

ОБЪЕМНАЯ МАГНИТОСТРИКЦИЯ СПЛАВОВ FE-GA: РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

М.В. Матюнина¹, В.Д. Бучельников^{1,2}, М.А. Загребин^{1,3}, В.В. Соколовский^{1,2}

¹ Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация

³ Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: matunins.fam@mail.ru

Представлены исследования магнитных и магнитоупругих свойств кристаллических структур A2 и D0₃ сплавов Fe_{100-x}Ga_x ($x = 18 - 22$ ат. %), выполненные при помощи теории функционала плотности. Расчеты выполнены при помощи программного пакета SPR-KKR. Рассчитаны обменные интегралы, значения объемной магнитоупругой постоянной B_0 и объемной магнитоэластики $\Delta V/V$. Полученная зависимость констант магнитного обменного взаимодействия от параметра кристаллической решетки является убывающей функцией как для структуры A2 так и для D0₃. Показано, что ферромагнитное взаимодействие между атомами железа в первой координационной сфере усиливается с ростом концентрации Ga в полностью неупорядоченной фазе A2, в то время как в упорядоченной кристаллической структуре D0₃ данное взаимодействие ослабляется. Рассчитанные величины $\Delta V/V$ для различных композиций сплавов Fe_{100-x}Ga_x лежат в области отрицательных значений. Зависимость объемной магнитоэластики от содержания Ga является возрастающей функцией для структуры A2 и убывающей $\Delta V/V$ для фазы D0₃. Характер зависимости объемной магнитоэластики от концентрации Ga структуры A2 согласуется с экспериментальными данными и с результатами, полученными для соединений на основе Ni.

Ключевые слова: Fe-Ga; обменное взаимодействие; объемная магнитоэластика; первопринципные вычисления.

Введение

Сплавы Fe-Ga являются широко исследуемыми, перспективными магнитоэластичными материалами, актуальными в технике в качестве датчиков микроэлектромеханических систем и преобразователей энергии. Небольшая добавка Ga в структуру α -Fe приводит к десятикратному увеличению магнитоэластики сплавов относительно чистого железа [1, 2]. На магнитоэластичные свойства сплавов существенное влияние оказывает фазовый состав композиций, который в свою очередь зависит от термических условий обработки образцов [2–6]. В медленно охлажденных образцах величина тетрагональной магнитоэластики λ_{100} в слабом магнитном поле достигает двух пиков: $180 \cdot 10^{-6}$ при $x \approx 19$ ат. % и $156 \cdot 10^{-6}$ при $x \approx 27$ ат. %. В закаленных образцах эти значения выше и составляют $\sim 263 \cdot 10^{-6}$ вблизи 19 % Ga и $233 \cdot 10^{-6}$ около 27 % Ga [2]. Величина ромбоэдрической магнитоэластики λ_{111} составляет $25,3 \cdot 10^{-6}$ и $32 \cdot 10^{-6}$ в сплавах Fe_{79,1}Ga_{20,9} и Fe_{71,2}Ga_{28,8}, соответственно. Добавка немагнитных атомов Ga к железу влияет не только на величину линейной, но и объемной магнитоэластики $\Delta V/V$. В работах [7, 8] показано, что в сильном магнитном поле в *as-cast* сплавах Fe₈₁Ga₁₉ объемная магнитоэластика достигает значения $20 \cdot 10^{-6}$, что в пять раз больше относительно чистого Fe [7]. В поликристаллических сплавах с содержанием 15, 20 и 29 ат. % Ga в сильных полях (до 5 Тл) вклад объемной магнитоэластики составил около 33 % [7, 8]. Авторы статей [7, 8] связывают полученные результаты с наличием полностью неупорядоченной структуры A2 в исследуемых образцах.

В рамках первопринципных вычислений постоянные магнитоэластики λ_{100} и λ_{111} кристаллов кубической симметрии можно рассчитать исходя из зависимости энергии магнитоэластической анизотропии E_{MKA} от небольших деформаций [6, 9]. Для определения тетрагональной магнитоэластики энергия системы вычисляется в направлениях [001] и [111], в случае ромбоэдрической – вдоль осей [111] и $[11\bar{2}]$. Разность энергий, полученных вдоль указанных направлений

позволяет определить энергию магнитокристаллической анизотропии, а затем и постоянные магнитострикции согласно формулам

$$\lambda_{001} = \frac{3}{2V} \frac{dE_{MKA}/d\varepsilon}{d^2E_{полн}/d\varepsilon^2} = -\frac{b_1}{3C'}; \lambda_{111} = \frac{3}{2V} \frac{dE_{MKA}/d\varepsilon}{d^2E_{полн}/d\varepsilon^2} = -\frac{b_2}{3C_{44}},$$

где V – объем структуры, C' , C_{44} – упругие константы, ε – малые искажения при постоянном объеме, $E_{полн}$ – полная энергия. Результаты расчетов магнитострикции хорошо согласуются с экспериментальными данными и представлены в работах [6, 9–11]. В отличие от констант линейной магнитострикции, величину объемной магнитострикции можно оценить из зависимости энергии обменного взаимодействия от расстояния между парами спинов [12].

Целью данной работы является вычисление объемной магнитострикции сплавов $Fe_{100-x}Ga_x$ ($x = 18 - 22$ ат.%) в структурных фазах A2 и D0₃ в зависимости от концентрации атомов Ga методом теории функционала плотности.

1. Детали вычислений

Расчеты выполнены с использованием теории функционала плотности, реализованной в пакете SPR-KKR (*a spin-polarized relativistic Korringa–Kohn–Rostoker code*) [13]. Учет обменно-корреляционных эффектов проводился в приближении обобщенного градиента (general gradient approximations – GGA) в формулировке Пердью, Бурке и Эрнцернхофа (Perdew, Burke, Ernzerhof – PBE) [14]. Самосогласованные вычисления выполнены с использованием k -сетки 45^3 с 2880 k -точками. Для оптимизации кристаллической структуры были использованы две кубические структуры: A2 ($Im\bar{3}m$, группа симметрии № 229, прототип α -Fe) и D0₃ ($Fm\bar{3}m$, группа симметрии № 225, прототип BiF_3). Химический беспорядок моделировался с использованием приближения когерентного потенциала. Равновесные параметры решетки a_0 и объемный модуль упругости B были получены из зависимости полной энергии от объема ячейки в соответствии с уравнением состояния Берча–Мурнагана. Для каждой композиции $Fe_{100-x}Ga_x$ ($x = 18 - 22$ ат.%) были вычислены константы магнитного обменного взаимодействия в гамилтониане Гейзенберга в зависимости от параметра решетки. Расчеты проводились на k -сетке 57^3 с 4495 k точками. Объемная магнитострикция определялась по следующей формуле [12, 15]

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{r_0 n z}{3B} \frac{\partial J_{ij}}{\partial r} \langle S_i \cdot S_j \rangle = \frac{B_0}{B}, \quad (1)$$

где n – количество атомов, приходящихся на объем элементарной ячейки, J_{ij} – обменный интеграл между атомами i и j , расположенных на наименьшем расстоянии r , z – число ближайших соседей, r_0 – расстояние между атомами i и j для немагнитного состояния системы, $S_{i(j)}$ – спин единичной длины ($|S_i| = 1$), B_0 – объемная магнитоупругая постоянная.

2. Результаты вычислений

На первом этапе были проведены самосогласованные расчеты для структур A2 и D0₃ сплавов $Fe_{100-x}Ga_x$ ($x = 18-22$ ат.%) при различных параметрах решетки. Основываясь на полученных данных для различных концентраций x были вычислены константы магнитного обменного взаимодействия J_{ij} . Наибольшие взаимодействия в A2 и D0₃ структурах наблюдаются между атомами железа, расположенными в первой координационной сфере ($r^{A2} = a\sqrt{3}/2$, $r^{D0_3} = a\sqrt{3}/4$). В случае фазы A2 имеется один сорт атомов Fe, в то время как в кристаллической решетке D0₃ в зависимости от занимаемой позиции можно выделить три типа атомов: Fe₁ – занимающие позиции 8c ($1/4, 1/4, 1/4$); Fe₂ – размещенные на позиции 4b ($1/2, 1/2, 1/2$); Fe₃ – расположенные на позициях 4a (0, 0, 0) совместно с атомами Ga. Наибольшее значение констант $J_{ij}^{D0_3}$ наблюдается между атомами Fe₁–Fe₂.

На рис. 1 представлены концентрационные зависимости констант магнитного обменного взаимодействия атомов железа в первой координационной сфере. Видно, что с увеличением параметра решетки обменное взаимодействие уменьшается в обеих структурах, что объясняется увеличением расстояния между ближайшими спинами. В неупорядоченной фазе A2 значения J_{ij} больше, чем в фазе D0₃. При увеличении концентрации Ga в структуре A2 происходит усиление

ферромагнитного взаимодействия между атомами Fe. Данный факт можно объяснить тем, что в неупорядоченной фазе A2 увеличение количества атомов Ga приводит к сближению атомов железа из-за большего радиуса атомов Ga и их случайного расположения в решетке. В упорядоченной D0₃ фазе, напротив, ферромагнитное взаимодействие Fe₁-Fe₂ ослабляется по мере увеличения атомов Ga в решетке из-за того, что они вынуждены размещаться по узлам упорядоченной кристаллической структуры, тем самым, увеличивая расстояние между ближайшими атомами железа.

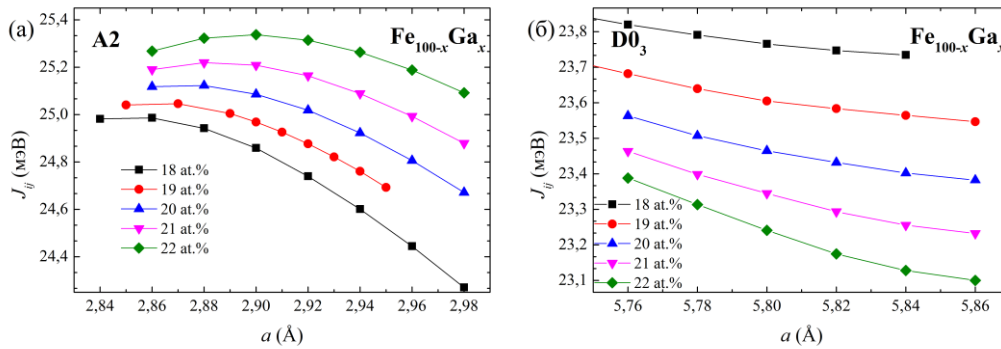


Рис. 1. Концентрационные зависимости констант магнитного обменного взаимодействия J_{ij} от параметра кристаллической решетки a в первой координационной сфере для (а) A2 и (б) D0₃ фаз сплавов Fe_{100-x}Ga_x

В соответствии с соотношением (1) рассчитаны объемные магнитоупругие постоянные, значения которых представлены в таблице. В таблице также приведены равновесные значения параметров решетки a_0 и объемные модули упругости B . В исследуемом диапазоне концентраций $18 \leq x \leq 22$ ат. % значение равновесного параметра практически не меняется с увеличением концентрации Ga и составляет $a_0 \approx 2,92 \text{ \AA}$ для полностью разупорядоченной структуры A2 и $a_0/2 \approx 2,90 \text{ \AA}$ для упорядоченной фазы D0₃. Добавка галлия в решетку A2 приводит к уменьшению значений объемного модуля упругости B , в то время как в D0₃ фазе данный параметр практически не изменяется. Значения объемной магнитоупругой постоянной B_0 отрицательны. По абсолютной величине значения B_0^{A2} уменьшаются почти в два раза для композиции Fe₇₈Ga₂₂ по сравнению с составом Fe₈₂Ga₁₈. Для D0₃ наблюдается обратная зависимость поведения $B_0(x)$ в исследуемом диапазоне.

Таблица

Равновесный параметр решетки a_0 (Å), объемный модуль упругости B (ГПа) и объемная магнитоупругая постоянная B_0 (ГПа) кристаллических структур A2 и D0₃ сплавов Fe_{100-x}Ga_x

x , ат. %	A2			D0 ₃		
	a_0	B	B_0	$a_0/2$	B	B_0
18	2,915	171,0	-0,663	2,902	158,2	-0,060
19	2,917	158,7	-0,508	2,903	157,9	-0,063
20	2,919	166,5	-0,445	2,903	157,7	-0,088
21	2,923	164,1	-0,337	2,904	157,8	-0,115
22	2,924	163,5	-0,300	2,905	158,0	-0,145

На основании данных таблицы получены значения объемной магнитоупругости $\Delta V/V$ в зависимости от концентрации Ga, показанные на рис. 2.

Как следует из таблицы и рис. 2, поведение зависимости $\Delta V/V(x)$ повторяет зависимость $B_0(x)$. Порядок значений магнитоупругости составляет 10^{-3} , что в сто раз больше экспериментальных данных, представленных в работах [7, 8]. В работе [8] значения $\Delta V/V$, полученные для поликристаллов с содержанием $x = 15, 20, 29$ ат. % в магнитных полях до 5 Тл составляют $15 \cdot 10^{-6}$, $29 \cdot 10^{-6}$ и $27 \cdot 10^{-6}$ соответственно. В *as-cast* сплавах Fe₈₁Ga₁₉ объемная магнитоупругость достигает значения $20 \cdot 10^{-6}$ [7]. Различие между экспериментальными данными [7, 8] и полученными в данной работе результатами может быть объяснено тем, что измерения магнитоупругости в работах [7, 8] проводились при комнатной температуре, а расчеты выполнены при 0 К. В работе [15] значение $\Delta V/V$ для Ni при температурах, близких к 0 К, составляет порядка $-12 \cdot 10^{-4}$; при увеличении температуры постоянная объемной магнитоупругости уменьшается. Согласно данным, по-

лученным в работе [16], объемная магнитострикция для сплавов Ni-Mn-Ga при комнатной температуре составляет $-198 \cdot 10^{-4}$. Таким образом, рассчитанные в данной работе значения объемной магнитострикции для сплавов Fe-Ga, согласуются с результатами, полученными для других соединений.

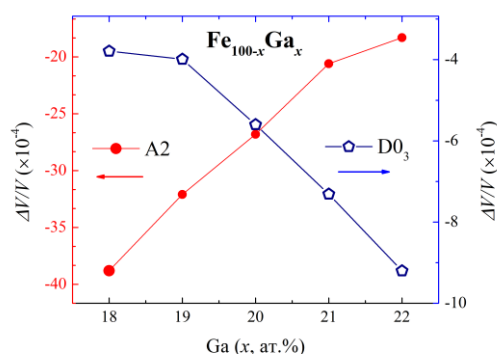


Рис. 2. Концентрационные зависимости объемной магнитострикции кристаллических структур A2 (левая ось) и D0₃ (правая ось) сплавов Fe_{100-x}Ga_x

Заключение

В данной работе из первых принципов проведено исследование зависимости объемной магнитострикции от концентрации Ga в сплавах Fe_{100-x}Ga_x (x = 18 – 22 ат. %). Рассмотрены две кристаллические структуры кубической симметрии A2 и D0₃, наблюдаемые экспериментально в указанном диапазоне концентраций. При температуре 0 К рассчитаны параметры обменного взаимодействия в зависимости от параметра решеток. Из них определена объемная магнитоупругая постоянная. Показано, что величина констант магнитного обменного взаимодействия J_{ij} и объемной магнитоупругой постоянной B_0 возрастает с содержанием Ga для структуры A2 и уменьшается для структуры D0₃. Получена композиционная зависимость объемной магнитострикции $\Delta V/V$. Показано, что теоретические значения объемной магнитострикции по абсолютной величине на два порядка выше, чем экспериментально измеренные в поликристаллических образцах в сильном магнитном поле. Различие между экспериментальными данными и полученными в данной работе результатами может быть объяснено тем, что измерения магнитострикции проводились при комнатной температуре, а расчеты выполнены при 0 К. Значения объемной магнитострикции для сплавов Fe-Ga согласуются с результатами для других соединений.

Работа выполнена при поддержке гранта № 17-72-20022 Российского Научного Фонда (разделы 1 и 2), М. Загребин выражает благодарность Фонду поддержки молодых ученых Челябинского государственного университета.

Литература

1. Buschow, K.H.J. (ed.) Handbook of Magnetic Materials / K.H.J. Buschow (ed.). – North Holland, 2012. – Vol. 20. – 380 p.
2. Clark, A.E. Extraordinary magnetoelasticity and lattice softening in bcc Fe-Ga alloys / A.E. Clark, K.B. Hathaway, M. Wun-Fogle *et al.* // J. of Applied Physics. – 2003. – Vol. 93, Iss. 10. – P. 8621–8623.
3. Srisukhumbowornchai, N. Large magnetostriction in directionally solidified FeGa and FeGaAl alloys / N. Srisukhumbowornchai, S. Guruswamy // J. of Applied Physics. – 2001. – Vol. 90, Iss. 11. – P. 5680–5688.
4. Xing, Q. Structural investigations of Fe-Ga alloys: Phase relations and magnetostrictive behavior / Q. Xing, Y. Du, R.J. McQueeney, T.A. Lograsso // Acta Materialia. – 2008. – Vol. 56, Iss. 16. – P. 4536–4546.
5. Wu, R. Origin of large magnetostriction in Fe-Ga alloys / R. Wu // J. of Applied Physics. – 2002. – Vol. 91, Iss. 10. – P. 7358–7360.
6. Wang, H. Understanding strong magnetostriction in Fe_{100-x}Ga_x alloys / H. Wang, Y.N. Zhang, R.Q. Wu *et al.* // Scientific Reports. – 2013. – Vol. 3. – P. 03521.

7. Gao, F. Volume magnetostriction of $\text{Fe}_{81}(\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_x)_{19}$ alloys / F. Gao, Ch. Jiang, J. Liu, H. Xu // *J. of Applied Physics*. – 2006. – Vol. 100, Iss. 12. – P. 123916.
8. Bormio-Nunes, C. Volume magnetostriction and structure of copper mold-cast polycrystalline Fe-Ga alloys / C. Bormio-Nunes, M.A. Tirelli, R. Sato Turtelli *et al.* // *J. of Applied Physics*. – 2005. – Vol. 97, Iss. 3. – P. 033901.
9. Zhang, Y. First principles determination of the rhombohedral magnetostriction of $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$ and $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ alloys / Y. Zhang, H. Wang, R. Wu // *Physical Review B*. – 2012. – Vol. 86, Iss. 22. – P. 224410.
10. Wang, H. Ab initio studies of the effect of nanoclusters on magnetostriction of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ alloys / H. Wang, Y.N. Zhang, T. Yang, Z.D. Zhang, L.Z. Sun, R. Q. Wu // *Applied Physics Letters*. – 2010. – Vol. 97, Iss. 26. – P. 262505
11. Матюнина, М.В. Моделирование ромбоэдрической магнитострикции в сплавах Fe-Ga / М.В. Матюнина, М.А. Загребин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование»*. – 2019. – Т. 12, № 2. – С. 158–165.
12. Chikazumi, S. *Physics of Ferromagnetism* / S. Chikazumi. – New York, Oxford University Press, 1997. – 672 p.
13. Ebert, H. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method—recent developments and applications / H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár // *Reports on Progress in Physics*. – 2011. – Vol. 74, no. 9. – P. 096501.
14. Perdew, J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865–3868.
15. Tremolet de Lacheisserie *Magnetism*, E.W. (Ed.) *Magnetism* / E.W. Tremolet de Lacheisserie (Ed.), D. Gignoux (Ed.), M. Schlenker (Ed.). – Springer-Verlag New York, 2005. – 518 p.
16. Khovaylo, V.V. Phase transitions in $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$ with a high Ni excess / V.V. Khovaylo, V.D. Buchelnikov, R. Kainuma, V.V. Koledov, M. Ohtsuka, V.G. Shavrov, T. Takagi, S.V. Taskaev, A.N. Vasiliev // *Physical Review B*. – 2005. – Vol. 72, Iss. 22. – P. 224408.

Поступила в редакцию 16 марта 2020 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2020, vol. 12, no. 2, pp. 57–62

DOI: 10.14529/mmph200207

VOLUME MAGNETOSTRICTION OF FE-GA ALLOYS: CALCULATION FROM FIRST PRINCIPLES

M.V. Matyunina¹, V.D. Buchelnikov^{1,2}, M.A. Zagrebina^{1,3}, V.V. Sokolovskiy^{1,2}

¹Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation

²National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russian Federation

³South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: matunins.fam@mail.ru

In this paper, with the help of the density functional theory, the magnetic and magnetoelastic properties of the crystal structures A2 and D0₃ of $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ alloys ($x = 18\text{--}22$ at.%) have been studied. The calculations were performed using the SPR-KKR software package. The exchange integrals, the values of the volume magnetoelastic constant B_0 , and the volume magnetostriction $\Delta V/V$ have been calculated. The obtained dependence of the exchange interaction constants on the crystal lattice parameter is a decreasing function for both A2 and D0₃ structures. It has been shown that the ferromagnetic interaction between iron atoms in the first coordination sphere increases with increasing Ga concentration in the fully disordered A2 phase, while this interaction weakens in the ordered crystal structure D0₃. The obtained values of $\Delta V/V$ for various compositions of $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ alloys are negative. It is shown that an increase in the Ga content leads to an increase in volume magnetostriction for the A2 structure and a decrease in $\Delta V/V$ for the D0₃ phase. The character of the volume magnetostriction dependence on the concentration of Ga for structure A2 is consistent with the experimental data and with the results obtained for compounds based on Ni.

Keywords: Fe-Ga; exchange interaction; volume magnetostriction; first principles calculations.

References

1. Buschow K.H.J. (ed.) *Handbook of Magnetic Materials*. Vol. 20, North Holland, 2012, 380 p.
2. Clark A.E., Hathaway K.B., Wun-Fogle M., Restorff J.B., Lograsso T.A., Keppens V.M., Petculescu G., Taylor R.A. Extraordinary magnetoelasticity and lattice softening in bcc Fe-Ga alloys. *Journal of Applied Physics*, 2003, Vol. 93, Iss. 10, pp. 8621–8623. DOI:10.1063/1.1540130
3. Srisukhumbowornchai N., Guruswamy S. Large magnetostriction in directionally solidified Fe-Ga and Fe-Ga-Al alloys. *Journal of Applied Physics*, 2001, Vol. 90, Iss. 11, pp. 5680–5688. DOI:10.1063/1.1412840
4. Xing Q., Du Y., McQueeney R.J., Lograsso T.A. Structural investigations of Fe-Ga alloys: Phase relations and magnetostrictive behavior. *Acta Materialia*, 2008, Vol. 56, Iss. 16, pp. 4536–4546. DOI:10.1016/j.actamat.2008.05.011
5. Wu, R. Origin of large magnetostriction in Fe-Ga alloys. *Journal of Applied Physics*, 2002, Vol. 91, Iss. 10, pp. 7358–7360. DOI: 10.1063/1.1450791
6. Wang H. Zhang Y.N., Wu R.Q., Sun L.Z., Xu D.S., Zhang Z.D. Understanding strong magnetostriction in $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ alloys. *Scientific Reports*, 2013, Vol. 3, pp. 03521. DOI:10.1038/srep03521
7. Gao F., Jiang Ch., Liu J., Xu H. Volume magnetostriction of $\text{Fe}_{81}(\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_x)_{19}$ alloys. *Journal of Applied Physics*, 2006, Vol. 100, Iss. 12, pp. 123916. DOI:10.1063/1.2401310
8. Bormio-Nunes C., Tirelli M.A., Turtelli R.S., Grössinger R., Müller H., Wiesinger G., Sassik H., Reissner M. Volume magnetostriction and structure of copper mold-cast polycrystalline Fe-Ga alloys. *Journal of Applied Physics*, 2005, Vol. 97, Iss. 3, pp. 033901. DOI:10.1063/1.1834692
9. Zhang Y., Wang H., Wu R. First principles determination of the rhombohedral magnetostriction of $\text{Fe}_{100-x}\text{Al}_x$ and $\text{Fe}_{100-x}\text{Ga}_x$ alloys. *Phys. Rev. B.*, 2012, Vol. 86, Iss. 22, pp. 224410. DOI:10.1103/PhysRevB.86.224410
10. Wang H., Zhang Y.N., Yang T., Zhang Z.D., Sun L.Z., and Wu R.Q. *Ab initio* studies of the effect of nanoclusters on magnetostriction of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ alloys. *Applied Physics Letters*, 2010, Vol. 97, Iss. 26, pp. 262505. DOI:10.1063/1.3533659
11. Matyunina M.V., Zagrebina M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Modelling of rhombohedral magnetostriction in Fe–Ga alloys. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2019, Vol. 12, no. 2, pp. 158–165. DOI: 10.14529/mmp190214
12. Chikazumi S. *Physics of Ferromagnetism*. New York, Oxford University Press, 1997, 672 p.
13. Ebert H., Ködderitzsch D., Minár J. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method—recent developments and applications. *Reports on Progress in Physics*, 2011, Vol. 74, no. 9, pp. 096501. DOI: 10.1088/0034-4885/74/9/096501
14. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, pp. 3865–3868. DOI:10.1103/PhysRevLett.77.3865
15. Tremolet de Lacheisserie E.W. (Ed.), Gignoux D. (Ed.), Schlenker M. (Ed.) *Magnetism*. Springer-Verlag New York, 2005, 518 p. DOI: 10.1007/978-0-387-23063-4
16. Khovaylo 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, Vol 72, Iss. 22, pp. 224408. DOI:10.1103/PhysRevB.72.224408

Received March 16, 2020