

УДК 538.958

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СОЕДИНЕНИЙ $Mn_{100-x}Al_x$ ($x = 20$ и 30) СО СТРУКТУРОЙ β -Mn

© 2023 г. Ю. В. Князев^{1, *}, А. В. Лукоянов^{1, 2}, Ю. И. Кузьмин¹, Shubhra Dash^{3, 4}, Ajit K. Patra³, M. Vasundhara⁵

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО Российской академии наук, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

²Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

³Центральный университет Раджастана NH-8, Бандарсиндри, Раджастан, 305817 Индия

⁴Технологический институт MLR, Хайдарабад-500043, Телангана, Индия

⁵Отдел полимеров и функциональных материалов, CSIR-Индийский институт химических технологий Тарнака, Хайдарабад, 500007 Телангана, Индия

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

Поступила в редакцию 05.07.2022 г.

После доработки 07.12.2022 г.

Принята к публикации 08.12.2022 г.

Представлены результаты расчета электронных спектров, а также исследования оптических свойств бинарных соединений $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$ со структурой β -Mn. Энергетические зависимости вычисленных плотностей электронных состояний, имеющих высокие значения на уровне Ферми, определяются широкими зонами, связанными с $3d$ -электронами марганца. На основе рассчитанных электронных структур проведен анализ экспериментальных спектров оптических проводимостей сплавов в области квантового поглощения света. По результатам исследований оптических свойств в инфракрасном диапазоне спектра определен ряд характеристик электронов проводимости.

Ключевые слова: электронная структура, плотность состояний, оптическая проводимость, сплавы Гейслера

DOI: 10.31857/S0002337X23010098, **EDN:** OQHNER

ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера с высоким содержанием марганца вызывают научный интерес в контексте поиска и изучения эффективных материалов для микроэлектроники. Ряд уникальных свойств электронной структуры, большие значения магнитооптических и магниторезистивных эффектов, наблюдаемых в данных соединениях [1, 2], могут служить основой для их практического использования. Главной особенностью энергетического спектра таких сплавов является наличие энергетической щели на уровне Ферми E_F в одной из двух спиновых подсистем и отсутствие щели в другой [3]. Данный фактор способствует возникновению состояния полуметаллического ферромагнетика, характеризующегося спиновой поляризацией носителей тока. Большие величины такой поляризации, высокие температуры Кюри T_C , малые значения магнитных моментов, ослабляющие влияние внешних и внутренних магнитных полей, являются факторами, определяющими использование этих материалов в устройствах спин-

троники. Энергетическая щель на E_F в данных соединениях возникает в результате особенностей гибридизации d -состояний Mn, а ее величина, по теоретическим оценкам [4, 5], близка к 1 эВ. При этом атомный беспорядок, изменение структурного состояния и термически активированное межэлектронное взаимодействие могут приводить к деполаризации зонного спектра, разрушая полуметаллический характер проводимости [3, 6, 7]. В некоторых сплавах Гейслера на основе марганца было предсказано существование ферримагнитного упорядочения [8–10]. Теоретически показано, что наиболее перспективными материалами для практических целей могут быть компенсированные ферримагнетики, поскольку они обладают нулевым магнитным моментом, а их несимметричная структура энергетического спектра позволяет достигать почти 100% спиновой поляризации [11–13]. Экспериментально наличие такого состояния с предельно низким магнитным моментом ($\sim 0.1 \mu_B$) было установлено при нейтронографических исследованиях тонких пленок соединения Mn_3Al [14].

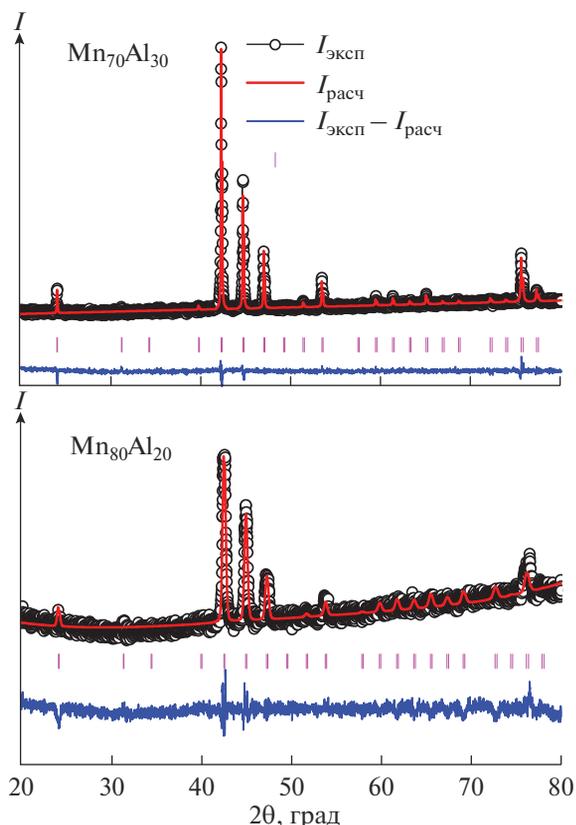


Рис. 1. Экспериментальные и рассчитанные дифрактограммы порошковых сплавов $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$ со структурой кубического β -Mn.

К указанным материалам относятся ферромагнитные сплавы $Mn_{1-x}Al_x$ вблизи стехиометрического состава Mn_3Al , обладающие высокой температурой Кюри ($T_C \sim 600$ К). Как правило, эти соединения, проявляющие полуметаллические свойства, упорядочены в кубической $L2_1$ (Cu_2MnAl , пр. гр. $Fm\bar{3}m$) или инверсной X_α (Hg_2CuTi , пр. гр. $F\bar{4}3m$) структурах. При определенных условиях, как следует из работ [8, 15, 16], в данных сплавах возможно образование геометрически фрустрированной кубической β -Mn ($P4_132$, группа 213) и тетрагональной ($P4/mmm$, группа 123) структур с антиферромагнитным упорядочением магнитных моментов. Показано, что последние два типа упорядочения могут сопровождаться отсутствием в соединениях полуметаллических свойств. В частности, расчеты электронной структуры Mn_3Al , проведенные для таких кристаллических фаз, показали, что их энергетические спектры не проявляют особенностей, характерных для сплавов Гейслера, а соответствуют металлическому состоянию сплава [16]. Данный вывод подтвержден результатами исследований транспортных характеристик этого материала, показавшими, что вели-

чина концентрации носителей тока $N \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ [17] типична для хороших металлов.

С целью получения дополнительных экспериментальных данных о влиянии структурного состояния на формирование физических свойств в настоящей работе проведено изучение электронных и спектральных характеристик двух соединений состава $Mn_{100-x}Al_x$ ($x = 20$ и 30) со структурой кубического β -Mn. Использовался метод, сочетающий оптические исследования с теоретическими расчетами электронной структуры соединений с учетом магнитных моментов ионов марганца и алюминия.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Поликристаллические сплавы $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$ были приготовлены дуговой плавкой из металлов высокой чистоты (99.99%) в атмосфере очищенного аргона. Для гомогенизации выплавленные слитки сначала отжигались в вакууме при температуре $\sim 1000^\circ\text{C}$ в течение 24 ч, затем при 650°C в течение 4 сут. Рентгенографические исследования порошковых образцов данных сплавов проведены при комнатной температуре на дифрактометре высокого разрешения PANalytical Empyrean в CuK_α -излучении ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) с шагом сканирования 0.013° в интервале углов 20° – 90° . Анализ фазового состава и расчет параметров кристаллической решетки выполнены на базе программы FullProf. Результаты исследования показали, что оба соединения являются однофазными и обладают кубической кристаллической структурой типа β -Mn (пр. гр. $P4_132$) с параметрами решетки $a = 6.4160 \text{ \AA}$ ($Mn_{70}Al_{30}$) и $a = 6.3743 \text{ \AA}$ ($Mn_{80}Al_{20}$). Дифрактограммы порошковых образцов данных сплавов, указывающие на отсутствие следов какой-либо другой фазы, представлены на рис. 1.

Оптические свойства сплавов исследованы эллипсометрическим методом при длинах волн $\lambda = 0.22$ – 16 мкм (энергетический диапазон $E = 0.078$ – 5.64 эВ). Измерения, выполненные при комнатной температуре с точностью 2–5%, охватывают ультрафиолетовую, видимую и инфракрасную области спектра. В эксперименте определялись разности фаз и амплитуды световых волн s - и p -поляризации, отраженных от зеркальных поверхностей образцов. Данные параметры, зависящие от частоты света, дают возможность рассчитать оптические постоянные соединений: показатели преломления $n(\lambda)$ и поглощения $k(\lambda)$, а также отражательную способность $R(E)$, оптическую проводимость $\sigma(E)$ и комплексную диэлектрическую проницаемость $\epsilon(E)$.

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Расчеты электронной структуры соединений $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$ были выполнены на базе компьютерного пакета программ Quantum Espresso [18] с использованием приведенных выше экспериментальных значений постоянных решетки. Такие теоретические методы на основе теории функционала плотности широко используются для расчетов электронной структуры материалов, содержащих марганец [16, 19–21]. В вычислениях применялось приближение обобщенной градиентной поправки (GGA) версии Perdew-Burke-Ernzerhof [22]. Расчеты проводились с учетом спиновой поляризации электронных состояний, что позволило описать магнитные моменты отдельных ионов и их направления в двух спиновых проекциях (вверх и вниз). Для интегрирования в обратном пространстве использована сетка из $12 \times 12 \times 12$ k -точек. В базис орбитальных состояний были включены $3d$ -, $4p$ -, $4s$ -состояния марганца и $3d$ -, $3p$ -, $3s$ -состояния алюминия. Волновые функции в расчетах были разложены по плоским волнам. Достаточная сходимость в цикле самосоглашения обеспечивалась заданным энергетическим пределом для плоских волн, равным 60 Ry. Тензоры мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости, при учете прямых межзонных переходов, собственных значений и собственных векторов, рассчитывались в программе QE epsilon.x из пакета [18].

В соединениях $Mn_{100-x}Al_x$ ($x = 20$ и 30) кубическая фаза типа β -Mn характеризуется атомными позициями с точечной симметрией $8c$ и $12d$. В позициях $8c$ располагаются 5 атомов Al и 3 атома Mn, тогда как позиции $12c$ полностью заполнены атомами Mn. Магнитные моменты ионов марганца задавались в виде стартовой спиновой поляризации электронных состояний с разными типами направлений магнитных моментов ионов марганца в рамках приближения GGA без дополнительных параметров. Более подробно вопросы расположения магнитных моментов ионов марганца в близком соединении Mn_2FeAl с аналогичной кристаллической структурой типа β -Mn рассмотрены в работе [16]. Расчет показал, что наиболее выгодным по полной энергии является антиферромагнитный тип упорядочения. При этом магнитный момент на ионах алюминия близок к нулю, а полный магнитный момент составляет $\sim 0.3 \mu_B$. Это согласуется с результатами магнитных измерений, указывающих на близкий к нулю полный магнитный момент сплавов Mn_2FeAl [16] и Mn_3Al [17].

Результаты расчета полных $N(E)$ и частичных плотностей электронных состояний исследуемых соединений в двух спиновых проекциях (\uparrow и \downarrow) для кубической фазы типа β -Mn представлены на рис. 2. Видно, что указанные зависимости для обоих материалов обладают большим сходством.

Интервалы повышенных значений плотностей состояний, расположенные по обе стороны от уровня Ферми ($-4 < E_F < 4$ эВ), связаны с $3d$ -состояниями марганца. Локализация E_F в этой области энергий соответствует металлическому типу проводимости данных соединений. Электронные плотности $4p$ -, $4s$ -состояний атомов Mn и $3s$ -, $3p$ -, $3d$ -состояний атомов Al распределены по более широкому диапазону энергий, а их интенсивности существенно ниже.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По значениям оптических постоянных, полученных в эксперименте, рассчитаны дисперсионные зависимости оптической проводимости соединений $\sigma(\omega) = \epsilon_2 \omega / 4\pi$ (ω – циклическая частота света, $\epsilon_2 = 2nk$ – мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости). Соответствующие кривые, форма которых почти идентична для обоих материалов, представлены на рис. 3. В низкоэнергетической области спектра зависимости $\sigma(\omega)$ характеризуются резким спадом с последующим образованием глубокого минимума при ~ 0.8 эВ. С ростом энергии света величина оптических проводимостей изучаемых сплавов возрастает, а в контурах данных кривых проявляются два максимума: вблизи 1.5 и 3 эВ. Подобный характер поведения зависимостей $\sigma(\omega)$, при котором отчетливо выделяются области, соответствующие внутри- и межзонному поглощению света, как правило, типичен для материалов с металлическим типом проводимости. В инфракрасной области спектра при $E < \sim 0.7$ эВ дисперсия, соответствующая $\sigma \sim \omega^{-2}$, указывает на проявление внутризонного (друдевского) механизма возбуждения электронов светом. Интерпретация оптических свойств в данном энергетическом интервале на основе линейного уравнения движения электрона в переменном электромагнитном поле позволяет по значениям n и k рассчитать плазменные ω_p и релаксационные γ частоты носителей заряда, определяющие соответственно частоту коллективных колебаний и аддитивную величину всех типов рассеяния электронов [23]. Полученные значения указанных параметров в рамках погрешности эксперимента почти совпадают для обоих соединений и составляют $\omega_p = 6 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$ и $\gamma = 3 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Величина концентрации электронов проводимости $N = 9 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$, определяемая из соотношения $N = \omega_p^2 / 4\pi e^2$ (m и e – масса и заряд электрона), по порядку величины находится в соответствии с результатами, полученными для близкого по составу сплава Mn_3Al из измерений эффекта Холла [17]. На вставке к рис. 3 представлена энергетическая зависимость отражательной способности $R(E) = [(n-1)^2 + k^2] / [(n+1)^2 + k^2]$ соединения

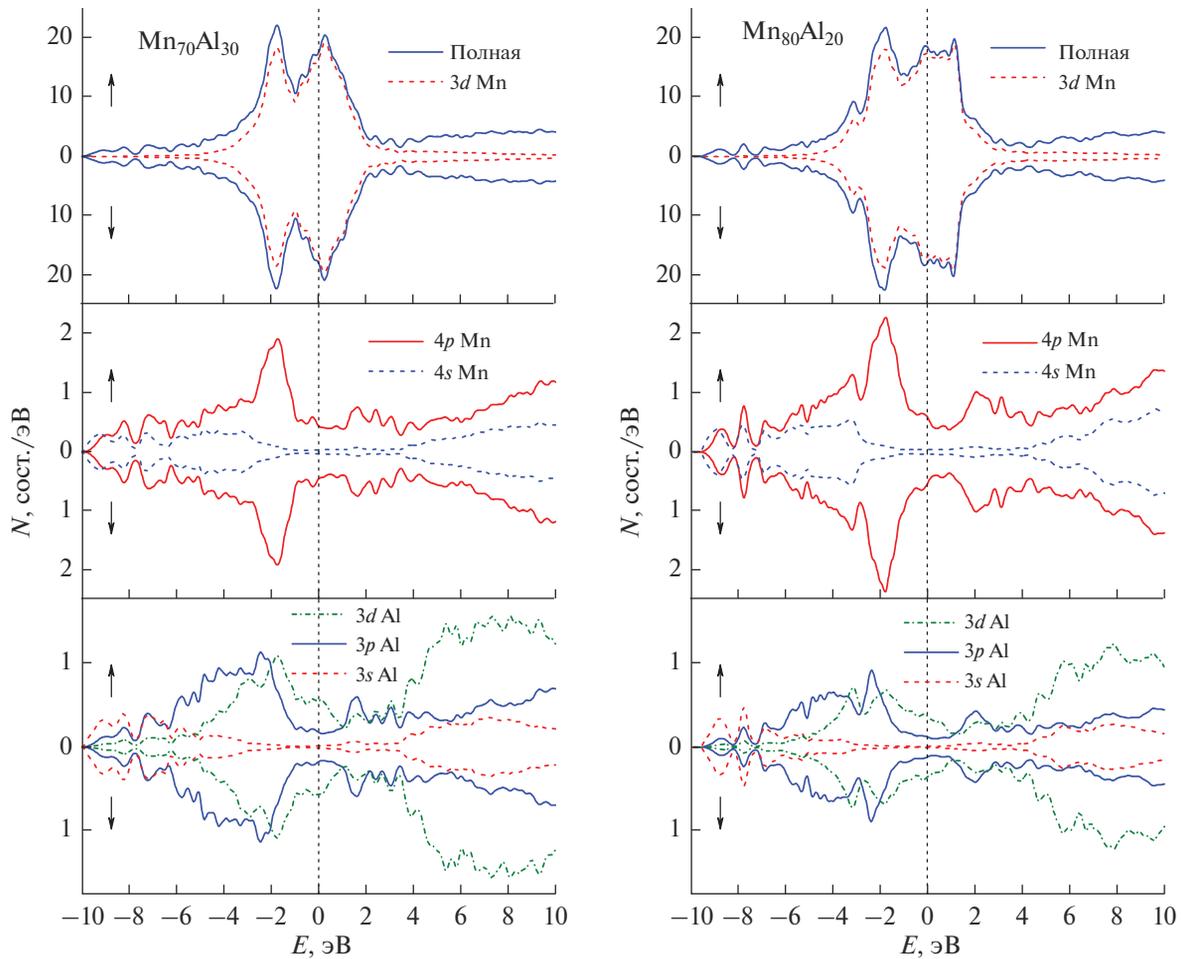


Рис. 2. Полные и парциальные плотности электронных состояний антиферромагнитных соединений $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$.

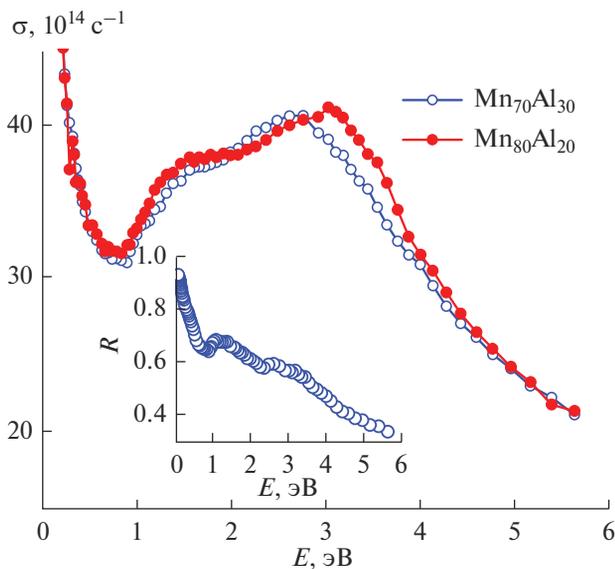


Рис. 3. Дисперсионные зависимости оптической проводимости соединений $Mn_{70}Al_{30}$ и $Mn_{80}Al_{20}$ (на вставке представлена отражательная способность $Mn_{70}Al_{30}$).

$Mn_{70}Al_{30}$, которая практически идентична $R(E)$ для $Mn_{80}Al_{20}$. Поведение данной зависимости также характерно для материалов с металлической проводимостью, на что указывает резкое возрастание R при $\omega \rightarrow 0$.

С увеличением энергии фотонов в спектрах $\sigma(\omega)$ появляются особенности, связанные с межзонными переходами электронов под действием света. Данный механизм возбуждения электронов, сопровождаемый возникновением полос поглощения, на определенном участке спектра сосуществует с внутризонным. Межзонные компоненты оптической проводимости $\sigma_{inter}(\omega)$ соединений можно оценить при вычитании внутризонных составляющих $\sigma_D(\omega) = \omega_p^2 \gamma / 4\pi(\omega^2 + \gamma^2)$ из экспериментальных зависимостей $\sigma_{inter}(\omega) = \sigma(\omega) - \sigma_D(\omega)$. Полученные кривые $\sigma_{inter}(\omega)$ представлены на рис. 4, также показаны друдевские вклады. Поскольку дисперсия оптической проводимости материала в области межзонного поглощения света определяется структурой его электронного спек-

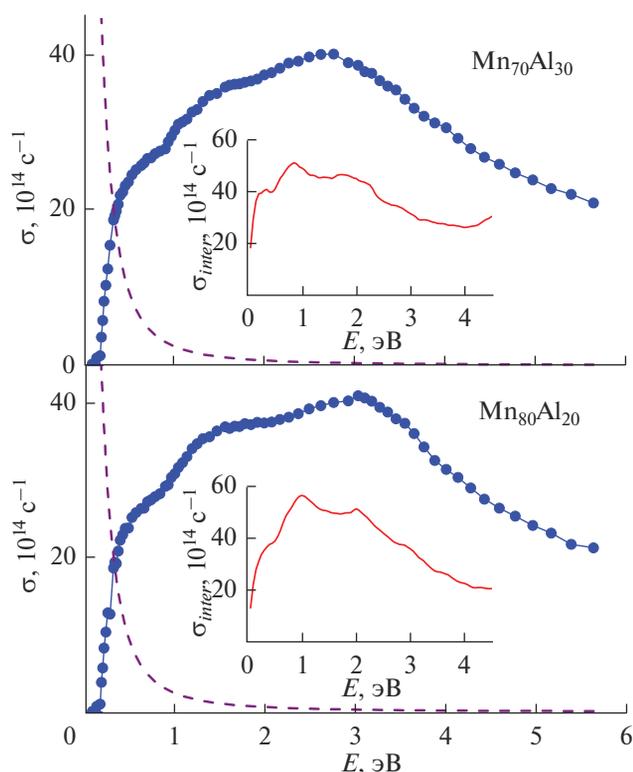


Рис. 4. Спектры межзонных оптических проводимостей соединений $\text{Mn}_{70}\text{Al}_{30}$ и $\text{Mn}_{80}\text{Al}_{20}$: кружки – эксперимент, пунктир – друдевский вклад; на вставке – результат расчета в программе QE epsilon.x из пакета [18].

тра, заслуживает внимание сопоставление эмпирических зависимостей $\sigma_{inter}(\omega)$ с теоретическими, полученными из рассчитанных диэлектрических проницаемостей (вставки на рис. 4).

Из рис. 4 следует, что энергетические интервалы интенсивного межзонного поглощения, определяемые в эксперименте, качественно воспроизводятся в вычисленных зависимостях межзонных оптических проводимостей. При отсутствии корреляции в элементах тонкой структуры наблюдается соответствие в общих формах кривых. В согласии с экспериментом в расчетах $\sigma_{inter}(\omega)$ отражены протяженность и локализации данных интервалов; показано, что межзонное поглощение резко убывает при $E \rightarrow 0$ и существенно ослабевает при $E > \sim 3$ эВ. Высокая интенсивность оптического поглощения в указанном диапазоне энергий, как следует из структуры $N(E)$, в обоих соединениях имеет сходную природу и обусловлена преимущественно межзонными переходами между гибридизированными $3d$ -состояниями Mn, расположенными ниже и выше E_F . Вклад в межзонную проводимость, связанный с s - и p -зонами, незначителен ввиду малости их парциальных плотностей состояний. В целом, наблюдаемое качественное соответствие экспериментальных и теоретических за-

висимостей $\sigma_{inter}(\omega)$ для $\text{Mn}_{70}\text{Al}_{30}$ и $\text{Mn}_{80}\text{Al}_{20}$ свидетельствует о том, что проведенные расчеты электронной структуры дают адекватное описание оптических свойств данных соединений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Зонные расчеты плотностей электронных состояний соединений $\text{Mn}_{70}\text{Al}_{30}$ и $\text{Mn}_{80}\text{Al}_{20}$ со структурой β -Mn показали наличие широкой (~ 8 эВ) энергетической зоны, формируемой преимущественно $3d$ -состояниями атомов марганца. При этом спиновая поляризация энергетических зон мала, а уровень Ферми локализован в области высоких значений $N(E)$. Качественное сходство теоретических и экспериментальных зависимостей межзонных оптических проводимостей свидетельствует о том, что представленные вычисления дают адекватное описание оптических свойств соединений в данной области энергий. Наблюдается соответствие по энергетическому положению, общей структуре и протяженности полос межзонного поглощения. Металлический тип проводимости данных соединений, прогнозируемый вычислениями плотности состояний, подтверждается оптическими исследованиями.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема “Электрон”, № 122021000039-4).

М. Васундхара благодарит за поддержку, оказанную Департаментом K&IM Индийского института химической технологии (ИСТ/Pubs./2023/180).

А.К. Patra благодарит за поддержку SERB-DST, Нью-Дели, Индия (грант CRG/2020/003590).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Elphick K., Frost W., Samiepour M., Kubota T., Takanashi K., Sukegawa H., Mitani S., Hirohata A. Heusler Alloys for Spintronic Devices: Review on Recent Development and Future Perspectives // *Sci. Technol. Adv. Mater.* 2021. V. 22. № 1. P. 235–271. <https://doi.org/10.1080/14686996.2020.1812364>
2. Jiang S., Yang K. Review of High-Throughput Computational Design of Heusler Alloys // *J. Alloys Compd.* 2021. V. 867. P. 158854–1–158854-14. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.158854>
3. 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. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.315>
4. Wollmann L., Chadov S., Kübler J., Felser C. Magnetism in Cubic Manganese-Rich Heusler Compounds // *Phys. Rev. B.* 2014. V. 90. № 21. P. 214420–1–214420-11. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.214420>

5. Li T., Khenata R., Cheng Z., Chen H., Yuan H., Yang T., Kuang M., Omran S.B., Wang X. Martensitic Transformation, Electronic Structure and Magnetism in D0₃-Ordered Heusler Mn₃Z (Z = B, Al, Ga, Ge, Sb) Alloys // *Acta Crystallogr., Sect. B*. 2018. V. 74. P. 673–680. <https://doi.org/10.1107/S2052520618013525>
6. Skomski R. Finite-Temperature Depolarization in Half Metals // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2007. V. 19. № 31. P. 315202-1–315202-14. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/31/315202>
7. 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. 064418-1–064418-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.064418>
8. Gavrikov I., Seredina M., Zheleznyy M., Shchetinin I., Karpenkov D., Bogach A., Chatterjee R., Khovaylo V. Magnetic and Transport Properties of Mn₂FeAl // *J. Magn. Magn. Mater.* 2019. V. 478. № 1. P. 55–58. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.01.088>
9. Gao G.Y., Yao K.-L. Antiferromagnetic Half-metals, Gapless Half-metals, and Spin Gapless Semiconductors: The D0₃-type Heusler Alloys // *Appl. Phys. Lett.* 2013. V. 103. № 23. P. 232409-1–232409-5. <https://doi.org/10.1063/1.4840318>
10. Azar S.M., Hamad B.A., Khalifeh J.M. Structural, Electronic and Magnetic Properties of Fe_{3-x}Mn_xZ (Z = Al, Ge, Sb) Heusler Alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2012. V. 324. № 10. P. 1776–1785. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.12.037>
11. Han J., Wu X., Feng Y., Gao G. Half-Metallic Fully Compensated Ferrimagnetism and Multifunctional Spin Transport Properties of Mn₃Al // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2019. V. 31. № 30. P. 305501-1–305501-9. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab1732>
12. Jum'h I., Sâad essaoud S., Baaziz H., Charifi Z., Telfah A. Electronic and Magnetic Structure and Elastic and Thermal Properties of Mn₂-Based Full Heusler Alloys // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2019. V. 32. P. 3915–3926. <https://doi.org/10.1007/s10948-019-5095-3>
13. Li Q.F., Yang C.H., Su J.L. Effect of Doping V on the Half-Metallic and Magnetic Properties of Mn₃Al Intermetallic Compound // *Physica B: Condens. Matter*. 2011. V. 406. № 19. P. 3726–3730. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.07.003>
14. 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 Mn₃Al // *Phys. Rev. Appl.* 2017. V. 7. № 6. P. 064036-1–064036-7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.7.064036>
15. 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 β-Mn // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110. № 26. P. 267207-1–267207-5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.267207>
16. Dash S., Lukoyanov A.V., Nancy, Mishra D., Rasi U.P.M., Gangineni R.B., Vasundhara M., Patra A.K. Structural Stability and Magnetic Properties of Mn₂FeAl Alloy with a β-Mn Structure // *J. Magn. Magn. Mater.* 2020. V. 513. P. 167205-1–167205-9. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167205>
17. Марченков В.В., Ирхин В.Ю., Перевозчикова Ю.А., Теряниев П.Б., Семьяникова А.А., Марченкова Е.Б., Эустерер М. Кинетические свойства и полуметаллический магнетизм в сплавах Гейслера Mn₂YAl // *ЖЭТФ*. 2019. Т. 155. № 6. С. 1083–1090. <https://doi.org/10.1134/S0044451019060129>
18. 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., Fratessi 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. 395502-1–395502-19. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
19. Яржемский В.Г., Мурашов С.В., Изотов А.Д. Электронное строение и температура ферромагнитного перехода Ga_{1-x}Mn_xAs в неэмпирическом методе локального обмена // *Неорган. материалы*. 2019. Т. 55. № 1. С. 3–10. <https://doi.org/10.1134/S0002337X19010184>
20. Яржемский В.Г., Мурашов С.В., Изотов А.Д. Электронное строение и обменное взаимодействие в магнитных полупроводниках Ga_{1-x}Mn_xAs и In_{1-x}Mn_xSb // *Неорган. материалы*. 2016. Т. 52. № 2. С. 119–123. <https://doi.org/10.7868/S0002337X16020172>
21. Яржемский В.Г., Мурашов С.В., Изотов А.Д. Расчет электронного строения и обменного взаимодействия в полупроводниках InSb и GaAs при легировании Mn и Ni // *Неорган. материалы*. 2017. Т. 53. № 11. С. 1158–1162. <https://doi.org/10.7868/S0002337X17110057>
22. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
23. Носков М.М. Оптические и магнетооптические свойства металлов Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. С. 220.