

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

*Е. И. Шредер*<sup>a</sup>, *А. В. Лукоянов*<sup>a,b\*</sup>, *А. А. Махнев*<sup>a</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 Уральского отделения Российской академии наук  
620108, Екатеринбург, Россия*

<sup>b</sup> *Уральский федеральный университет  
620002, Екатеринбург, Россия*

<sup>c</sup> *Central University of Rajasthan  
NH-8, Bandrasindri 305817, Rajasthan, India*

<sup>d</sup> *Polymers and Functional Materials Department, CSIR-Indian Institution of Chemical Technology  
Tarnaka-500007, Hyderabad, Telangana, India*

Поступила в редакцию 6 апреля 2021 г.,  
после переработки 27 мая 2021 г.  
Принята к публикации 27 мая 2021 г.

Выполнены теоретические расчеты электронной структуры и измерение оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Оптимизированная кристаллическая структура типа  $\beta$ -Mn, основанная на теории функционала плотности, представлена для  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Обнаружено аномальное для металлов поведение оптической проводимости сплава в инфракрасной области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Такие особенности оптического спектра указывают на сложную структуру зонного спектра и высокую плотность состояний в окрестности и на уровне Ферми. Особенности на кривой оптической проводимости соответствуют определенным межзонным переходам электронов.

DOI: 10.31857/S0044451021100114

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера на основе марганца привлекают большое внимание благодаря разнообразным и сложным магнитным фазовым диаграммам и возможным улучшенным термоэлектрическим свойствам [1]. В этой серии сплавов Гейслера антиструктурные дефекты и отклонения от стехиометрии могут привести к улучшению необходимых характеристик, что делает их перспективными для многофункциональных приложений. Недавно сплавы Гейслера  $Mn_2MeZ$  (Me — переходный металл, Z — элемент III–V групп) привлекли внимание как перспективные материалы для спинтроники, поскольку, как сообщается, обладают бесщелевой спино-

вой плотностью состояний полупроводникового типа. Система сплавов  $Mn_2MeAl$  (Me = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) демонстрирует сильный ферромагнетизм или компенсированный ферримагнетизм с возможностью фазовых переходов с изменением магнитной структуры [2], обсуждаются изменения электронной структуры, включая состояния полуметаллического ферромагнетика и спинового бесщелевого полупроводника.

Среди большого семейства сплавов Гейслера материалы, содержащие переходные металлы Mn и Fe, представляют интерес благодаря их химическому подобию, которое допускает богатую и сложную магнитную фазовую диаграмму [3, 4]. Более того, с точки зрения рентабельности, доступность и отсутствие редкоземельных элементов в составе, сплавы на основе Mn и Fe, являются многообещающими кандидатами для разработки новых сплавов Гейслера. В нашей предыдущей работе [5] для сплава Гейслера  $Mn_2FeAl$  было показано, что картина плот-

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

\*\* Shubhra Dash, Ajit K. Patra, M. Vasundhara

ности состояний  $N(E)$  существенно различается для структур типа  $L2_1$ , X и  $\beta$ -Mn.

В настоящей работе мы сообщаем результаты изучения кристаллической и электронной структур через исследование оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Цель этой работы провести структурную оптимизацию и расчеты электронной структуры, а также получить информацию об электронной структуре из экспериментального изучения оптических свойств данного сплава Гейслера и дать их интерпретацию на основе теоретических расчетов.

## 2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Поликристаллический образец сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  был приготовлен традиционным методом дуговой плавки с последующим отжигом, как сообщалось в нашей ранней работе [5]. Переплавка была повторена несколько раз для обеспечения лучшей однородности. Полученный слиток был отожжен в вакууме в течение 3 дней при температуре  $1000^\circ C$ , охлажден до  $650^\circ C$  и вновь отожжен в течение 3 дней, а затем следовало медленное охлаждение со скоростью  $5^\circ C/мин$ . Образец в виде порошка был проанализирован на рентгеновском дифрактометре PANalytical, Empyrean, Нидерланды, в  $K_\alpha$ -излучении Cu при комнатной температуре. Химический состав образца определен с помощью рентгеновской энерго-дисперсионной спектроскопии (EDX) на сканирующем электронном микроскопе (JEOL-SEM 5601v, Токио, Япония), найдено, что он находится в рамках номинального состава.

Зеркальные поверхности для оптических исследований были получены шлифованием образцов на микропорошках карбида бора разной дисперсности и полированием на окиси хрома. Действительная  $\epsilon_1(\omega)$  и мнимая  $\epsilon_2(\omega)$  части диэлектрической проницаемости измерены эллипсометрическим методом Битти при комнатной температуре на воздухе в спектральной области  $0.1\text{--}5$  эВ ( $0.25\text{--}13$  мкм). Точность измерений составила  $2\text{--}5\%$  в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной (ИК) областях спектра. Оптическая проводимость равна  $\sigma(\omega) = \epsilon_2\omega/4\pi$ , где  $\omega$  — циклическая частота световой волны. Электронная структура сплава Гейслера была рассчитана в компьютерном пакете программ Quantum ESPRESSO (QE) [6] с обменно-корреляционным потенциалом в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) в версии Педью–Бурке–Эрнзенхофа (PBE). Волновые функ-

ции разложены по плоским волнам. В расчетах мы использовали те же стандартные ультрамягкие псевдопотенциалы из библиотеки QE, что и в работе [5]. В наших расчетах для достижения требуемой сходимости в цикле самосогласования использован предел энергии  $60$  Ry для плоских волн. Интегрирование в обратном пространстве проведено по сетке из  $k$ -точек  $8 \times 8 \times 8$ , аналогично [5]. Код постобработки QE epsilon.x [6] использован для вычисления действительной и мнимой частей диэлектрического тензора совместно с плотностью состояний, исходя из вычисленных собственных значений и собственных векторов. В расчетах этого кода берутся межзонные переходы, т. е. вертикальные переходы, при которых сохраняется импульс электрона  $k$ .

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Уточнение данных рентгеновской дифракции (XRD) методом Ритвельда представлено на рис. 1. Измеренная полная картина XRD структуры типа  $\beta$ -Mn (пространственная группа  $P4_132$ ) может быть проиндексирована как кубическая элементарная ячейка. Подобные наблюдения ранее сообщались для соединения  $Fe_{1.5}Pd_{0.5}Mo_3N$  [7] и сплава  $Mn_2FeAl$ , полученного дуговой или индукционной плавкой [5, 8]. Не обнаружено никаких следов какой-либо второй фазы, что указывало на то, что сплав однофазный. Уточнение экспериментальных данных по Ритвельду с использованием пакета FULLPROF было выполнено в рамках простран-

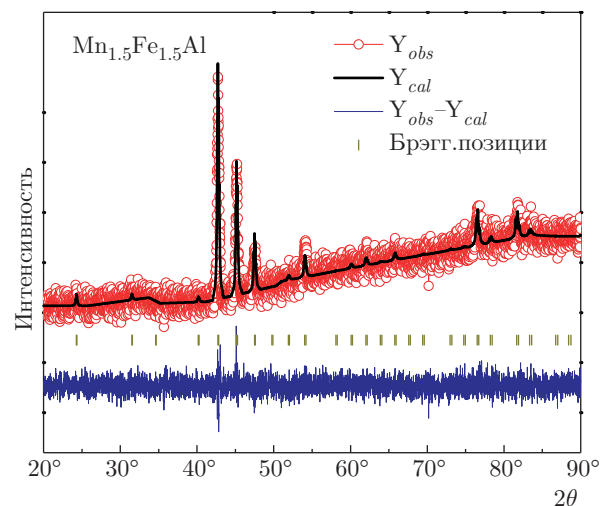


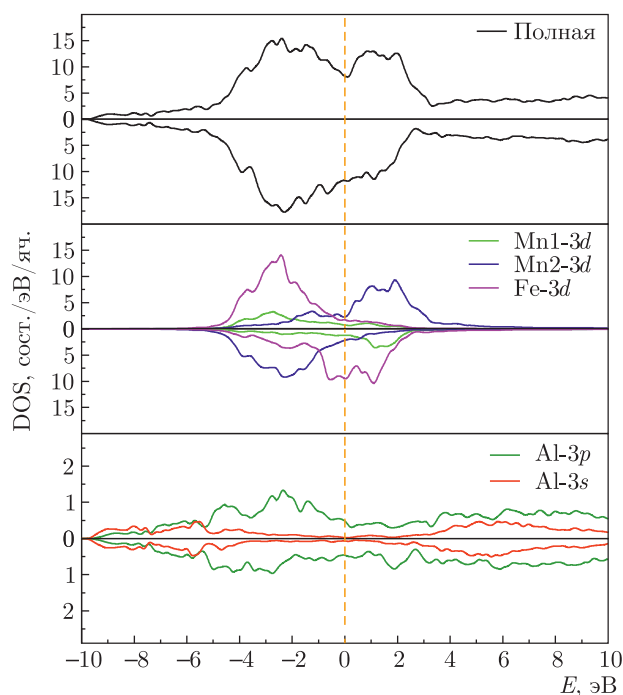
Рис. 1. (В цвете онлайн) Рентгенограмма сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  при комнатной температуре вместе с данными уточнения Ритвельда

**Таблица.** Рассчитанные в данной работе оптимизированные координаты ионов в  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

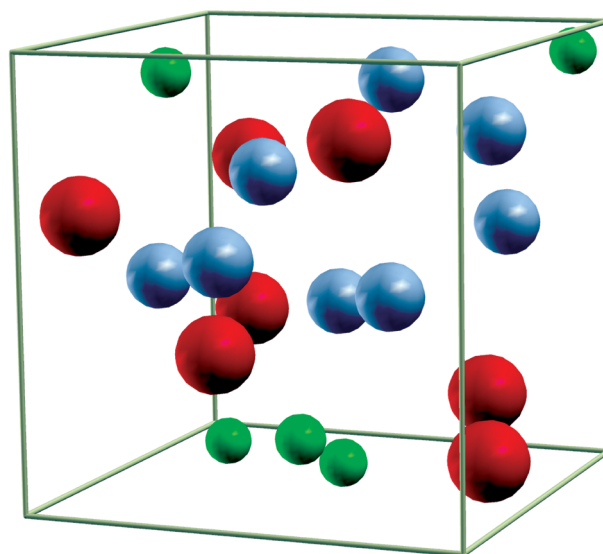
Ион	$x$	$y$	$z$
Al	0.0717	0.0690	0.0744
Fe	0.3213	0.1920	-0.1896
Fe	-0.2105	0.3139	0.1697
Fe	0.1925	-0.1908	0.3208
Fe	-0.3228	-0.3178	-0.3145
Mn1	-0.4426	0.4427	-0.0631
Mn1	0.4435	-0.0635	-0.4275
Al	-0.0669	-0.4486	0.4231
Fe	-0.3055	0.0349	-0.1100
Fe	-0.1239	-0.2934	0.0433
Al	0.0481	-0.1244	-0.2960
Fe	0.3750	-0.1956	-0.0451
Al	-0.0518	0.3677	-0.1974
Al	-0.1972	-0.0411	0.3668
Mn2	0.4557	0.1134	0.1973
Mn2	0.2035	0.4601	0.1171
Mn2	0.1459	0.2032	0.4609
Mn2	-0.4526	-0.3671	0.2928
Mn2	0.2975	-0.4480	-0.3670
Mn2	-0.3810	0.2934	-0.4559

ственной группы  $P4_132$  с выбором функций псевдо-Фойгта и полиномиальных функций соответственно для определения формы пика и уточнения фона. Уточненный параметр решетки  $a = 6.34(4) \text{ \AA}$ .

При вычислениях электронной структуры было использовано экспериментальное значение параметра решетки для оптимизированных позиций атомов. Оптимизированные координаты ионов в сплаве  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , вычисленные в работе, приведены в таблице. Кривые плотности состояний (DOS) и изображение кристаллической структуры, полученные в программном пакете XCrystDen ((X-Window) Crystalline Structures and Densities) [9], приведены на рис. 2 и 3. Была использована структура типа  $\beta$ -Mn близкого по составу сплава  $Mn_2FeAl$  [5]



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Полная и частичная плотности состояний сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Оптимизированная кристаллическая структура  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , где Al показан маленькими зелеными сферами, Fe — большими красными сферами, Mn — серыми сферами

с  $12d$ -позициями, занятыми атомами 3 Al, 3 Fe, 6 Mn, и  $8c$ , занятыми атомами 2 Al, 4 Fe, 2 Mn. Рассчитанный полный магнитный момент определен как  $1.76 \mu_B$ /форм. ед. Возникающее в результате магнитное упорядочение в этих конфигурациях

состоит из ферро- и антиферромагнитно расположенных атомов Mn, антиферромагнитно упорядоченных в основном в позициях 8с. Средний магнитный момент определен соответственно как 3.1 (Mn2) и 2.2 (Mn1), 0.7 (Fe) и 0.2 (Al)  $\mu_B$ . В результате они дают разные вклады в плотность состояний и результирующий магнитный момент. Для  $Mn_2FeAl$  расчеты электронной структуры [5] привели к той же структуре и типу упорядочения со средним магнитным моментом на атомах Mn, Fe и Al соответственно как 3.1, 1.1 и  $0.2\mu_B$  с полным магнитным моментом  $4.4\mu_B$ /форм. ед. Разница полного магнитного момента сплавов  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  и  $Mn_2FeAl$  [5] обусловлена разным числом ионов Mn и Fe в ячейке, ионы Fe и Mn1 упорядочены антиферромагнитно ионам Mn2. Таким образом,  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  оказался ферромагнетиком с более низким полным магнитным моментом в сравнении с  $Mn_2FeAl$  (все данные для  $Mn_2FeAl$  взяты из работы [5]).

На рис. 2 приведены кривые плотности состояний (DOS) сплава. Нужно отметить существенную разницу картин плотности  $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1 для зон со спином вверх и вниз. В результате магнитные моменты атомов Fe, Mn1 направлены в одну сторону, атомов Mn2 — в противоположную. Таким образом, мы видим ферромагнетик. Плотность состояний на уровне Ферми для обеих спиновых подсистем достаточно высокая. В сравнении со сплавом  $Mn_2FeAl$  с той же кристаллической структурой [5] обе проекции спина более симметричны, поскольку наиболее спин-поляризованные состояния ионов Mn2 в  $Mn_2FeAl$ , менее интенсивные в  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , частично замещены ионами Fe. С другой стороны, большее число ионов Fe со спиновой поляризацией дает дополнительные электронные состояния в занятой части со спином «вверх» и свободной части со спином «вниз» в сравнении с  $Mn_2FeAl$ . Для спинов «вверх» вклад в плотность состояний происходит от  $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1. Для спинов «вниз»  $3d$ -состояния атомов Fe дают основной вклад. Плотность  $3p$ - $3s$ -состояний Al низкая и равномерно распределена по широкой области энергий.

Оптические свойства металлов определяются комплексной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$  [10]. В ИК-области спектра основную роль в формировании оптических свойств играет механизм внутризонного ускорения электронов полем световой волны, так называемый вклад Друде. Вклад этого механизма определяется параметрами электронов проводимости: плазменной частотой  $\Omega$  и частотой релаксации  $\gamma$ , и убывает

пропорционально квадрату частоты падающего света  $\omega^2$ . Для кубических кристаллов  $\Omega^2$  связана с потоком скорости электронов через поверхность Ферми. Частота релаксации  $\gamma$  включает все механизмы рассеяния электронов. Отрицательные значения действительной части диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1$  в ИК-области спектра является оптическим критерием металлического типа проводимости.

В видимой и ультрафиолетовой областях спектра основным является механизм квантового поглощения света с переходом электронов с занятого уровня на свободный, т.е. межзонное поглощение, дающее информацию об электронном энергетическом спектре. Вклад межзонного поглощения  $\epsilon_2^i(\omega)$  определяется выражением [10]

$$\epsilon_2^i(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{3m^2 \omega^2} \sum_{ij} \int \frac{2}{(2\pi)^3} [f(E_{ik}) - f(E_{jk})] \times \frac{|M_{ij}(\mathbf{k})|^2 dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij}|}. \quad (1)$$

Здесь  $f(E_{ik})$ ,  $f(E_{jk})$  — функция распределения электронов,  $|M_{ij}(\mathbf{k})|$  — вероятность перехода,

$$\hbar \omega_{ij} = E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}) \quad (2)$$

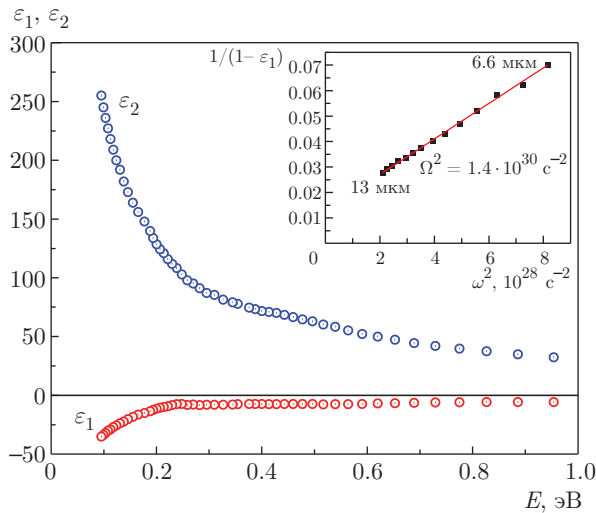
— разность энергий между свободной и занятой зонами,

$$\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij} = \nabla_{\mathbf{k}} [E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})] \quad (3)$$

— градиент разности энергий. Комплексная диэлектрическая проницаемость представляет сумму вкладов от этих механизмов, которые могут сосуществовать в некоторой области энергий.

Дисперсия действительной  $\epsilon_1$  и мнимой  $\epsilon_2$  части диэлектрической проницаемости представлена на рис. 4. В ИК-области спектра наблюдается монотонное увеличение  $\epsilon_2$  и  $|\epsilon_1|$  с уменьшением энергии падающего света вплоть до границы исследованного интервала. Это указывает на металлический характер зависимости данных параметров. Однако абсолютные значения невелики, значительно ниже тех, которые характерны для хороших металлов, и указывает на то, что исследуемый сплав является плохим металлом.

Можно отметить резкое увеличение  $|\epsilon_1|$  при энергиях  $E < 0.25$  эВ. По-видимому, именно в этой области становится заметным вклад внутризонных переходов. Попытаемся оценить величину  $\Omega^2$  из анализа зависимости  $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$  в ИК-области спектра, которая в длинноволновой области



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Дисперсия действительной  $\epsilon_1$  и мнимой  $\epsilon_2$  частей диэлектрической проницаемости сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ . На вставке показана зависимость  $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$  в области 6.6–13 мкм

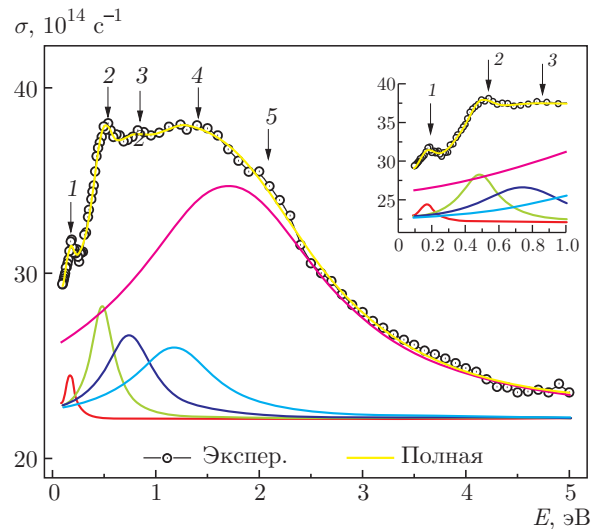
6.6–13 мкм (0.95–0.19 эВ) описывается прямой линией, см. вставку на рис. 4. Наклон прямой соответствует отношению  $1/\Omega^2$  и дает возможность оценить квадрат плазменной частоты электронов проводимости как  $\Omega^2 \sim 1.4 \cdot 10^{30} \text{ c}^{-2}$ .

Для кубических кристаллов квадрат плазменной частоты  $\Omega^2$  определяется скоростью электронов на поверхности Ферми, которая, в свою очередь, связана с плотностью состояний на уровне Ферми [10]:

$$\Omega^2 = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar} \int v dS_F, N(E_F) = \frac{1}{4\pi^3\hbar} \int \frac{dS_F}{v_s}. \quad (4)$$

Здесь  $v$  — абсолютная величина зонной скорости электрона,  $v_s$  — по полосе  $s$  [10]. Согласно зонным расчетам, на уровне Ферми отмечена высокая плотность состояний, образованная  $d$ -состояниями атомов Mn и Fe (рис. 2). Поэтому естественно ожидать низкие значения квадрата плазменной частоты  $\Omega^2$  и связанной с ней эффективной концентрации свободных носителей  $N_{eff} = \Omega^2 m / 4^2$  ( $e$ ,  $m$  — заряд и масса свободного электрона). Установлено, что  $N_{eff} \sim 4.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , и это значение на 1–2 порядка ниже значений, характерных для хороших металлов.

Основной особенностью спектра оптического поглощения сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$  является отсутствие друдевского подъема на кривой  $\sigma(\omega)$ , вплоть до границы исследованного диапазона (рис. 5). Вместе с данными по диэлектрической проницаемости (рис. 4) мы можем рассматривать исследуемый сплав как плохой металл [10]. Спектр оптической



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Дисперсия оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ . На вставке дан крупный ИК-план. Цветные линии — это разложение кривой  $\sigma(\omega)$  на лоренцевы пики

проводимости представляет полосу поглощения, где можно выделить пики при энергиях 0.18, 0.54, 0.83, 1.4 эВ, «плечо» при 1.9–2.3 эВ. Затем интенсивность поглощения медленно уменьшается до уровня  $\sigma \sim 24 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ . Поскольку кривая оптической проводимости имеет несколько пиков, выполним ее разложение на лоренцевские пики (цветные линии на рис. 5). Разложение показало, что зона поглощения может быть представлена суммой вкладов 5 осцилляторов.

Следует отметить отсутствие друдевского подъема на кривой  $\sigma(\omega)$ , что anomalно для металлов и сплавов. Anomalное поведение  $\sigma(\omega)$  ранее было отмечено для некоторых сплавов Гейслера со структурой L2<sub>1</sub>, например,  $\text{Fe}_2\text{VAl}$ ,  $\text{Mn}_{1.8}\text{Co}_{1.2}\text{Al}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnAl}$ , и было связано с наличием энергетической щели в зонном спектре для одной или обеих спиновых подсистем [11–14]. Однако для сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$  ситуация другая. Зонные расчеты, проведенные для структуры  $\beta$ -Mn, показали высокую плотность состояний как на уровне Ферми, так и в его окрестности (3–4 эВ) в обеих спиновых подсистемах.

Анализ особенностей межзонного поглощения проведем на основе вычисления зонного спектра и плотности состояний  $N(E)$  сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ , см. рис. 2. Дисперсия оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  определяется реальной картиной электронного спектра материала, так что представляет интерес сравнить экспериментальную зависимость с теоретическими кривыми, полученными из  $E(k)$  в моде-

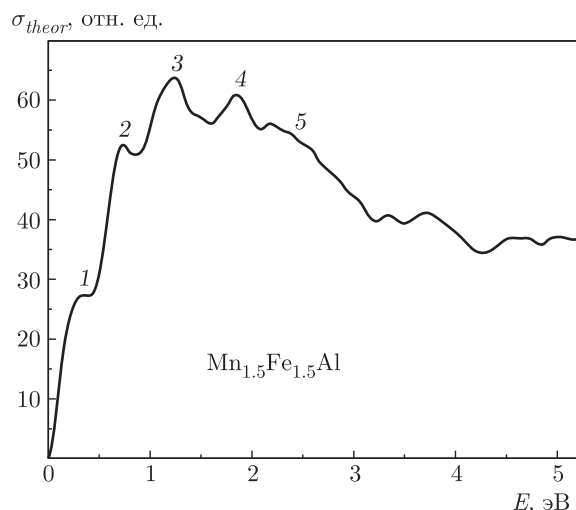


Рис. 6. Расчетный спектр межзонной оптической проводимости сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

ли прямых переходов. Расчетный спектр межзонной части оптической проводимости приведен на рис. 6.

В согласии с экспериментом, основные особенности спектра оптической проводимости ясно проявились в вычислениях, см. рис. 5 и 6. Следует отметить, что экспериментальная и теоретическая кривые слегка отличаются по ширине, энергетическому положению и интенсивности пиков поглощения в исследованной спектральной области. Согласно зонным расчетам, плотность состояний на уровне Ферми в обеих спиновых подсистемах довольно высокая, рис. 2. Расчетные кривые межзонной оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  предсказывают наличие довольно высокого низкоэнергетического вклада. На основе расчетов и с учетом распределения парциальной плотности состояний можно заключить следующее. Переходы с участием  $3d$ -состояния Fe со спином вниз формируют пики 1, 2 и 3, см. рис. 5. При более высоких энергиях становится заметным вклад от переходов с участием  $3d$ -состояний Mn2, Mn1 и Fe в обеих спиновых подсистемах: пики 3, 4, «плечо» 5. Вклад от межзонных переходов с участием  $s$ - и  $p$ -состояний незначителен из-за малости их парциальных плотностей состояний.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены расчеты электронной структуры и изучение оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Оптимизированная кристаллическая структура типа  $\beta$ -Mn представлена для  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Для электронной структуры

$Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  в структуре  $\beta$ -Mn мы получили металлический тип плотности состояний с более низкой плотностью для одной спиновой проекции, соответствующей ферромагнитному упорядочению магнитных моментов Mn. Установлено, что некоторые ионы Mn образуют антиферромагнитное упорядочение с другими магнитными моментами Mn и Fe подобно ранее изученному  $Mn_2FeAl$ . Анализ дисперсии диэлектрической проницаемости в ИК-области спектра указывает на низкие значения эффективной концентрации носителей заряда. Это позволяет охарактеризовать исследуемый сплав как плохой металл. Обнаружено anomalous поведение оптической проводимости сплава в ИК-области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Спектр оптической проводимости имеет сложную частотную зависимость. Особенности на кривой сопоставлены с определенными межзонными переходами электронов. Полученная картина зонного спектра позволяет нам качественно объяснить особенности спектра оптического поглощения и дисперсию диэлектрической проницаемости.

**Благодарности.** Авторы благодарят В. Е. Шилова за помощь с обработкой плотностей состояний.

**Финансирование.** Представленное исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-52-45008 и ДНТ Нью Дели, Индия (проект INT/RUS/RFBR/379). Авторы подтверждают выполнение государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5) (расчет теоретической проводимости). М. Васундхара подтверждает поддержку, оказанную Департаментом K&IM of CSIR-Индийский институт Химических Технологий (ICT/Pubs./2021/065).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. T. Graf, S. S. P. Parkin, and C. Felser, *IEEE Trans. Magn.* **47**, 367 (2011).
2. В. В. Марченков, В. Ю. Ирхин, Ю. А. Первозчикова, П. Б. Терентьев, А. А. Семянникова, Е. Б. Марченкова, М. Эйстерер, *ЖЭТФ* **155**, 1083 (2019).
3. L. Wollmann, S. Chadov, J. Kübler, and C. Felser, *Phys. Rev. B.* **90**, 214420 (2014).

4. Z. J. Yang, Q. H. Gao, H. N. Xiong, J. X. Shao, X. W. Wang, and Z. J. Xu, *Sci. Rep.* **7**, 16522 (2017).
5. Shubhra Dash, A. V. Lukoyanov, Nancy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **513**, 167205 (2020).
6. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter.* **29**, 465901 (2017).
7. T. J. Prior, D. Nguyen-Manh, V. J. Couper, and P. D. Battle, *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, 2273 (2004).
8. I. Gavrikov, M. Seredina, M. Zheleznyy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **478**, 55 (2019).
9. A. Kokalj, *J. Mol. Graph. Model.* **17**, 176 (1999).
10. A. V. Sokolov, *Optical Properties of Metals*, Blackie and Son Limited, London and Glasgow (1965).
11. E. I. Shreder, A. D. Svyazhin, and A. A. Makhnev, *Opt. Spectr.* **119**, 969 (2015).
12. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and K. G. Suresh, *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 965 (2017).
13. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and V. V. Marchenkov, *Phys. Met. Metallogr.* **119**, 1068 (2018).
14. E. I. Shreder, M. M. Kirillova, and V. P. Dyakina, *Phys. Met. Metallogr.* **81**, 406 (1996).