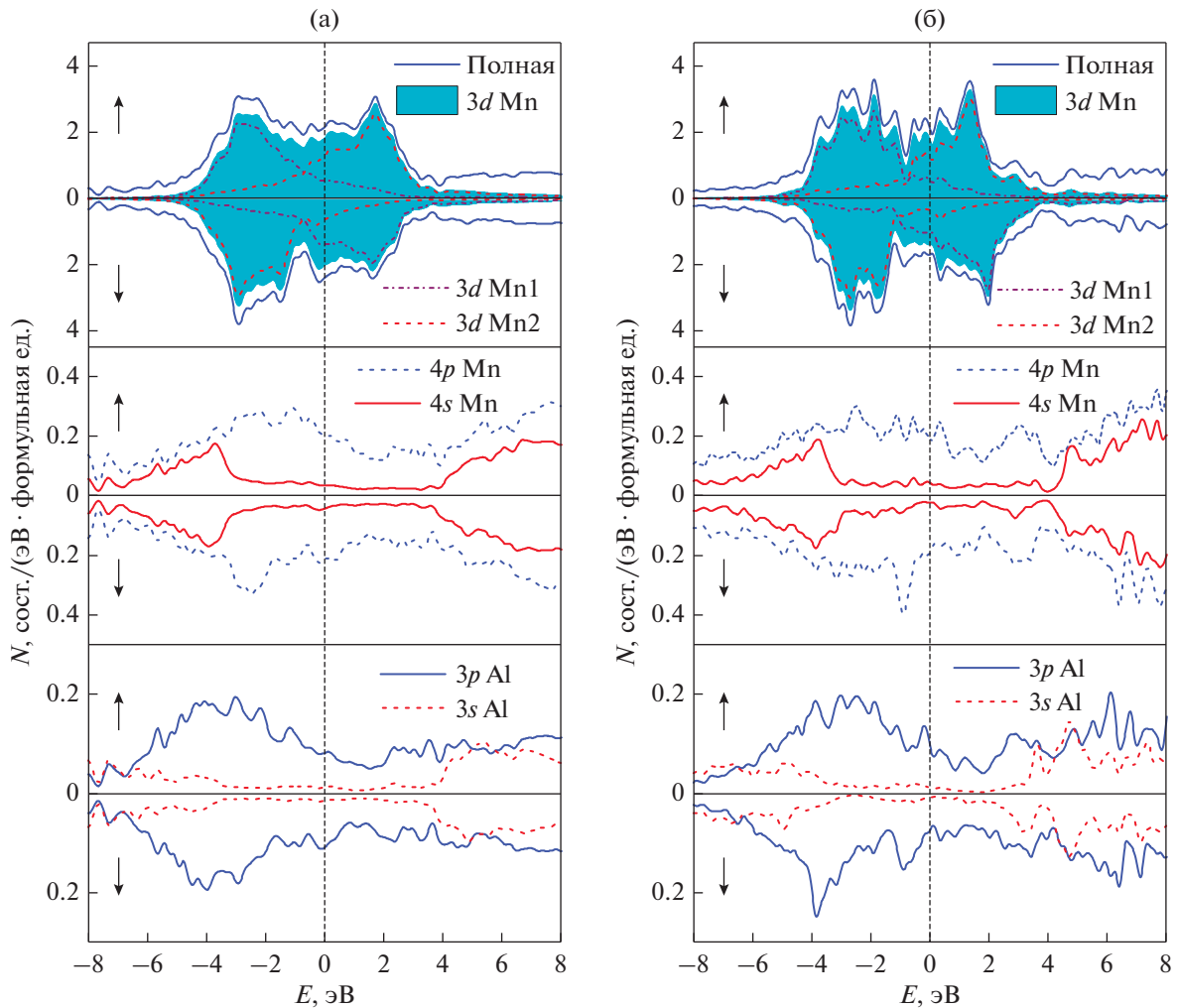


Рис. 1. Экспериментальная и рассчитанная дифрактограмма порошкового сплава  $Mn_3Al$ .

перименте использован метод эллисометрии, основанный на определении разности фаз и амплитуды световых волн  $s$ - и  $p$ -поляризации, отраженных от зеркальной поверхности образца. Точность измерений составляла 2–3%, увеличиваясь по краям исследуемого интервала до 5%. Указанные параметры, зависящие от длины волны падающего излучения, позволяют рассчитать оптические постоянные соединения – показатели преломления  $n(\lambda)$  и поглощения  $k(\lambda)$ , а также действительную  $\epsilon_1$  и мнимую  $\epsilon_2$  части комплексной диэлектрической проницаемости, оптическую проводимость  $\sigma$  и отражательную способность  $R$ .

## РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

В данной работе теоретические расчеты для сплава  $Mn_3Al$  для двух кристаллических фаз были выполнены на базе компьютерного пакета программ Quantum Espresso [25] с использованием экспериментальных значений постоянной решетки. В наших расчетах применяли приближение обобщенной градиентной поправки (GGA) версии Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [26]. Интегрирование в обратном пространстве проведено по сетке из  $12 \times 12 \times 12$   $k$ -точек. В базис орбитальных состояний были включены  $3d$ -,  $4s$ -,  $4p$ -состояния марганца и  $3s$ -,  $3p$ -состояния алюминия. Волновые функции в расчетах были разложены по плоским волнам. Расчеты проводили с использованием стандартных ультрамягких псевдопотенциалов из библиотеки компьютерного пакета программ Quantum Espresso. Для достижения достаточной сходимости в цикле самосогласования при расчете использовали предел энергии 60 Ry для плоских волн.



**Рис. 2.** Полная и парциальные плотности состояний антиферромагнитного соединения  $Mn_3Al$  в кубической (а) и тетрагональной (б) кристаллических фазах.

В соединении  $Mn_3Al$  кубическая фаза  $\beta$ -Mn типа характеризуется атомными позициями с точечной симметрией  $8c$  (0.063; 0.063; 0.063) и  $12d$  (0.125; 0.203; 0.453). В расчетах позиции типа  $12d$  полностью заполнены атомами Mn в согласии с теоретическими результатами близкого по составу и структуре сплава  $Mn_2FeAl$  [20]. В позициях  $8c$  располагаются 5 атомов Al и 3 Mn. Более выгодным по полной энергии оказался антиферромагнитный тип упорядочения магнитных моментов ионов марганца с величиной от 1.6 до 3.0  $\mu_B$  на ион Mn. Полный магнитный момент в этом случае составляет 1.1  $\mu_B$ , магнитный момент на ионах алюминия близок к нулю. В тетрагональной кристаллической фазе атомы Al располагаются в позиции типа  $1a$  (0; 0; 0), атомы Mn — в позиции типа  $1d$  (0.5; 0.5; 0.5) и также частично в  $1a$ . В расчете рассмотрена ячейка с двумя формульными единицами  $Mn_3Al$ , что позволило рассмотреть ферромагнитное и антиферромагнитное упорядоче-

ния. Более выгодным по полной энергии оказался АФМ тип упорядочения магнитных моментов ионов марганца с величиной от 2.5 до 3.0  $\mu_B$  на ион Mn. Полный магнитный момент в этом случае составляет 0.3  $\mu_B$ , магнитный момент на ионах Al близок к нулю. Данный результат согласуется с экспериментальными данными, свидетельствующими, что данное соединение может проявлять свойства антиферромагнетика или компенсированного ферромагнетика [21].

На рис. 2 представлены результаты расчета полных  $N(E)$  и парциальных плотностей электронных состояний  $Mn_3Al$  для кубической и тетрагональной кристаллических фаз. Указанные зависимости приведены для двух систем энергетических зон, характеризующихся взаимно противоположной ориентацией спина ( $\uparrow$  и  $\downarrow$ ). Области высоких значений  $N(E)$  выше и ниже уровня Ферми  $E_F$  связаны преимущественно с сильно гибридованными  $3d$ -состояниями Mn. Эти со-

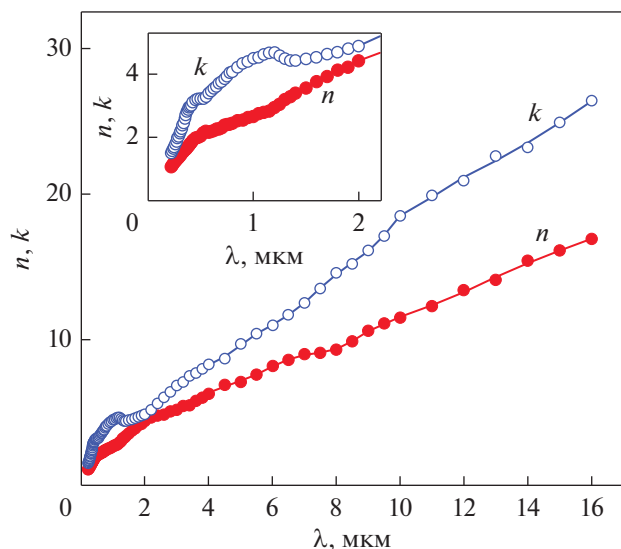


Рис. 3. Дисперсия оптических постоянных  $n$  и  $k$  соединения  $Mn_3Al$ .

стояния расположены в обеих системах зон в интервале  $\sim -4 \text{ эВ} < E_F < 4 \text{ эВ}$ . Можно заметить, что поляризованные  $3d$ -электронные состояния  $Mn1$  и  $Mn2$  ионов в противоположных спиновых проекциях почти компенсируют друг друга. Интенсивности более протяженных парциальных плотностей состояний  $Mn 4p$ -,  $4s$ - и  $Al 3p$ -,  $3s$ -электронов имеют существенно меньшие значения. Общие картины заселенности энергетических зон со спинами, направленными вдоль ( $\uparrow$ ) и против ( $\downarrow$ ) намагниченности, для каждой кристаллической фазы носят довольно близкий по форме характер. Существенно, что структура энергетических зон  $Mn_3Al$  в обеих кристаллических фазах соответствует металлическому типу проводимости материала, а уровень Ферми локализован вблизи высоких значений плотности состояний.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Зависимость оптических постоянных  $n$  и  $k$  от длины волны света представлена на рис. 3. С увеличением  $\lambda$ , за исключением коротковолнового участка спектра (до  $\sim 1.5$  мкм), наблюдается монотонный рост этих параметров. Во всем исследуемом диапазоне выполняется неравенство  $k > n$ , что соответствует отрицательным значениям действительной части диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ . Такое поведение оптических характеристик, как правило, типично для материалов с металлическим типом проводимости. Зависимость  $\epsilon_1$  от энергии световой волны представлена на рис. 4 совместно с отражательной способностью соединения  $R = [(n - 1)^2 + k^2] / [(n + 1)^2 + k^2]$ . Рисунок показывает, что с уменьшением энергии

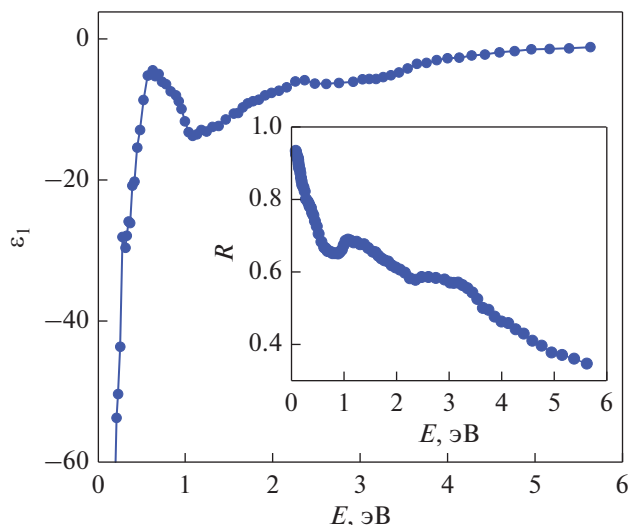
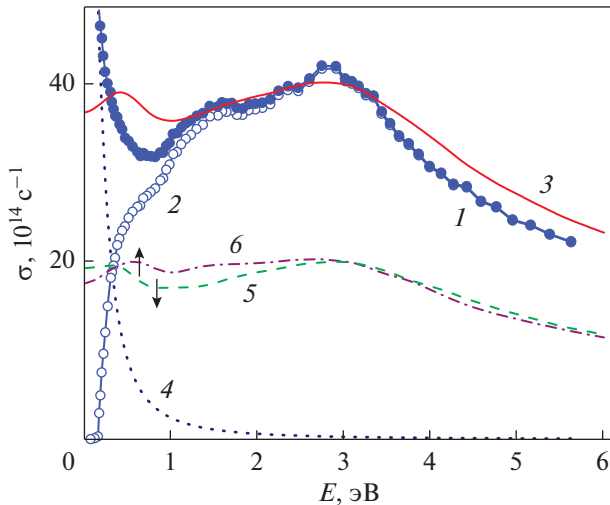


Рис. 4. Энергетические зависимости действительной части диэлектрической проницаемости и отражательной способности (вставка) соединения  $Mn_3Al$ .

квантов происходит сильный рост  $R$ , которая на конце длинноволнового интервала достигает значения 0.94. Полученные значения оптических постоянных использованы также для расчета дисперсионной зависимости оптической проводимости соединения  $\sigma(\omega) = \epsilon_2 \omega / 2\pi$  ( $\omega$  – частота света,  $\epsilon_2 = 2nk$  – мнимая часть диэлектрической проницаемости) – параметра, наиболее выразительно характеризующего амплитудные и частотные аномалии спектрального отклика отражающей среды. В отличие от статической проводимости, структурные особенности  $\sigma(\omega)$  определяются не только плотностью состояний на  $E_F$ , но и характером распределения  $N(E)$  во всей исследуемой области энергий.

Дисперсионная зависимость оптической проводимости соединения представлена на рис. 5 (темные кружки). Профиль данной кривой характеризуется резким спадом в низкоэнергетической области сменяющимся с ростом энергии фотона подъемом и последующим образованием двух максимумов при 1.5 и 2.8 эВ. Такое поведение оптической проводимости, характеризующее отчетливым выделением участков кривой, соответствующих внутри- и межзонному поглощению света, типично для высокопроводящих сред. В ИК-области при  $E < \sim 0.5$  эВ частотная дисперсия соответствует друдевской модели  $\sigma \sim \omega^{-2}$ . В данном интервале спектра интерпретация оптических свойств, основанная на линейном уравнении движения электрона в переменном электромагнитном поле [27], дает возможность рассчитать такие характеристики носителей тока, как плазменные  $\omega_p = 5.7 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$  и релаксационные  $\gamma = 2.9 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$  частоты. Указанные параметры



**Рис. 5.** Спектры оптической проводимости соединения  $Mn_3Al$ . Темные кружки (1) — эксперимент, светлые кружки (2) — межзонный вклад, сплошная линия (3) — расчет по плотности состояний (в произвольных единицах), пунктир (4) — друдевский вклад, штриховая (5) и штрихпунктирная линии (6) — вклады от электронных переходов в двух спиновых подсистемах.

определяют, соответственно, частоту коллективных колебаний и суммарную величину всех типов рассеяния электронов. Полученное значение  $\omega_p$  позволяет на основе выражения  $N = \omega_p^2 m / 4\pi e^2$  ( $m$  и  $e$  — масса и заряд электрона) определить концентрацию электронов проводимости данного материала, которая составляет  $N = 8.6 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ . По порядку величины данное значение согласуется с результатом, полученным из эксперимента по исследованию эффекта Холла [9]. Кроме того, параметры  $\gamma$  и  $\omega_p$ , согласно соотношению  $\sigma_D(\omega) = \omega_p^2 \gamma / 4\pi(\omega^2 + \gamma^2)$ , дают возможность выделить внутризонный (друдевский) вклад в оптическую проводимость соединения. Структура зависимости  $\sigma_D(E)$ , показанной пунктиром на рис. 5, свидетельствует о том, что при энергиях выше  $\sim 1.5$  эВ данный механизм фотовозбуждения электронов становится малозначимым. На рисунке также хорошо видно, что в низкоэнергетическом интервале внутри- и межзонные вклады сосуществуют.

С ростом энергии фотона (видимая и УФ-области) в спектре  $\sigma(\omega)$  наблюдаются аномалии в виде полос межзонного поглощения света, указывающие на проявление квантового характера взаимодействия электромагнитных волн с электронами. Вклад межзонного поглощения в оптическую проводимость (светлые кружки на рис. 5) можно оценить путем вычитания внутризонной составляющей из экспериментальной зависимости  $\sigma_{\text{inter}}(\omega) = \sigma(\omega) - \sigma_D(\omega)$ . В диапазоне частот, где доминирует квантовый механизм возбужде-

ния электронов, особенности дисперсионной зависимости  $\sigma(\omega)$  определяются реальным строением зонной структуры изучаемого соединения. Поэтому для понимания природы интенсивного квантового поглощения в  $Mn_3Al$  представляет интерес сопоставить эмпирическую кривую  $\sigma_{\text{inter}}(\omega)$  с теоретической зависимостью данной функции, рассчитанной с учетом плотностей состояний, представленных на рис. 2. Вычисление межзонной оптической проводимости выполнено в соответствии с методом [28] на основе свертки парциальных  $N(E)$  ниже и выше  $E_F$ . Учитывали правила отбора, при которых указанные плотности состояний должны принадлежать атомам одного типа, соответствовать определенной проекции спина и их квантовые числа должны отличаться на  $\Delta l = \pm 1$ . Полученные свертки, при учете аддитивности вкладов от каждой спиновой подсистемы, просуммированы в соответствии с количеством атомов данного типа в элементарной ячейке. С учетом того, что в соединении реализовано двухфазное кристаллическое состояние, процедура вычислений была двухступенчатой. Сначала спектр  $\sigma_{\text{inter}}(\omega)$  рассчитывали для каждой из двух фаз отдельно, а затем производили их усреднение с соответствующими весовыми множителями. Отметим, что данный расчет, представленный на рис. 5, носит качественный характер, поскольку выполнен в предположении равной вероятности прямых и непрямых межзонных переходов.

При сопоставлении экспериментальных и теоретических зависимостей межзонной оптической проводимости обращает внимание их существенное сходство при  $E > 1$  эВ. В частности, в рассчитанном спектре довольно хорошо воспроизводится интервал наиболее интенсивного поглощения, а также его спад при  $E > \sim 3$  эВ. В то же время расчет прогнозирует наличие значительного межзонного поглощения ниже  $\sim 1$  эВ, остающегося большим вплоть до нулевой энергии. Возникновение такого вклада обусловлено высокой плотностью  $3d$ -состояний  $Mn$  на  $E_F$ . В экспериментальной зависимости  $\sigma_{\text{inter}}(\omega)$  такой вклад проявился существенно слабее — в основном, выше энергии  $\sim 0.2$  эВ. К аномально высоким значениям низкочастотной проводимости приводит использование при расчете приближения постоянных матричных элементов, при котором переходы в пределах одной энергетической зоны могут иметь ненулевую вероятность. Парциальные вклады в межзонную оптическую проводимость от каждой из спин-поляризованных зон, определяемые в процессе расчета, также представлены на рис. 5. Видно, что эти вклады почти сопоставимы между собой по всей области энергий.

Таким образом, расчетами электронной структуры двухфазного соединения  $Mn_3Al$  показано формирование широкой ( $\sim 8$  эВ) энергетической



зоны, связанной преимущественно с  $3d$ -электронами атомов Mn. При этом электронные состояния обладают малой спиновой поляризацией, а уровень Ферми локализован в области высокой плотности состояний, что указывает на металлический характер проводимости сплава. Квантовое поглощение света в ближней ИК, видимой и УФ-областях спектра связано с электронными переходами между состояниями данной зоны, расположенными ниже и выше  $E_F$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты спин-поляризованных расчетов электронной структуры соединения  $Mn_2Al$ , находящегося в двухфазном кристаллическом состоянии. На основе полученных данных вычислен спектр оптической проводимости в области межзонного поглощения света. Оптические исследования, проведенные эллипсометрическим методом в широком диапазоне длин волн, свидетельствуют о качественном соответствии эксперимента с рассчитанной картиной зонного спектра. Показано, что структурные особенности энергетической зависимости межзонной оптической проводимости, за исключением низкочастотного диапазона, удовлетворительно воспроизводятся в рамках представленного расчета. Металлический тип электропроводности данного соединения, предсказываемый вычислениями, также подтверждается результатами оптического эксперимента.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема “Электрон”, № АААА-А18-118020190098-5) при поддержке РФФИ (проект № 19-52-45008) и DST в Нью-Дели, Индия (грант № INT/RUS/RFBR/379). М. Васундхара благодарит за поддержку, предоставленную отделом K&IM CSIR-Индийского института химических технологий (ICT/Pubs./2021/162).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wollmann L., Chadov S., Kübler J., Felser C.* Magnetism in cubic manganese-rich Heusler compounds // *Phys. Rev. B.* 2014. V. 90. № 21. P. 214420.
2. *Jum’h I., Sâad essaoud S., Baaziz H., Charifi Z., Telfah A.* Electronic and magnetic structure and elastic and thermal properties of  $Mn_2$ -based full Heusler alloys // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2019. V. 32. P. 3915–3926.
3. *Gavrikov I., Seredina M., Zheleznyy M., Shchetinin I., Karpenkov D., Bogach A., Chatterjee R., Khovaylo V.* Magnetic and transport properties of  $Mn_2FeAl$  // *JMMM.* 2019. V. 478. № 1. P. 55–58.
4. *Stewart J.R., Andersen K.H., Cywinski R.* Neutron polarization analysis study of the frustrated magnetic ground state of  $\beta$ - $Mn_{1-x}Al_x$  // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 78. P. 014428.
5. *Morsli A., Bentouaf A., Mahdad B.A., Ameri I., Ameri M., Aïssa B.* Structural, electronic, elastic, magnetic and thermodynamic properties of  $Mn_2LuZ$  ( $Z = B, Al, Ga$  and  $In$ ) Heusler compounds: a first-principle study // *Int. J. Quantum Chem.* 2021. V. 121. № 9. P. e26601.
6. *Asvini V., Saravanan G., Kalaezhily R.K., Ganesan V., Ravichandran K.* Soft ferromagnetic properties of half-metallic  $Mn_2CoAl$  Heusler alloy nanoparticles for spintronic applications // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2020. V. 33. P. 2759–2766.
7. *Luo H., Zhu Z., Ma L., Xu S., Zhu X., Jiang C., Xu H., Wu G.* Effect of site preference of  $3d$  atoms on the electronic structure and half-metallicity of Heusler alloy  $Mn_2YAl$  // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008. V. 41. P. 055010.
8. *Luo H.Z., Zhang H.W., Zhu Z.Y., Ma L., Xu S.F., Wu G.H., Zhu X.X., Jiang C.B., Xu H.B.* Half-metallic properties for the  $Mn_2FeZ$  ( $Z = Al, Ga, Si, Ge, Sb$ ) Heusler alloys: a first-principles study // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. № 8. P. 083908.
9. *Марченков В.В., Ирхин В.Ю., Перевозчикова Ю.А., Терентьев П.Б., Семянникова А.А., Марченкова Е.Б., Эйстерер М.* Кинетические свойства и полуметаллический магнетизм в сплавах Гейслера  $Mn_2YAl$  // *ЖЭТФ.* 2019. Т. 155. № 6. С. 1083–1090.
10. *Marchenkov V.V., Irkhin V.Yu., Perevozchikova Yu.A.* Peculiarities of electronic transport and magnetic state in half-metallic ferromagnetic and spin gapless semiconducting Heusler alloys // *Phys. Met. Metallogr.* 2019. V. 120. № 13. P. 1325–1332.
11. *Шредер Е.И., Махнев А.А., Лукоянов А.В., Марченков В.В.* Электронная структура и оптические свойства сплава  $Mn_{1.8}Co_{1.2}Al$  и состояние спинового бесщелевого полупроводника // *ФММ.* 2018. Т. 119. № 11. P. 1127–1131.
12. *Шредер Е.И., Лукоянов А.В., Махнев А.А., Даш С., Патра А., Васундхара М.* Электронная структура и оптические свойства сплава Гейслера  $Mn_2CrAl$  // *ФММ.* 2020. V. 121. № 6. P. 589–593.
13. *Orgassa D., Fujiwara H., Schulthess T.C., Butler W.H.* First-principles calculation of the effect of atomic disorder on the electronic structure of the half-metallic ferromagnet  $NiMnSb$  // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 60. № 19. P. 13237–13240.
14. *Alling B., Shallcross S., Abrikosov I.A.* Role of stoichiometric and nonstoichiometric defects on the magnetic properties of the half-metallic ferromagnet  $NiMnSb$  // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73. № 6. P. 064418.
15. *Skomski R.* Finite-temperature depolarization in half metals // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2007. V. 19. № 31. P. 315202.
16. *Katsnelson M.I., Irkhin V.Yu., Chioncel L., Lichtenstein A.I., de Groot R.A.* Half-metallic ferromagnets: from band structure to many-body effects // *Rev. Mod. Phys.* 2008. V. 80. № 2. P. 315–378.
17. *Ilyushin A.S., Wallace W.E.* Structural and magnetic properties of the  $Fe_{3-x}Mn_xAl$  system // *J. Sol. State Chem.* 1976. V. 17. № 4. P. 385–387.
18. *Hafner J., Hobbs D.* Understanding the complex metallic element Mn. II. Geometric frustration in  $\beta$ -Mn, phase stability, and phase transitions // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. № 1. P. 014408.
19. *Paddison J.A.M., Stewart J.R., Manuel P., Courtois P., McIntyre G.J., Rainford B.D., Goodwin A.L.* Emergent

- frustration in Co-doped  $\beta$ -Mn // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110. № 26. P. 267207.
20. *Dash S., Lukoyanov A.V., Nancy, Mishra D., Mohamed Rasi U.P., Gangineni R.B., Vasundhara M., Patra A.K.* Structural stability and magnetic properties of  $\text{Mn}_2\text{FeAl}$  alloy with a  $\beta$ -Mn structure // *JMMM*. 2020. V. 513. P. 167205.
  21. *Jamer M.E., Wang Y.J., Stephen G.M., McDonald I.J., Grutter A.J., Sterbinsky G.E., Arena D.A., Borchers J.A., Kirby B.J., Lewis L.H., Barbiellini B., Bansil A., Heiman D.* Compensated ferrimagnetism in the zero-moment Heusler alloy  $\text{Mn}_3\text{Al}$  // *Phys. Rev. Appl.* 2017. V. 7. № 6. P. 064036.
  22. *Li T., Khenata R., Cheng Z., Chen H., Yuan H., Yang T., Kuang M., Bin Omran S., Wang X.* Martensitic transformation, electronic structure and magnetism in  $\text{D}_{03}$ -ordered  $\text{Mn}_3\text{Z}$  ( $Z = \text{B, Al, Ga, Ge, Sb}$ ) alloys // *Acta Cryst.* 2018. V. B74. P. 673–680.
  23. *Han J., Wu X., Feng Y., Gao G.* Half-metallic fully compensated ferrimagnetism and multifunctional spin transport properties of  $\text{Mn}_3\text{Al}$  // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2019. V. 31. № 30. P. 305501.
  24. *Li Q.F., Yang C.H., Su J.L.* Effect of doping V on the half-metallic and magnetic properties of  $\text{Mn}_3\text{Al}$  inter-metallic compound // *Physica B. Condens. Matter.* 2011. V. 406. № 19. P. 3726–3730.
  25. *Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Dabo I., Dal Corso A., de Gironcoli S., Fabris S., Fratesi G., Gebauer R., Gerstmann U., Gougoussis C., Kokalj A., Lazzeri M., Martin-Samos L., Marzari N., Mauri F., Mazzarello R., Paolini S., Pasquarello A., Paulatto L., Sbraccia C., Scandolo S., Sclauzero G., Seitsonen A.P., Smogunov A., Umari P., Wentzcovitch R.M.* Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009. V. 21. № 39. P. 395502.
  26. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868.
  27. *Соколов А.В.* Оптические свойства металлов. М: ГИФМЛ, 196. 464 с.
  28. *Mazin I.I., Singh D.J., Ambrosch-Draxl C.* Transport, optical, and electronic properties of the half-metal  $\text{CrO}_2$  // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. № 1. P. 411–418.