

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ
И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 538.958

ЭВОЛЮЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ
 $GdTi_{0.05}Mn_xFe_{0.95-x}Si$ ПО ДАННЫМ ЗОННЫХ РАСЧЕТОВ
И ОПТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

© 2021 г. Ю. В. Князев^а, Л. Н. Граматеева^а, А. В. Лукоянов^{а, б, *},
Ю. И. Кузьмин^а, А. Г. Кучин^а, С. П. Платонов^а

^аИнститут физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

^бУральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

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

Поступила в редакцию 19.11.2020 г.

После доработки 22.12.2020 г.

Принята к публикации 30.12.2020 г.

Представлены результаты исследований электронной структуры и оптических свойств интерметаллических соединений $GdTi_{0.05}Mn_xFe_{0.95-x}Si$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 0.95$). В рамках метода DFT + U с учетом влияния сильных электронных корреляций в $4f$ -оболочке Gd рассчитаны спин-поляризованные плотности электронных состояний и спектры оптической проводимости. Эллипсометрическим методом в энергетическом интервале 0.078–4.6 эВ измерены оптические свойства данных материалов. Природа квантового поглощения света обсуждается на основе сравнения экспериментальных и теоретических спектров межзонной оптической проводимости. Показано, что рассчитанные плотности электронных состояний позволяют качественно интерпретировать эволюцию оптических свойств соединений, происходящую при замещении железа марганцем.

Ключевые слова: электронная структура, оптические свойства, соединения редкоземельных металлов

DOI: 10.31857/S0015323021050077

ВВЕДЕНИЕ

Среди обширного семейства тройных интерметаллических соединений RTX ($R - 4f$ -металл, T и X, соответственно, d - и p -элементы) существенное внимание привлекают соединения силицидов редкоземельных металлов, проявляющих большую вариативность физико-химических свойств и имеющих потенциал для практического использования [1, 2]. К данным материалам относится ферромагнитный интерметаллид $GdFeSi$ (температура Кюри $T_C = 118$ К), кристаллизующийся в тетрагональной структуре типа $CeFeSi$ ($P4/nmm$) [3]. Данная структура состоит из чередующихся слоев (001) в последовательности $Gd-Si-Fe_2-Si-Gd-Gd-Si-Fe_2-Si-Gd$. Исследования [2–4] показали, что магнитный момент соединения определяется атомами Gd, в то время как атомы Fe вследствие полного заполнения $3d$ -зоны не обладают магнитным моментом. Внешние воздействия и сплавление с другими d -металлами в ряде случаев приводят к значительным изменениям свойств $GdFeSi$. Например, при гидрировании сплава происходит его структурный переход к другой тетрагональной фазе с анизотропным изменением параметров решетки и резким (до 20 К) умень-

шением температуры Кюри, а механическое измельчение приводит к образованию фазы аморфного ферромагнетизма с $T_C = 65$ К [7].

Существенные изменения магнитных и структурных параметров данного соединения были зафиксированы при замещении Fe атомами Mn, создающими добавочный магнитный момент, величина которого зависит от степени заполнения $3d$ -зоны. Тенденции концентрационной трансформации данных свойств были определены при исследовании системы сплавов $GdMn_xFe_{1-x}Si$ [8, 9], представляющих собой твердые растворы со структурой исходного соединения. Установлено, что с ростом содержания марганца, приводящего к увеличению параметров кристаллической решетки, происходят изменения в структуре $d-p$ -гибридизированных зон, а также в величине обменных взаимодействий, что является причиной резкого (до 317 К в $GdMn_{0.7}Fe_{0.3}Si$) повышения температуры Кюри. В соединении $GdMnSi$, магнитные свойства которого довольно сложны и характеризуются тремя фазовыми переходами, обнаружены большие значения магнитокалорического эффекта [4, 10]. В этом материале в условиях внешнего магнитного поля наблюдается метамаг-

нитный переход из антиферро- в ферромагнитное состояние, характеризуемый выравниванием магнитных моментов Mn вдоль гексагональной оси [11]. Установлено, что небольшое содержание Ti в GdFeSi приводит к увеличению температуры Кюри [12]. Природа модификации свойств данных сплавов при замещении Fe атомами Mn определяется характером эволюции их электронных энергетических спектров, что можно оценить при использовании метода, сочетающего оптический эксперимент и теоретические *ab initio* исследования [13]. С этой целью в настоящей работе проведены вычисления плотности электронных состояний системы интерметаллидов $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ при $x = 0, 0.4, 0.6$ и 0.95 , на основе которых проведена интерпретация спектров межзонной оптической проводимости. Ранее зонные расчеты электронной структуры, проводили для GdFeSi [14, 15] и близких соединений [16, 17], а для исследуемых составов многокомпонентных интерметаллидов данные по электронной структуре в литературе отсутствуют.

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Для вычисления электронной структуры интерметаллидов $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ применили метод DFT + U [18] в рамках пакета программ QUANTUM ESPRESSO [19]. Расчеты проведены в рамках приближения обобщенной градиентной поправки (GGA) версии Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [20] для обменно-корреляционного потенциала. Взаимодействие между ионами и валентными электронами в работе учтено в рамках метода расширенных плоских волн (PAW), волновые функции разложены по плоским волнам. В расчетах были взяты псевдопотенциалы PAW из библиотеки QUANTUM ESPRESSO и работы [21]: Gd.GGA-PBE-paw-v1.0.UPF, (Fe, Mn).pbe-spn-kjraw_psl.0.3.1.UPF, Si.pbe-n-kjraw_psl.1.0.0.UPF. В рассмотренной ячейке для всех концентраций x атомы титана явным образом не присутствовали. Для моделирования частичного замещения атомов железа атомами титана в экспериментальных составах образцов был использован метод сдвига по жесткой полосе, позволяющий учесть уменьшение полного числа электронов в системе. В результате плотности электронных состояний были смещены на -0.12 эВ. Для интегрирования в обратном пространстве использована сетка из $8 \times 8 \times 8$ \mathbf{k} -точек. Сильные электрон-электронные корреляции в $4f$ -оболочке Gd учитывали в методе DFT + U (PBE + U) параметров прямого кулоновского $U = 6.7$ эВ и обменного (хундовского) взаимодействия $J_H = 0.7$ эВ. Данные параметры использованы в первопринципных расчетах электронной структуры гадолиния и его соединений [16, 18, 22].

Плотности электронных состояний ферромагнитных соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 0.95$) состоят из двух систем полос с противоположной ориентацией спина (\uparrow и \downarrow). Результаты расчетов полных плотностей $N(E)_\uparrow$ и $N(E)_\downarrow$ для таких спин-поляризованных полос совместно с парциальными плотностями для Gd ($4f, 5d$), Fe ($3d$), Mn ($3d$), Si ($3p, 3s$) электронов представлены на рис. 1 и 2. Узкие интенсивные максимумы, связанные с $4f$ -состояниями Gd, расположены в \uparrow -системе зон вблизи 7.2 эВ ниже уровня Ферми E_F , в \downarrow -системе – при 4.7 выше E_F . Локализация этих пиков сохраняется для всех соединений. Широкие энергетические полосы, дно которых расположено при ~ 4.2 эВ ниже E_F , сформированы s -, d - и p -зонами всех элементов, входящих в составы соединений. В целом характер зависимостей $N(E)_\uparrow$ и $N(E)_\downarrow$ для каждого соединения определяется содержанием Fe и Mn. Тонкая структура данных спектров при различных концентрациях этих элементов существенно различается, что проявляется в изменении формы, локализации и сдвиге многочисленных максимумов, расположенных по обе стороны от уровня Ферми.

ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Поликристаллические образцы соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 0.95$) были приготовлены методом дуговой плавки в атмосфере чистого аргона из высокочистых металлов. Полученные сплавы подвергали гомогенизирующему отжигу при 1073 К в течение 8 суток с последующей закалкой в воду. Для определения фазового состава, типа кристаллической структуры и параметров решетки использован рентгеноструктурный анализ с применением диффрактометра PANalytical Empyrean при CuK_α -излучении. Программы HighScore v.4.x были использованы для расчета параметров решетки и анализа фазового состава сплавов. Результаты анализа показали, что сплавы $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ кристаллизуются в тетрагональной структуре типа CeFeSi ($P4/nmm$) с некоторой примесью гексагональной фазы Gd_5Si_3 со структурой типа Mn_5Si_3 ($P6_3/mcm$). Полученные параметры кристаллической решетки были использованы при расчете электронной структуры соединений.

Оптические свойства образцов исследованы эллипсометрическим методом при комнатной температуре в интервале длин волн 0.27 – 16 мкм (0.078 – 4.6 эВ). Полученные в результате измерений значения оптических постоянных – показателей преломления $n(\omega)$ и поглощения $k(\omega)$, использованы для вычисления дисперсионных зависимостей оптической проводимости $\sigma(\omega) = nk\omega/2\pi$ (ω – частота света). Данная величина

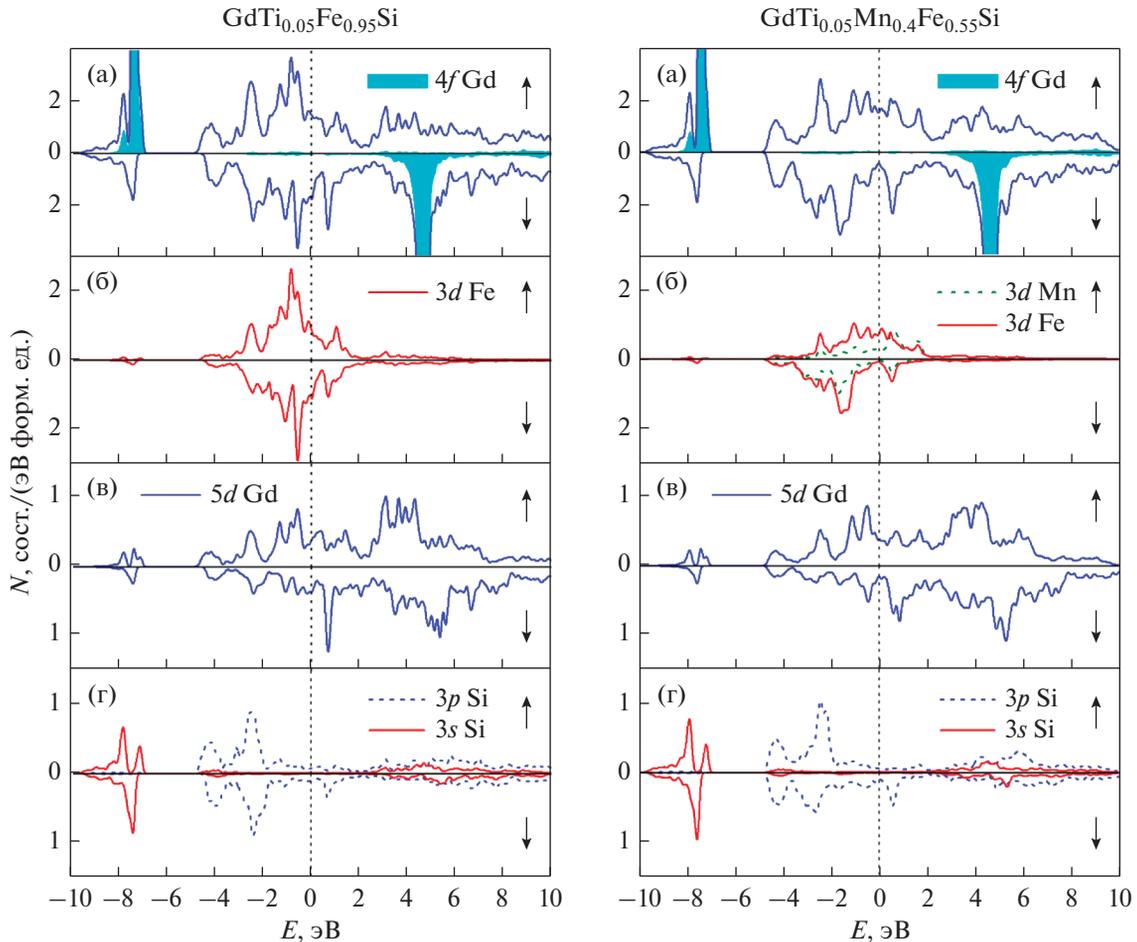


Рис. 1. Полные (а) и парциальные (б–г) плотности электронных состояний соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Fe}_{0.95}\text{Si}$ и $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.55}\text{Si}$.

наиболее выразительно характеризует амплитудные и частотные особенности спектрального отклика отражающей среды и, в отличие от статической проводимости, зависит не только от плотности состояний на E_F , но и от специфики распределения $N(E)$ во всем исследуемом энергетическом диапазоне.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Частотные зависимости $\sigma(\omega)$ для изучаемых образцов $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ с различными значениями x представлены на рис. 3. Структура данных спектров является характерной для сред с металлическим типом проводимости, когда отчетливо проявляются области, соответствующие внутри- и межзонному поглощению света. При низких энергиях фотонов $E < \sim 0.6$ эВ (ИК-диапазон) дисперсия $\sigma \sim \omega^{-2}$ соответствует друдевской зависимости, описывающей внутризонное ускорение электронов проводимости полем световой волны. Данный механизм взаимодействия света с

носителями тока определяется такими параметрами электронов проводимости, как плазменная ω_p и релаксационная γ -частоты, характеризующими, соответственно, коллективные колебания и рассеяние носителей тока. В ИК области спектра данные параметры слабо зависят от частоты и стабилизируются при значениях $\omega_p = 7.9 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\gamma = 4.4 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($\text{GdTi}_{0.05}\text{Fe}_{0.95}\text{Si}$), $\omega_p = 7.7 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\gamma = 4.8 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.55}\text{Si}$), $\omega_p = 7.4 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\gamma = 5.1 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.6}\text{Fe}_{0.35}\text{Si}$), $\omega_p = 7.1 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\gamma = 4.8 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.95}\text{Si}$). Значения ω_p и γ позволяют для каждого соединения выделить друдевские вклады в оптическую проводимость $\sigma_D = \omega_p^2 \gamma / 4\pi(\omega^2 + \gamma^2)$.

С ростом энергии фотонов (видимая и УФ-область) начинает доминировать механизм квантового поглощения света. Низкоэнергетический спад в зависимости $\sigma(\omega)$ сменяется при этом подъемом и последующим образованием широкой полосы поглощения. Структура данной полосы индивидуальна для каждого соединения, поскольку

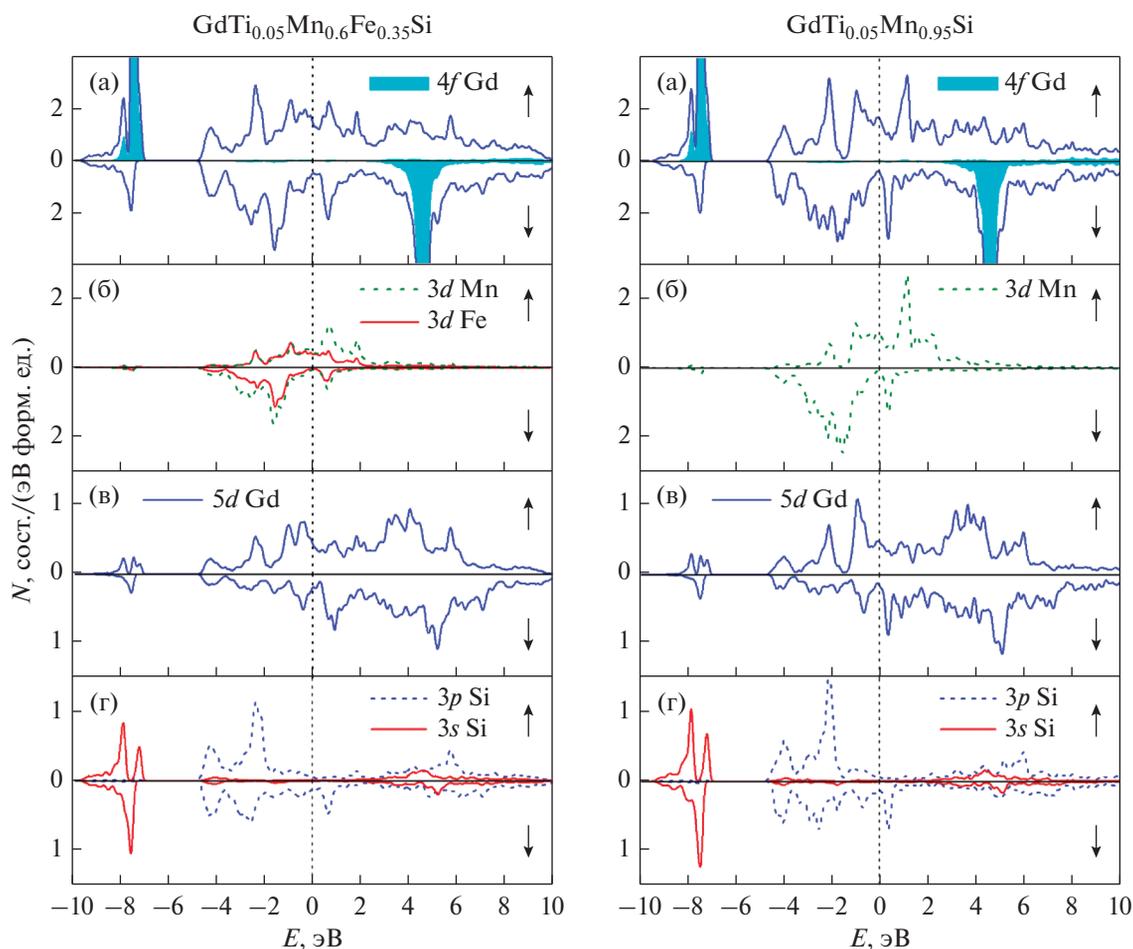


Рис. 2. Полные (а) и парциальные (б–г) плотности электронных состояний соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.6}\text{Fe}_{0.35}\text{Si}$ и $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.95}\text{Si}$.

ку зависит от строения его энергетического спектра. На кривой $\sigma(\omega)$ исходного $\text{GdTi}_{0.05}\text{Fe}_{0.95}\text{Si}$ выделяется интенсивный максимум при 1.2 эВ, высокоэнергетический край которого демонстрирует плавный спад. По мере увеличения содержания марганца в сплаве (составы с $x = 0.4$ и 0.6) высота указанного максимума постепенно снижается. В соединении $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.95}\text{Si}$ полоса поглощения имеет несколько другой характер дисперсии, указывающий на перенос спектрального веса оптической проводимости в сторону высоких энергий. В спектре $\sigma(\omega)$ этого соединения максимум при 1.2 эВ проявляется уже в виде довольно размытой структуры, а на высокоэнергетическом крыле в интервале $\sim 1.5\text{--}3$ эВ образуется широкий наплыв. Таким образом, спектральный профиль фундаментальной полосы оптического поглощения в системе изучаемых соединений в процессе изменения содержания железа, при сохранении локализации основного максимума, претерпевает модификацию как по интенсивности, так и по локализации структурных особенностей.

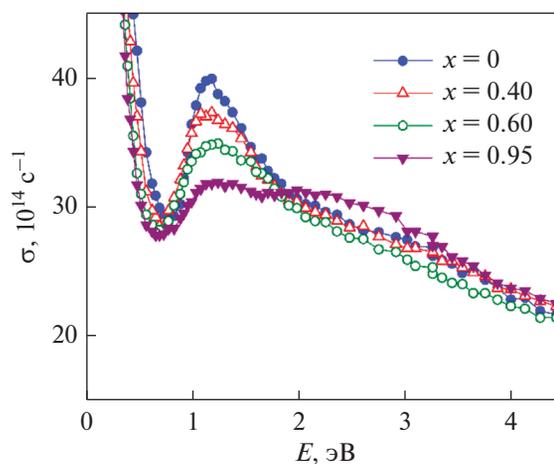


Рис. 3. Энергетические зависимости оптической проводимости соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 0.95$).

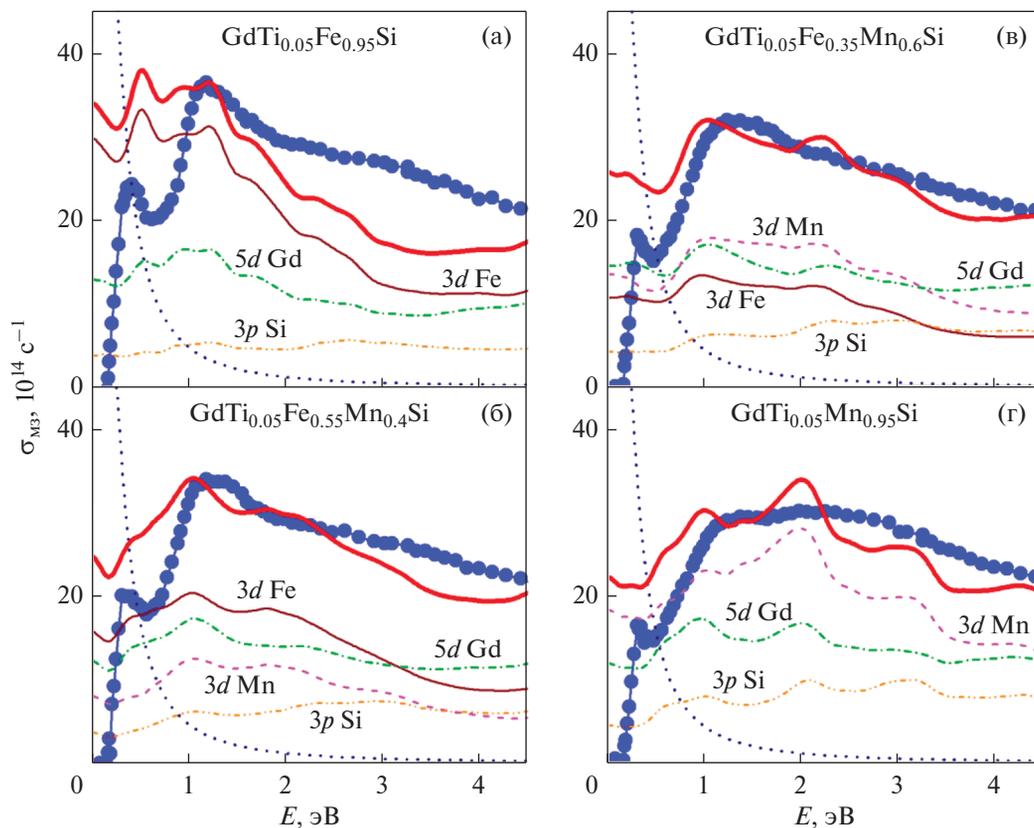


Рис. 4. Экспериментальные (закрашенные кружки) и рассчитанные (толстые сплошные линии в произвольных единицах) межзонные оптические проводимости соединений $\text{GdMn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Si}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 1$). Пунктир — внутризонный (древский) вклад. На рисунке также показаны рассчитанные вклады от межзонных переходов с участием Fe 3d, Gd 5d, Mn 3d и Si 3p электронных состояний.

Поскольку индивидуальные характеристики наблюдаемых полос межзонного поглощения определяются реальным строением электронных спектров данных материалов, то природу их возникновения можно объяснить с учетом рассчитанных плотностей состояний, представленных на рис. 1 и 2. С этой целью путем вычитания друдевских составляющих из экспериментальных кривых (рис. 3) были выделены вклады в оптическую проводимость, связанные только с межзонным поглощением света $\sigma_{\text{M3}}(\omega) = \sigma(\omega) - \sigma_{\text{D}}(\omega)$. Полученные зависимости $\sigma_{\text{M3}}(\omega)$ представлены для всех четырех соединений на рис. 4. Здесь же в относительных единицах приведены теоретические кривые частотной дисперсии данной характеристики, рассчитанные на базе сверток плотностей электронных состояний ниже и выше E_{F} по методу, используемому в [23]. Полная картина межзонного поглощения света складывается при учете суперпозиции вкладов от каждой из двух спин-поляризованных зон. Такие вклады почти равнозначны, поскольку полные плотности электронных состояний всех соединений в двух спиновых направлениях сопоставимы по величине.

Отметим качественный характер такого расчета, поскольку интегральный вклад прямых и непрямых межзонных переходов в формировании $\sigma_{\text{M3}}(\omega)$ получен при условии их равной вероятности.

Сравнение зависимостей $\sigma_{\text{M3}}(\omega)$, полученных из эксперимента и расчета, свидетельствует, что при энергиях, превышающих 0.5–0.6 эВ, общий вид кривых и локализация основных структур показывают определенное соответствие. В частности, для соединений с $x = 0, 0.4, 0.6$ расчет хорошо воспроизводит максимум при 1.2 эВ, наблюдаемый в эксперименте. Величина данного максимума существенно снижается с понижением содержания железа в сплаве и соответствует тенденции уменьшения полной плотности состояний вблизи уровня Ферми. Для соединения $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_{0.95}\text{Si}$, в спектре $\sigma_{\text{M3}}(\omega)$ которого данная структура проявилась намного слабее, а в окрестности ~2 эВ проявился другой размытый максимум, рассчитанная межзонная оптическая проводимость также качественно отображает соответствующую эмпирическую зависимость. На рис. 4 приведены также расчеты наибольших по величине вкладов в $\sigma_{\text{M3}}(\omega)$, связанных с различны-

ми типами энергетических зон. Такие вклады, как следует из рисунка, во всей области энергий формируются за счет квантовых переходов в обеих спиновых подсистемах с участием Fe 3d-, Gd 5d-, Mn 3d- и Si 3p-электронных состояний. Межзонное оптическое поглощение, формируемое с участием других типов электронов, по величине значительно слабее и не показано на рисунке.

В низкоэнергетической области спектра $E < \sim 1$ эВ при сопоставлении экспериментальных и расчетных кривых $\sigma_{\text{мз}}(\omega)$ обнаруживается ряд существенных различий. В то время как эмпирические зависимости данного параметра при $\omega \rightarrow 0$ демонстрируют наличие крутого спада, соответствующего резкому уменьшению межзонного поглощения света, то поведение теоретических кривых в этом интервале указывает на его довольно высокий уровень и на вероятность того, что квантовые переходы могут начинаться почти с нулевой энергии. На наш взгляд, такой характер дисперсии оптической проводимости связан с приближениями, сделанными при расчете, в частности с тем, что квантовые переходы, происходящие в пределах одной энергетической зоны, равновероятны с межзонами. Поэтому величины теоретических $\sigma_{\text{мз}}(\omega)$ при малых энергиях оказываются завышенными. Это обстоятельство приводит к тому, что низкоэнергетические пики, наблюдаемые в эмпирической зависимости $\sigma_{\text{мз}}(\omega)$ при энергиях $\sim 0.2\text{--}0.5$ эВ, в расчетных кривых на фоне высоких значений проявились довольно слабо. В целом наблюдаемая картина частотной дисперсии экспериментальных спектров межзонных оптических проводимостей исследуемых соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ качественно соответствует рассчитанным плотностям их электронных состояний.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние замещения железа марганцем на электронную структуру и оптические свойства ферромагнитных соединений $\text{GdTi}_{0.05}\text{Mn}_x\text{Fe}_{0.95-x}\text{Si}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 0.95$). Представлены результаты первопринципных DFT + U расчетов энергетических зависимостей полных и парциальных электронных плотностей состояний, показаны особенности их эволюции в процессе изменения содержания d-элементов.

Вычислены энергетические зависимости оптических проводимостей соединений в области межзонного поглощения света, идентифицированы типы электронных состояний, формирующих данные спектры. Оптические измерения, выполненные эллипсометрическим методом в широком диапазоне длин волн, качественно подтверждают расчетные данные. Показано, что экспериментальные частотные зависимости оптической проводи-

мости в области межзонных электронных переходов, за исключением низкоэнергетического интервала, удовлетворительно воспроизводятся в рамках теоретического расчета. По результатам измерений в инфракрасном диапазоне спектра определены плазменные и релаксационные частоты электронов проводимости.

Результаты исследований, представленные в разделе “Расчет электронной структуры”, получены за счет гранта Российской государственной научной фонда (проект № 18-72-10098). Экспериментальные данные оптических измерений, представленные в разделе “Результаты и обсуждение”, получены в рамках государственного задания Минобрнауки России (темы “Электрон”, № АААА-А18-118020190098-5 и “Магнит”, № АААА-А18-118020290129-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gupta S., Suresh K.G. Review on magnetic and related properties of RTX compounds // J. Alloys Compd. 2015. V. 618. P. 562–606.
2. Hu Z., Bao-Gen S. Magnetocaloric effects in RTX intermetallic compounds (R = Gd–Tm, T = Fe–Cu and Pd, X = Al and Si) // Chin. Phys. B 2015. V. 24. № 12. P. 127504.
3. Welter R., Venturini G., Malaman B. Magnetic properties of RFeSi (R = La–Sm, Gd–Dy) from susceptibility measurements and neutron diffraction studies // J. Alloys Compd. 1992. V. 189. № 1. P. 49–58.
4. Napolitano M., Canepa F., Manfrinetti P., Merlo F. Magnetic properties and the magnetocaloric effect in the intermetallic compound GdFeSi // J. Mater. Chem. 2000. V. 10. P. 1663–1665.
5. Włodarczyk P., Hawelek L., Zackiewicz P., Rebeda Roy T., Chrobak A., Kaminska M., Kolano-Burian A., Szade J. Characterization of magnetocaloric effect, magnetic ordering and electronic structure in the $\text{GdFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ intermetallic compounds // Mater. Chem. Phys. 2015. V. 162. P. 273–278.
6. Welter R., Venturini G., Malaman B., Ressouche B. Crystallographic data and magnetic properties of new RTX compounds (R = La–Sm, Gd; T = Ru, Os; X = Si, Ge). Magnetic structure of NdRuSi // J. Alloys Compd. 1993. V. 202. № 1–2. P. 165–172.
7. Chevalier B., Dutine M., Wattiaux A. Influence of hydrogenation and mechanical grinding on the structural and ferromagnetic properties of GdFeSi // Z. Naturforsch 2016. V. 71. № 5. P. 419–424.
8. Nikitin S.A., Ivanova T.I., Tskhadadze I.A. Magnetic properties of $\text{GdMn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Si}$ intermetallic compounds // Acta Phys. Pol. A. 1997. V. 91. № 2. P. 463–466.
9. Nikitin S.A., Ivanova T.I., Tskhadadsze I.A., Skokov K.P., Telegina I.V. Magnetic anisotropy and magnetic properties of RTSi (R = Gd, Y; T = Mn, Fe) compounds // J. Alloys Compd. 1998. V. 280. № 1–2. P. 16–19.
10. Gschneidner K.A., Pecharsky V.K. The influence of magnetic field on the thermal properties of solids // Mater. Sci. Engin. A. 2000. V. 287. № 2. P. 301–310.

11. *Ovtchenkova I.A., Nikitin S.A., Ivanova T.I., Tskhadadze G.A., Skouriski Yu.V., Suski W., Nizhankovski V.I.* Magnetic ordering and magnetic transitions in GdMnSi compound // *J. Alloys Comp.* 2008. V. 451. № 1–2. P. 450–453.
12. *Kuchin A., Platonov S., Gaviko V., Yakovleva M.* Magnetic and Structural Properties of GdFe_{1-x}Ti_xSi // *IEEE Magn. Lett.* 2019. V. 10. P. 2509204.
13. *Anisimov V.I., Lukoyanov A.V., Skornyakov S.L.* Electronic structure and magnetic properties of strongly correlated transition metal compounds // *Phys. Met. Metallogr.* 2018. V. 119. № 13. P. 1254–1258.
14. *Liu X.B., Altounian Z.* First-principles calculation on the Curie temperature of GdFeSi // *J. Appl. Phys.* 2010. V. 102. № 9. P. 09E103.
15. *Talakesh S., Nourbakhsh Z.* The Density functional study of structural, electronic, magnetic and thermodynamic properties of XFeSi (X = Gd, Tb, La) and GdRuSi compounds // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2017. V. 30. P. 2143–2158.
16. *Baglasov E.D., Lukoyanov A.V.* Electronic structure of intermetallic antiferromagnet GdNiGe // *Symmetry.* 2019. V. 11. P. 737.
17. *Князев Ю.В., Лукоянов А.В., Кузьмин Ю.И., Мухачев Р.Д., Гунта С., Суреш К.Г.* Электронные состояния и оптические спектры соединений ErSn_{1,1}Ge_{0,9} и TmSn_{1,1}Ge_{0,9} // *ФММ.* 2020. Т. 121. С. 594–600.
18. *Anisimov V.I., Aryasetiawan F., Lichtenstein A.I.* First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA + U method // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1997. V. 9. № 4. P. 767–808.
19. *Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Nardelli M.B., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Cococcioni M., Colonna N., Carnimeo I., Dal Corso A., de Gironcoli S., Delugas P., DiStasio Jr. R.A., Ferretti A., Floris A., Fratesi G., Fugallo G., Gebauer R., Gerstmann U., Giustino F., Gorni T., Jia J., Kawamura M., Ko H.-Y., Kokalj A., Küçükbenli E., Lazzeri M., Marsili M., Marzari N., Mauri F., Nguyen N.L., Nguyen H.-V., Otero-de-la-Roza A., Paulatto L., Poncé S., Rocca D., Sabatini R., Santra B., Schlipf M., Seitsonen A.P., Smogunov A., Timrov I., Thonhauser T., Umari P., Vast N., Wu X., Baroni S.* Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // *J. Phys.: Condens. Matter* 2017. V. 29. № 18. P. 465901.
20. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868.
21. *Topsakal M., Wentzcovitch R.M.* Accurate projected augmented wave (PAW) datasets for rare-earth elements (RE = La–Lu) // *Comput. Mater. Sci.* 2014. V. 95. P. 263–270.
22. *Gupta S., Suresh K.G., Lukoyanov A.V.* Effect of complex magnetic structure on the magnetocaloric and magneto-transport properties in GdCuSi // *J. Mater. Sci.* 2015. V. 50. P. 5723–5728.
23. *Mazin I.I., Singh D.J., Ambrosch-Draxl C.* Transport, optical, and electronic properties of the half-metal CrO₂ // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. № 1. P. 411–418.