

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ
И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 538.955

ОБМЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОДУЛИРОВАННЫХ
МАРТЕНСИТНЫХ СТРУКТУРАХ СПЛАВА Mn_2NiGa

© 2022 г. К. Р. Ерагер^а *, Д. Р. Байгутлин^а, В. В. Соколовский^а, В. Д. Бучельников^а

^аЧелябинский государственный университет, ул. Бр. Кашириных, 129, Челябинск, 454001 Россия

*e-mail: eragerk@rambler.ru

Поступила в редакцию 28.10.2021 г.

После доработки 08.12.2021 г.

Принята к публикации 22.12.2021 г.

Данная работа посвящена первопринципным исследованиям свойств основного состояния сплава Гейслера Mn_2NiGa в аустенитной и мартенситной фазах. Расчеты выполнены в рамках учета обменно-корреляционных эффектов посредством приближений обобщенного градиента и метаобобщенного градиента. Мартенситная фаза представлена четырьмя низкосимметричными структурами: тетрагональная немодулированная, трех-, пяти и семислойная модулированная моноклинная. Показано, что оба приближения предсказывают мартенситное превращение между кубической аустенитной и немодулированной мартенситной фазой, а также наличие модулированных структур в мартенситной фазе. Однако с увеличением периода модуляции рассмотренные приближения приводят к противоположному поведению энергии структур и амплитуды модуляции, а именно, данные характеристики увеличиваются в приближении обобщенного градиента и уменьшаются в приближении мета-обобщенного градиента.

Ключевые слова: сплавы Гейслера, вычисления из первых принципов, модулированные структуры, PBE, SCAN

DOI: 10.31857/S0015323022040040

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы магнитные сплавы с эффектом памяти формы привлекают большое внимание из-за значительных деформаций, индуцированных магнитным полем, и большого магнитокалорического эффекта, которые используют в современных технологиях [1–4]. Наличие больших обратимых магнитодеформаций связано с возникновением модулированных низкосимметричных структур в мартенситной фазе вследствие бездиффузионного мартенситного перехода из высокотемпературной аустенитной фазы с кубической структурой.

Модулированные мартенситные структуры представляют собой периодический сдвиг атомных плоскостей решетки с определённой амплитудой и периодом, приводящий к соразмерным и несоразмерным орторомбическим или двойниковым моноклинным структурам [5, 6]. Данные фазы демонстрируют высокую подвижность определенных двойниковых границ [7], которыми можно управлять даже малыми магнитными полями, что делает их перспективными в качестве материалов для производства исполнительных механизмов, сенсоров и датчиков. В зависимости от типа мартенситной структуры ферро-

магнитные сплавы с эффектом памяти формы могут проявлять различные функциональные свойства [1–4]. Например, в пионерских работах [8–10] была получена деформация 6% в мартенситной фазе сплава $Ni-Mn-Ga$ с пятислойной модулированной структурой (10M). Несколько позднее сообщали о магнитодеформации 10%, для того же сплава с семислойной модулированной структурой (14M) [9, 10].

Для понимания происхождения модулированных структур в сплаве Ni_2MnGa , было проделано огромное количество экспериментальных и теоретических исследований (например, см. обзоры [1–4]). В работах [11, 12] сделан акцент на изучении смягчения колебательной моды при определенном волновом векторе из-за нестинга поверхности Ферми как источника модулированных фаз. В работе [13] предложена концепция адаптивного мартенсита, рассматривающая модулированные структуры как метастабильные микроструктуры немодулированного (НМ) мартенсита. Обе концепции получили значительное развитие благодаря сопоставлению теоретических расчетов и экспериментальных наблюдений, например, для случая стехиометрического сплава Ni_2MnGa и систем с избыточными атомами Ni [14, 15]. Совсем

недавно в работе [16] была сделана попытка по объединению рассмотренных концепций формирования модулированных структур. Тем не менее фундаментальное понимание модулированных фаз можно считать завершенным только в том случае, если лежащие в основе концепции могут быть применены к более широкому набору систем.

Несмотря на то, что стехиометрический сплав Ni_2MnGa является прототипом сплавов с памятью формы, обладающим существенным потенциалом, имеются серьезные ограничения в его полноценном применении, связанные с рабочим температурным интервалом. Температура мартенситного превращения (T_m) стехиометрического сплава Ni_2MnGa составляет всего около 200 К, в то время как температура Кюри (T_C) составляет около 380 К [17]. Но управление температурами мартенситного и магнитного перехода можно реализовать посредством введения нестехиометрии [18]. С другой стороны, отклонение от стехиометрии приводит к исчезновению модулированных мартенситных структур и стабилизации тетрагональной структуры типа $L1_0$.

Альтернативным стехиометрическим сплавом представляется соединение Mn_2NiGa , демонстрирующее мартенситное превращение вблизи комнатной температуры ($T_m = 270$ К) и магнитное превращение при температуре 588 К, что делает этот сплав также перспективным для различного рода практических применений [19]. Авторы работы [19] обнаружили, что сплав Mn_2NiGa демонстрирует 4% магнитодеформацию, в то время как его низкотемпературная структура является немодулированной тетрагональной. Антиферромагнитная связь между двумя атомами Mn приводит к появлению дополнительных интересных физических свойств. Авторы работы [20] обнаружили эффект магнитосопротивления в 0.02% в Mn_2NiGa при комнатной температуре. Недавно сообщили о заметном обратном магнитокалорическом эффекте в Mn_2NiGa [21]. В работе [22] обсуждали наличие семислойной моноклинной модулированной структуры сплава Mn_2NiGa в рамках исследований порошковой рентгеновской дифракции при комнатной температуре. Нейтронографические исследования Mn_2NiGa показали наличие семислойной орторомбической модулированной структуры при температуре 5 К [23].

Первопринципные расчеты полной энергии сплавов Mn_2NiZ с тетрагонально искаженной структурой показали, что данные соединения претерпевают мартенситное превращение с сохранением объема из кубической в тетрагональную структуру [19, 24–26]. Авторы работы [27] исследовали модулированные структуры сплава Mn_2NiGa и доказали возможность существования мартенситов 6M и 10M.

Ввиду небольшого количества теоретических работ, посвященных сплавам на основе Mn_2NiGa , представляется интересным исследовать вопросы стабильности различных модулированных структур мартенситной фазы Mn_2NiGa в зависимости от выбора функционала обменно-корреляционной энергии. В данной работе представлены исследования в рамках двух подходов: приближение обобщенного градиента (функционал PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) [27]) и приближение мета-обобщенного градиента (функционал SCAN (strongly constrained and appropriately normed) [28]), призванное повысить точность вычислений. Стоит отметить, что функционал SCAN уже показал свою работоспособность для немагнитных систем [29], однако его применимость к магнитным материалам, в том числе сплавам Гейслера, остается слабо изученной.

ДЕТАЛИ И МЕТОДОЛОГИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Расчеты структуры из первых принципов сплавов Mn_2NiGa (рис. 1а, 1б) с ферромагнитным упорядочением магнитных моментов атомов Mn выполнены в программном пакете Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [30, 31] в приближении функционалов PBE [27] и SCAN [28]. Энергия обрезки составляла 750 эВ, чтобы учесть небольшую разницу энергий между различными модулированными структурными фазами. Зона Бриллюэна была сформирована с помощью схемы генерации k -точек Монкхорста-Пака с однородной сеткой k -точек $21 \times 21 \times 21$ для кубической структуры, сеткой $12 \times 4 \times 8$ для модулированных структур 6M (рис. 1в), состоящих из 24 атомов, и сеткой $10 \times 2 \times 8$ для модулированных структур 10M (40 атомов) (рис. 1г) и 14M (56 атомов) (рис. 1д). Критерии сходимости по полной энергии были установлены на уровне 10^{-5} эВ, а критерии сходимости по остаточным силам – на уровне 10^{-2} эВ/атом. Геометрическая оптимизация кристаллических структур аустенитной и мартенситной фазы выполнена в рамках электронной и ионной релаксации. Кристаллическая структура аустенитной фазы задана 16-ти атомной кубической суперячейкой пространственной группы симметрии № 216 [19, 24–27].

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

По данным расчетов геометрической оптимизации кристаллической структуры аустенитной фазы постоянная решетки a_0 составляет 5.84 и 5.88 Å для функционалов PBE и SCAN соответственно. Результаты для функционала PBE показывают отличное согласие с другими теоретическими результатами, опубликованными ранее [19, 24–27]. Однако экспериментальное значение параметра

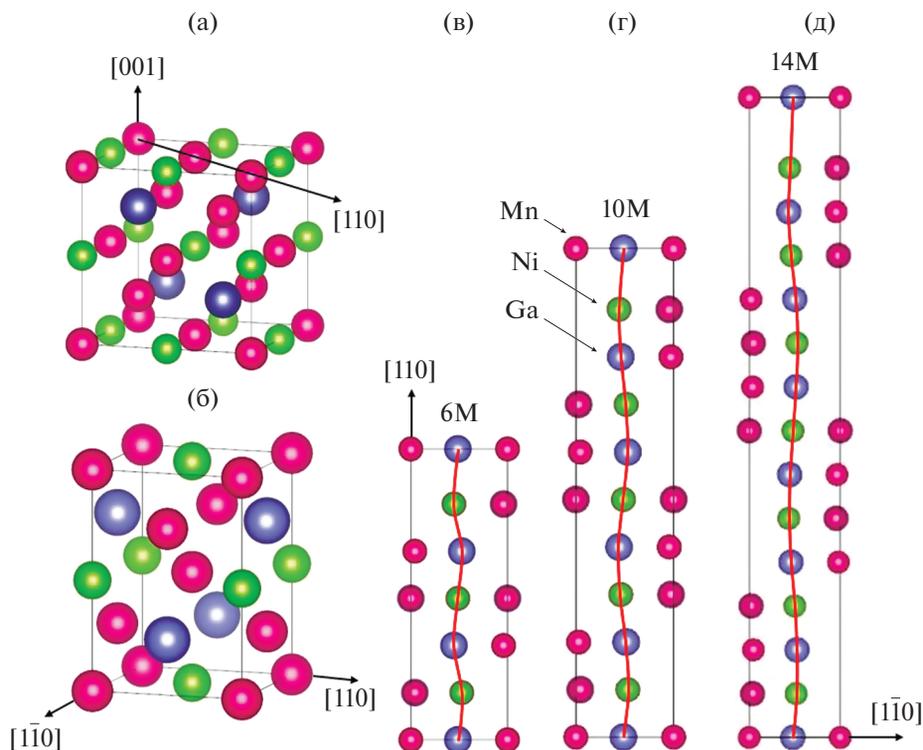


Рис. 1. Кристаллические структуры сплава Mn_2NiGa : (а) кубический аустенит; (б) НМ мартенсит; (в) 6М мартенсит; (г) 10М мартенсит; (д) 14М мартенсит. Исходные модулированные структуры обладают тетрагональным базисом. Структуры 6М, 10М и 14М построены путем трех-, пяти- и семикратной трансляции 8-атомной ячейки (рис. 1б) вдоль направления $[110]$ соответственно. Исходную модуляцию задавали синусоидальным образом ($y = A\sin(x)$) с одинаковой амплитудой смещения атомных плоскостей $A = 0.2 \text{ \AA}$.

решетки несколько выше и составляет 5.92 \AA [19]. Таким образом, можно заключить, что функционал SCAN позволяет получить значение a_0 , более близкое к эксперименту.

Для исследования вопросов устойчивости кубической структуры по отношению к тетрагональному искажению, нами были выполнены расчеты полной энергии кристалла как функции тетрагонального искажения c/a с учетом сохранения постоянного объема. Данные зависимости, полученные с помощью отмеченных функционалов, представлены на рис. 2. Можно видеть, что в случае РВЕ функционала кривые полной энергии содержат два минимума: локальный ($c/a = 0.93$) и глобальный ($c/a = 1.28$). Разность энергий между кубической ($c/a = 1.0$) и НМ тетрагональной структурой при $c/a = 0.93$ составляет около 3 мэВ/атом, тогда как для тетрагональности $c/a = 1.28 \approx 28$ мэВ/атом. Зависимость полной энергии в приближении SCAN демонстрирует два минимума: первый при $c/a = 1.1$ и второй при $c/a = 1.26$. Разность энергий между кубической ($c/a = 1.0$) и НМ тетрагональной структурой ($c/a = 1.26$) составляет ≈ 11.4 мэВ/атом, что несколько меньше по сравнению с результатами для РВЕ. В целом, РВЕ значения тетрагональности c/a и разности энергий

хорошо согласуются с ранее опубликованным результатами [19, 24–27].

Наличие метастабильного минимума при $c/a < 1$ в приближении РВЕ указывает на то, что в

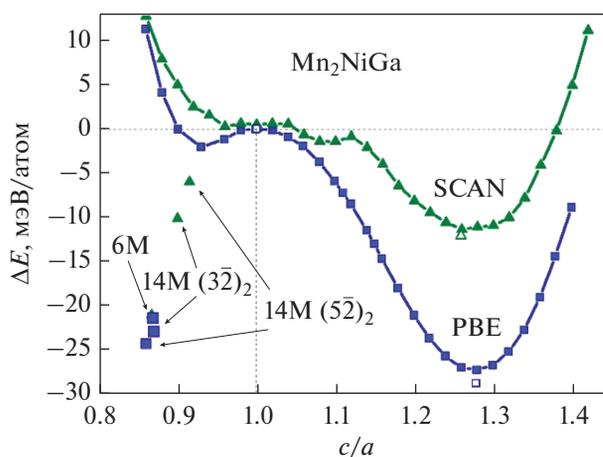


Рис. 2. Зависимость полной энергии ΔE от тетрагонального искажения c/a для сплава Mn_2NiGa , \blacksquare – РВЕ, \blacktriangle – SCAN. Разница энергий построена по отношению к энергии кубической фазы. Открытые символы – результаты полной геометрической оптимизации.

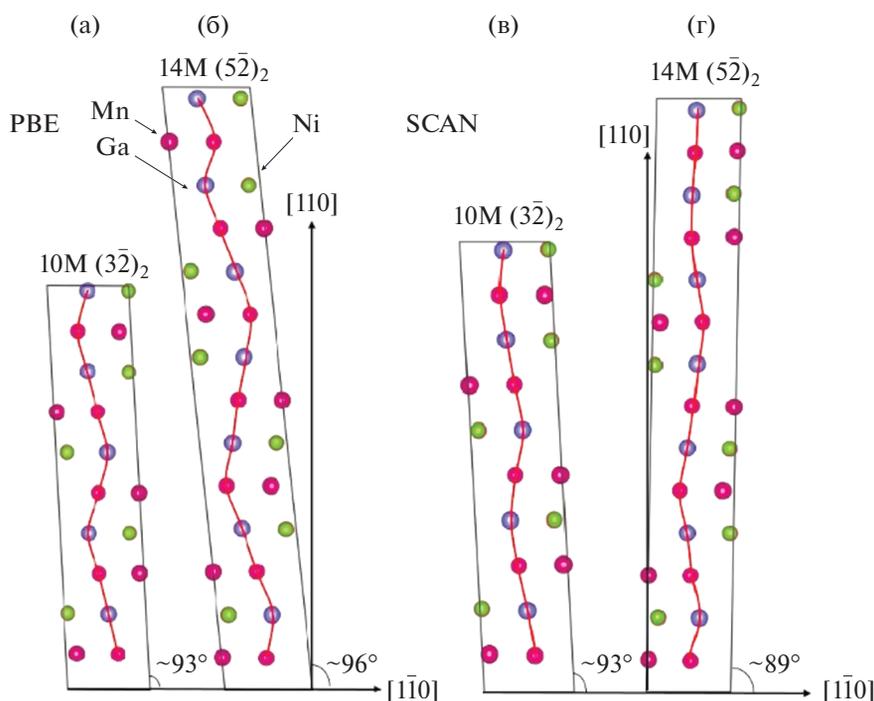


Рис. 3. Модулированные структуры сплава Mn_2NiGa , полученные после полной геометрической оптимизации. (а) $10M (3\bar{2})_2$ и (б) $14M (5\bar{2})_2$ в приближении PBE, (в) $10M (3\bar{2})_2$ и (г) $14M (5\bar{2})_2$ в приближении SCAN.

Mn_2NiGa могут существовать модулированные мартенситные структуры. Нами были рассмотрены такие структуры как 6М, 10М и 14М (рис. 1в–1д), отличающиеся периодом модуляции. Геометрическая оптимизация модулированных структур выполнена с учетом релаксации атомных позиций, формы и объема ячейки. В результате изначально рассмотренные тетрагональные ячейки с начальной амплитудой модуляции атомных слоев (0.2 \AA) перестроили в модулированные структуры моноклинной сингонии. Результаты полных энергий модулированных структур показаны отдельными символами на рис. 2.

Наибольшие по модулю энергии наблюдаются для структуры 14М ($c/a = 0.86$) в приближении PBE ($\Delta E \approx 24.3 \text{ мэВ/атом}$) и для структуры 6М ($c/a = 0.87$) в приближении SCAN ($\Delta E \approx 21.1 \text{ мэВ/атом}$). В целом можно видеть противоположную зависимость полной энергии модулированной структуры в зависимости от ее периода для функционалов PBE и SCAN. В случае PBE увеличение периода модуляции структуры приводит к повышению ее стабильности и близости по энергии к НМ тетрагональной структуре ($c/a = 1.26$), что согласуется с ранее опубликованными результатами [19, 24–27]. Напротив, функционал SCAN указывает на фазу 6М в качестве основного состояния мартенсит-

ной фазы, последующее увеличение периода модуляции структуры приводит к ее невыгодности.

Анализ моноклинных модулированных структур 10М и 14М показал следующее (рис. 3). Для структуры 10М три атомные плоскости смещаются в одном направлении, в то время как две другие атомные плоскости смещаются в противоположном направлении, создавая последовательность укладки $(3\bar{2})_2$ и моноклинный угол $\gamma \approx 93^\circ$ в рамках использования обоих функционалов. В случае исходной структуры 14М (рис. 1д) геометрическая оптимизация привела к последовательности укладки атомных слоев $(5\bar{2})_2$ и углу $\gamma \approx 96^\circ$ (PBE) и $\approx 89^\circ$ (SCAN).

Перейдем к обсуждению поведения модуляционной волны смещения атомных плоскостей в структурах 6М, 10М и 14М, представленной на рис. 4. Согласно расчетам в рамках приближений PBE и SCAN, амплитуда волны для структур с периодом модуляции 6М близка по значениям и составляет 0.45 и 0.49 \AA , соответственно. Последующее увеличение периода модуляции приводит к противоположному поведению амплитуды для функционалов PBE и SCAN, схожесму, как и в случае полных энергий (см. рис. 2). Расчеты функционалом PBE дают следующие значения амплитуд: 0.45 (6М), 0.56 (10М) и 0.65 \AA (14М), тогда как в случае SCAN расчетов: 0.49 (6М), 0.37

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

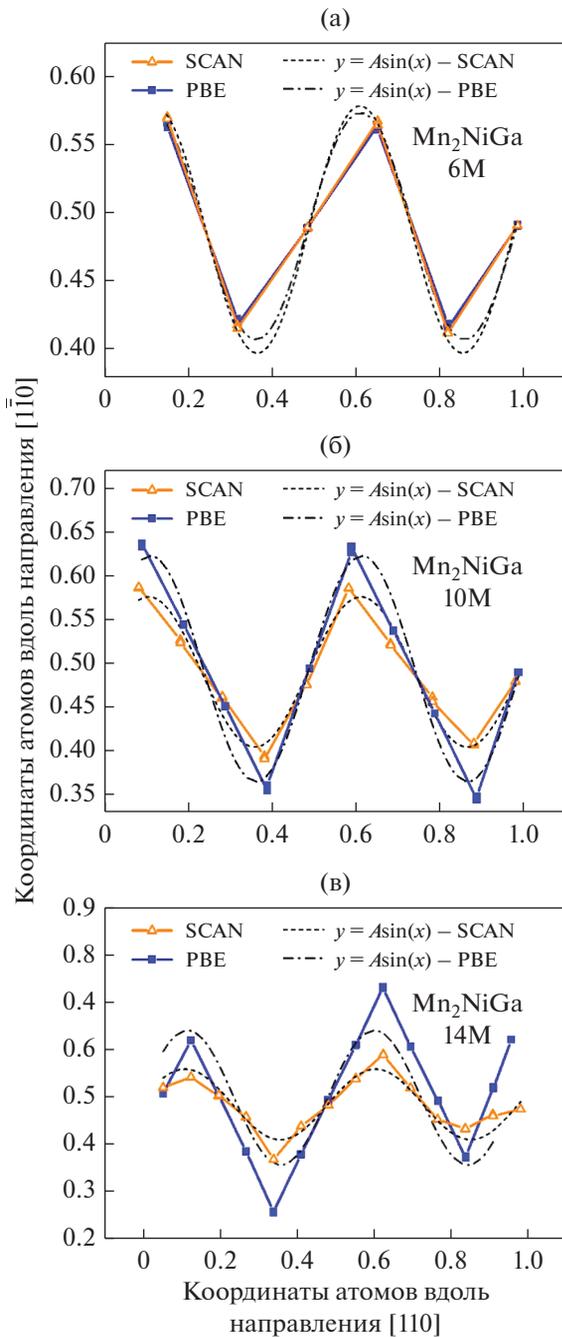


Рис. 4. Смещение атомных плоскостей, представляющих модуляционную волну, для структур (а) 6М, (б) 10М и (в) 14М. Результаты расчетов представлены для функционалов PBE и SCAN. Результаты расчетов аппроксимированы зависимостью $y = A \sin(x)$.

(10М) и 0.33 \AA (14М). Можно видеть, что разница в амплитуде между PBE и SCAN возрастает с ростом периода модуляции. Данное поведение обуславливается, возможно, различием в кристаллической структуре: параметрах решетки и угла γ , получившихся после их геометрической оптимизации.

В данной работе представлены результаты вычислений из первых принципов энергии основного состояния и структурных свойств (параметров решетки, амплитуд модуляции) сплава Mn_2NiGa в аустенитной и мартенситной фазах. Показано, что выбор функционала для обменно-корреляционного взаимодействия оказывает влияние на кристаллографические параметры и энергию основного состояния. Оба функционала предсказывают мартенситный переход из кубической фазы в тетрагональную ($c/a = 1.26$) в ферромагнитном состоянии. Однако SCAN расчеты приводят к меньшей разнице энергии между аустенитной и мартенситной фазой.

Исследования модулированных мартенситных структур с периодом 6, 10 и 14 атомных плоскостей в процессе выполнения процедуры полной геометрической оптимизации показали следующее. Для обоих функционалов каждая из исходных модулированных тетрагональных структур перестроилась в структуру моноклинной сингонии с большей амплитудой модуляции. Тем не менее обнаружено противоположное поведение энергий модулированных структур, полученных в приближениях PBE и SCAN. Так в случае функционала PBE энергия основного состояния структур и амплитуда модуляции увеличиваются с увеличением периода модуляции. Разница энергий между НМ и 14М структурами составляет около 3 мэВ/атом, что кардинально отличается от результатов в приближении SCAN, где наиболее выгодная структура 6М и разница энергий между 6М и НМ структурами близка к 10 мэВ/атом. Последующее увеличение периода модуляции в приближении SCAN приводят к уменьшению энергии модулированных структур и амплитуды модуляции.

Таким образом, проведенные в работе теоретические исследования свойств модулированных мартенситных структур на примере сплава Mn_2NiGa , показали, что свойства основного состояния фаз, а также их стабильность могут существенно зависеть от учета обменно-корреляционных эффектов за пределом общепринятого приближения обобщенного градиента. В связи с этим рассмотренные исследования требуют дальнейшего развития для решения проблемы поиска материалов с приемлемыми механическими, магнитными и теплофизическими свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-72-20022 (расчеты в приближении мета-обобщенного градиента) и государственного задания Минобрнауки РФ № 075-01391-22-00 (расчеты в приближении обобщенного градиента).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Vasil'ev A.N., Buchel'nikov V.D., Takagi T., Khovailo V.V., Estrin E.I.* Shape memory ferromagnets // *Phys-Usp.* 2003. V. 43. № 6. P. 559.
2. *Buchel'nikov V.D., Vasiliev A.N., Koledov V.V., Taskaev S.V., Khovailo V.V., Shavrov V.G.* Magnetic shape-memory alloys: phase transitions and functional properties // *Phys-Usp.* 2006. V. 49. № 8. P. 871.
3. *Entel P., Buchelnikov V.D., Khovailo V.V., Zayak A.T., Adeagbo W.A., Gruner M.E., Herper H.C., Wassermann E.F.* Modelling the phase diagram of magnetic shape memory Heusler alloys // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006. V. 39. № 5. P. 865.
4. *Graf T., Felser C., Parkin S.S.P.* Simple rules for the understanding of Heusler compounds // *Prog. Solid State Chem.* 2011. V. 39. № 1. P. 1.
5. *Brown P., Crangle J., Kanomata T., Matsumoto M., Neumann K., Ouladdiaf B., Ziebeck K.* The crystal structure and phase transitions of the magnetic shape memory compound Ni_2MnGa // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. V. 14. P. 10159.
6. *Pons J., Santamarta R., Chernenko V.A., Cesari E.* Long-period martensitic structures of Ni–Mn–Ga alloys studied by high-resolution transmission electron microscopy // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 97. P. 083516.
7. *Straka L., Heczko O., Seiner H., Lanska N., Drahoukoupil J., Soroka A., Fähler S., Hänninen H., Sozinov A.* Highly mobile twinned interface in 10 M modulated Ni–Mn–Ga martensite: Analysis beyond the tetragonal approximation of lattice // *Acta Mater.* 2011. V. 59. P. 7450.
8. *Murray S.J., Marioni M., Allen S.M., O'Handley R.C., Lograsso T.A.* 6% magnetic-field-induced strain by twin-boundary motion in ferromagnetic Ni–Mn–Ga // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 77. P. 886.
9. *Sozinov A., Likhachev A., Lanska N., Ullakko K.* Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase // *Appl. Phys. Lett.* 2002. V. 80. P. 1746.
10. *Sozinov A., Likhachev A., Ullakko K.* Crystal structures and magnetic anisotropy properties of Ni–Mn–Ga martensitic phases with giant magnetic-field-induced strain // *IEEE Trans. Magn.* 2002. V. 38. P. 2814.
11. *Lee Y., Rhee J.Y., Harmon B.N.* Generalized susceptibility of the magnetic shape-memory alloy Ni_2MnGa // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. P. 054424.
12. *Bungaro C., Rabe K.M., Dal Corso A.* First-principles study of lattice instabilities in ferromagnetic Ni_2MnGa , *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. P. 134104.
13. *Khachaturyan A.G., Shapiro S.M., Semenovskaya S.* Adaptive phase formation in martensitic transformation // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 43. P. 10832.
14. *Kaufmann S., Röföler U.K., Heczko O., Wuttig M., Buschbeck J., Schultz L., Fähler S.* Adaptive Modulations of Martensites // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 145702.
15. *Niemann R., Röföler U.K., Gruner M.E., Heczko O., Schultz L., Fähler S.* Reducing the nucleation barrier in magnetocaloric Heusler alloys by nanoindentation // *Adv. Eng. Mater.* 2012. V. 14. P. 562.
16. *Gruner M.E., Niemann R., Entel P., Pentcheva R., Röföler U.K., Nielsch K., Fähler S.* Modulations in martensitic Heusler alloys originate from nanotwin ordering // *Sci. Reports.* 2018. V. 8. P. 8489.
17. *Webster P.J., Ziebeck K.R.A., Town S.L., Peak M.S.* Magnetic order and phase transformation in Ni_2MnGa // *Philos. Mag.* 1984. V. 49. P. 295.
18. *Khovailo V.V., Buchelnikov V.D., Kainuma R., Koledov V.V., Ohtsuka M., Shavrov V.G., Takagi T., Taskaev S.V., Vasiliev A.N.* Phase transitions in $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$ with a high Ni excess // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 72. P. 224408.
19. *Barman S.R., Chakrabarti A.* Comment on “Physical and electronic structure and magnetism of Mn_2NiGa : Experiment and density-functional theory calculations” // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. P. 176401.
20. *Singh S., Rawat R., Muthu S.E., D'Souza S.W., Suard E., Senyshyn A., Banik S., Rajput P., Bhardwaj S., Awasthi A.M., Ranjan R., Arumugam S., Schlögl D.L., Lograsso T.A., Chakrabarti A., Barman S.R.* Spin-valve-like magnetoresistance in Mn_2NiGa at room temperature // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. P. 246601.
21. *Singh S., Esakki Muthu S., Senyshyn A., Rajput P., Suard E., Arumugam S., Barman S.* Inverse magnetocaloric effect in Mn_2NiGa and $\text{Mn}_{1.75}\text{Ni}_{1.25}\text{Ga}$ magnetic shape memory alloys // *Appl. Phys. Lett.* 2014. V. 104. P. 051905.
22. *Singh S., Maniraj M., Dsouza S., Ranjan R., Barman S.* Structural transformations in Mn_2NiGa due to residual stress // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 96. P. 081904.
23. *Brown P.J., Kanomata T., Neumann K., Neumann K.U., Ouladdiaf B., Sheikh A., Ziebeck K.R.A.* Atomic and magnetic order in the shape memory alloy Mn_2NiGa // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2010. V. 22. P. 506001.
24. *Paul S., Ghosh S., J.* First-principles investigations of the electronic structure and properties related to shape-memory behavior in Mn_2NiX ($X = \text{Al, Ga, In, Sn}$) alloys // *Appl. Phys. Lett.* 2011. V. 110. P. 063523.
25. *Sokolovskiy V.V., Zagrebin M.A., Sokolovskaya Y.A., Buchelnikov V.D.* Structural and Magnetic Properties of Mn_2NiZ ($Z = \text{Ga, In, Sn, Sb}$) Heusler Alloys from Ab initio Calculations // *Solid State Phen.* 2015. V. 233. P. 229.
26. *Каманцев А.П., Кошкидько Ю.С., Быков Э.О., Калашников В.С., Кошелев А.В., Маширов А.В., Мусабиров И.И., Пауков М.А., Соколовский В.В.* Магнитокалорический эффект и эффект памяти формы в сплаве Гейслера Mn_2NiGa // *Физика твердого тела.* 2020. Т. 62. С. 726.
27. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 77. P. 3865.
28. *Sun J., Ruzsinszky A., Perdew J.P.* Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 115. P. 036402.
29. *Zhang Y., Sun J., Perdew J.P., Wu X.* Comparative first-principles studies of prototypical ferroelectric materials by LDA, GGA, and SCAN meta-GGA // *Phys. Rev. B.* 2017. V. 96. P. 035143.
30. *Kresse G., Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 11169.
31. *Kresse G., Joubert D.* From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. P. 1758.