

PACS numbers: 61.50.Lt, 71.15.Ap, 71.15.Mb, 71.15.Nc, 75.10.Lp, 75.76.+j, 78.70.En

Распределение атомов по кристаллографическим позициям и электронное строение сплава Гейслера CoTiSb

В. Н. Уваров, Н. В. Уваров, С. А. Беспалов*

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев, Украина
*Президиум НАН Украины,
ул. Владимирская, 54,
01601 Киев-30, Украина*

С помощью зонных расчётов в LAPW-приближении выяснена роль взаимных атомных замещений в формировании энергетических, спектральных и спиновых характеристик сплава CoTiSb. Обнаружено, что его основное состояние (с наибольшим значением когезионной энергии) реализуется в случае расположения атомов кобальта в кристаллографических позициях (4c) с тетраэдрическим атомным окружением, а их замена титаном или сурьмой способствует возникновению энергетически высоко-возбужденных метастабильных фаз. Обнаружено, что взаимный обмен атомами между позициями, формирующими подрешётку типа NaCl, не приводит к изменениям в энергетических характеристиках и в электронном строении сплава CoTiSb; он в основном состоянии является немагнитным изолятором, метастабильные фазы превращаются в металлы со спин-поляризованными электронными состояниями и ферромагнитным типом упорядочения магнитных моментов атомов в подрешётках кобальта и титана.

Ключевые слова: зонные расчёты, сплавы Гейслера, электронное строе-

Corresponding author: Viktor Nikolaevich Uvarov
E-mail: uvarov@imp.kiev.ua

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03680 Kyiv, Ukraine
Presidium of the N.A.S. of Ukraine, 54 Volodymyrs'ka Str., UA-01030 Kyiv, Ukraine

Please cite this article as: V. N. Uvarov, N. V. Uvarov, and S. A. Bepalov, Allocation of Atoms on Crystallographic Positions and an Electronic Structure of the Heusler CoTiSb Alloy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **38**, No. 3: 305–317 (2016) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.38.03.0305.

ние, магнитные моменты, поляризованные электронные состояния, рентгеноэлектронные спектры, спинтроника.

За допомогою зонних розрахунків у LAPW-наближенні з'ясовано роль взаємних атомових заміщень у формуванні енергетичних, спектральних і спинових характеристик стопу CoTiSb. Виявлено, що його основний стан (з найбільшим значенням когезійної енергії) реалізується у разі розташування атомів Кобальту в кристалографічних позиціях (4c) з тетраедричним атомовим оточенням, а їхня заміна Титаном або Стийбієм сприяє виникненню енергетично високозбуджених метастабільних фаз. Виявлено, що взаємний обмін атомами між позиціями, які формують підґратницю типу NaCl, не приводить до змін в енергетичних характеристиках і в електронній будові стопу CoTiSb; він в основному стані є немагнітним ізолятором, метастабільні фази перетворюються у металічні зі спін-поляризованими електронними станами та ферімагнітним типом упорядкування магнітних моментів атомів у підґратницях Кобальту та Титану.

Ключові слова: зонні розрахунки, Гейслерові стопи, електронна будова, магнітні моменти, поляризовані електронні стани, рентгеноелектронні спектри, спинтроніка.

The role of mutual atomic replacements in the formation of the energy, spectral and spin characteristics of the CoTiSb alloy is explored using the band structure calculations within the LAPW approximation. As found, the ground state (with the largest cohesive energy) is realized in the case of the arrangement of cobalt atoms in the crystallographic positions (4c) with tetrahedral atomic surroundings, and their replacement with titanium or antimony contributes to the energy of highly metastable phases. As revealed, the interchangement between the atomic positions, which form sublattice of NaCl type, does not lead to changes in the energy characteristics and the electronic structure of the CoTiSb alloy; the ground state is a nonmagnetic insulator, the metastable phases are converted into metallic ones with spin-polarized electron states and the ferrimagnetic type ordering of the magnetic moments of the atoms in cobalt and titanium sublattices.

Key words: band calculations, Heusler alloys, electronic structure, magnetic moments, polarized electron states, X-ray spectra, spintronics.

(Получено 23 ноября 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Сплав CoTiSb впервые синтезирован довольно давно [1] и входит в класс хорошо известных половинных фаз Гейслера (half-Heusler compound). Последние обладают целым комплексом магнитных, кинетических, оптических, магнитооптических, сверхпроводящих и других важных свойств [2]. Среди них обнаружены антиферромагнетики, парамагнетики, ферримагнетики и ферромагнитно упорядоченные соединения.

В зависимости от атомного состава, пространственной структуры, характера атомного упорядочения в этих фазах в широких пределах (от нуля до нескольких электрон-вольт) изменяется ширина запрещённой зоны, отделяющей их валентные и свободные электронные состояния. Варьирование указанных характеристик открывает широкие возможности по управляемому синтезу различных материалов с металлическими, полупроводниковыми свойствами, свойствами изоляторов, в том числе и топологических [2]. Следуя этим путём, в системе обсуждаемых соединений удаётся реализовать так называемое полуметаллическое (half-metallic) состояние с нескомпенсированной спиновой плотностью зонных электронов на уровне Ферми — важным свойством, необходимым при создании материалов для устройств спинтроники.

Сам сплав CoTiSb и твёрдые растворы на его основе обладают уникальными термоэлектрическими, резистивными, оптическими и иными свойствами [2–5]. Базовый состав CoTiSb на сегодняшний день является фактически модельным соединением — удобным объектом применения и развития различного рода методик по определению, оптических, механических, транспортных свойств, по расчётам пространственного и электронного строения соединений [4].

В частности, ввиду устоявшихся представлений о его пространственной структуре, он может оказаться полезным при исследовании роли процессов взаимных атомных замещений в кристаллической решётке в формировании свойств половинных сплавов Гейслера. Задачи по рассмотрению взаимосвязей атомных разупорядочений со свойствами этих сплавов рассмотрены в серии работ [см., например, 2, 6–9]. Что касается сплава CoTiSb, то в этих публикациях содержатся лишь отрывочные сведения о том, что некоторые взаимные замещения атомов в нём переводят его из полуметаллического (явно ошибочное утверждение, по крайней мере, для температур, превышающих 113 К [3, 10]) немагнитного в металлическое состояние [6]. Слабо обоснованными оказываются и указания [9] о влиянии возможных атомных разупорядочений на резистивные и термоэлектрические характеристики этого сплава, подвергнутого термообработке в различных условиях.

В настоящей работе с помощью зонных расчётов на примере сплава CoTiSb решается частная модельная задача по выяснению роли определённых (см. ниже) взаимных атомных замещений в формировании энергетических, спектральных и спиновых характеристик соответствующих им фаз.

2. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЁТОВ

В работе проведены зонные расчёты электронного строения соединения CoTiSb в шести его структурных модификациях, отличаю-

щихся расположением атомов в кристаллической решётке, относящейся к кубической сингонии с симметрией $F-43m$ (пространственная группа № 216). Данные о распределении атомов по вайскопфовским позициям в их решётках приведены в табл. 1. Координаты атомов заданы здесь в долях рёбер элементарной ячейки CoTiSb. Экспериментально реализуемая конфигурация соответствует $K = 1$ [10, 11], а оставшиеся отличаются от неё «перемешиванием» атомов (тут K — номер пространственной конфигурации). Отметим, что позиции $4a$ и $4b$ формируют решётку типа NaCl, тогда как $4a$ и $4c$ — структуру цинковой обманки [2].

Зонные расчёты выполнены в LAPW-приближении [12] с градиентной аппроксимацией электронной плотности (GGA — generalized gradient approximation) в форме [13]. Для расчёта характеристик электронной структуры использован спин-поляризованный вариант LAPW-метода [14]. Поскольку в литературе отсутствует информация о значениях параметров a кубических решёток модификаций с $K \neq 1$, то они рассчитаны с использованием процедуры минимизации пространственной структуры [14] всех упомянутых соединений состава CoTiSb. Структура соединения в исходном состоянии ($K = 1$) также была оптимизирована и полученный для неё параметр a , с целью единого подхода в расчётах, также был использован при их проведении.

Соответствующие данные приведены в табл. 2. Отметим, что оптимизированное значение параметра a для конфигурации $K = 1$ отличается от экспериментально измеренного [10] всего на 0,18%.

Радиусы МТ (muffin-tin) атомных сфер выбирались из соображения минимизации размеров межсферной области Π в модификации

ТАБЛИЦА 1. Распределение атомов по позициям (Π) $4a$ (0,0, 0,0, 0,0), $4b$ (0,5, 0,5, 0,5), $4c$ (0,25, 0,25, 0,25) в кристаллической решётке соединения CoTiSb. K — номер пространственной конфигурации.

TABLE 1. The distribution of atoms at positions (Π) $4a$ (0.0, 0.0, 0.0), $4b$ (0.5, 0.5, 0.5), $4c$ (0.25, 0.25, 0.25) in the crystal lattice of CoTiSb compound. K is the number of the spatial configuration.

Π K	$4a$	$4b$	$4c$
1	Sb	Ti	Co
2	Ti	Sb	Co
3	Co	Sb	Ti
4	Sb	Co	Ti
5	Ti	Co	Sb
6	Co	Ti	Sb

ТАБЛИЦА 2. Оптимизированные значения параметра a элементарных ячеек соединения CoTiSb.

TABLE 2. The optimized values of the parameter a for CoTiSb unit cells.

K	1	2	3	4	5	6
$a, \text{Å}$	5,8934 5,8825*	5,8934	6,1553	6,1533	6,0818	6,0838

* Эксперимент [10].

$K = 1$, обладающей наименьшим объёмом элементарной ячейки. Для всех пространственных конфигураций и всех атомов эти радиусы составили 2,18 Бора (1 Бор = $5,2918 \cdot 10^{-11}$ м). При расчётах характеристик электронного строения всех структурных модификаций соединения CoTiSb использовалось 120 точек в неприводимых частях их зон Бриллюэна. Для аппроксимации волновых функций $3d$ -электронов всех атомов использованы APW+lo-базисы, для волновых функций остальных валентных электронов базисы LAPW. Произведение радиуса МТ-сферы (R_{mt}) и максимального значения волнового вектора плоских волн (K_{max}) выбрано равным семи, а максимальные значения квантового числа $l = 10$ для парциальных волн внутри сфер и $l = 4$ в вычислениях non-muffin-tin матричных элементов.

Значения когезионных энергий вычислялись в виде разностей полных энергий элементарных ячеек фаз CoTiSb и сумм полных энергий составляющих их атомов, удалённых друг от друга на «бесконечность». Последние определялись согласно рекомендациям [15].

Степень поляризации (P) фермиевских электронов определялась по формуле [16]:

$$P = \frac{D_{\uparrow}(E_F) - D_{\downarrow}(E_F)}{D_{\uparrow}(E_F) + D_{\downarrow}(E_F)},$$

где $D_{\uparrow}(E_F)$ и $D_{\downarrow}(E_F)$ — полные плотности электронных состояний на уровне Ферми (E_F) с направлениями спинов соответственно вверх и вниз. По этой же формуле определялась и поляризация электронных состояний атомов титана и кобальта.

3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как видно из результатов, приведённых на рис. 1, в системе шести упомянутых пространственных конфигураций реализуется тройка с существенно различными значениями когезионных энергий. Определяющим фактором таких отличий является наличие того или иного сорта атомов соединения CoTiSb в его структурной пози-

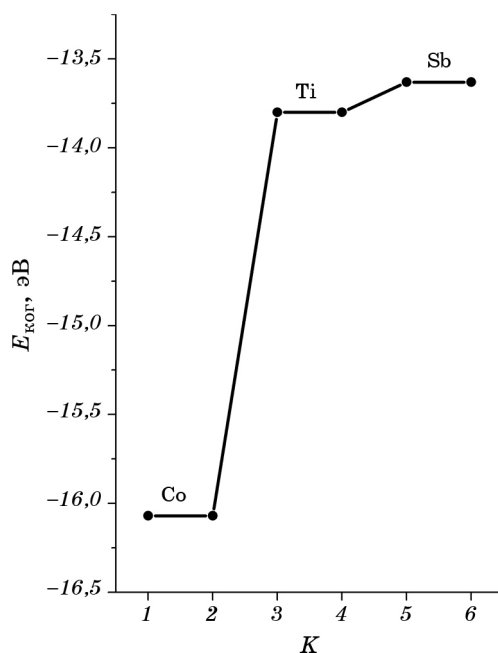


Рис. 1. Зависимость когезионной энергии ($E_{\text{кор}}$) соединения CoTiSb от типа атомной конфигурации (K). Для удобства на графике приведены названия элементов, находящихся в позициях 4с.

Fig. 1. Dependence of the cohesive energy (E_{coh}) for CoTiSb compounds on the type of atomic configuration (K). For the convenience, the names of elements in the positions 4с are indicated at the chart.

ции 4с, являющейся одной из образующих ковалентную подрешётку типа цинковой обманки [2]. В то же самое время в каждом конкретном случае (с фиксацией определённого вида атомов в октопоре 4с) взаимная перестановка разнородных атомов в позициях 4а и 4b, формирующих ионную подрешётку типа NaCl, не приводит к отличиям в значениях когезионных энергий соединений CoTiSb. Последнее обстоятельство, конечно же, обусловлено неизменностью взаимного окружения атомов в процессе перестановки атомов в позициях решётки типа NaCl.

Наиболее устойчивой фазой соединения, как следует из обсуждаемого рисунка, действительно являются конфигурации с атомом кобальта в позиции 4с. Конфигурации с атомами титана или сурьмы в упомянутом положении предположительно являются метастабильными — их когезионные энергии превышают энергию основного состояния соответственно на 2,27 эВ и 2,34 эВ. Их метастабильность проявляется также и в росте параметров a их кубических ячеек, приведённых в табл. 2.

Изменения в позициях расположения атомов отображаются и на других характеристиках электронного строения соединения CoTiSb. Как оказалось, перестановки атомов в подрешётке типа NaCl не изменяют зонную структуру $E(\mathbf{k})$ и энергетические распределения полных и парциальных электронных состояний исследуемого соединения. Существенные различия в строении указанных характеристик наблюдаются для модификаций с изменяющимся атомным составом позиций 4с. Конкретный пример таких изменений продемонстрирован на рис. 2. Здесь приведён фотоэлектронный спектр соединения CoTiSb, совмещённый пиком с с соответствующим компонентом в полной плотности электронных состояний, полученной для модификации $K = 1$.

Указанная процедура совмещения фотоэлектронных спектров с полной плотностью электронных состояний по их характерным пикам является общепринятой (см., например, [17, 18]). Часто наблюдаемые рассогласования в положениях уровня Ферми, определённого экспериментально и с помощью зонных расчётов, обусловлены тем, что в первом случае отображаются возбуждённые состояния (вакансия в конечном состоянии процесса фотоионизации), тогда как расчёт связан с основным состоянием соединений и даёт заниженные значения энергий уровня Ферми. В нашем конкретном случае указанный сдвиг в положениях уровней Ферми составил 1,19 эВ. Что касается распределений остальных электронных плотностей для модификаций $K = 3, 6$, то они совмещены с предыдущей своими уровнями Ферми.

Из обсуждаемого рисунка следует, что в наибольшей степени эксперименту соответствует энергетическое распределение валентных электронов, характерное для атомной конфигурации с атомом кобальта в его октаэдрическом окружении. Здесь энергетически совпадают пиковые значения интенсивностей в фотоэлектронном спектре c , d , e с аналогичными пиками в распределении плотностей электронных состояний. Положение ярких компонентов a и b экспериментального спектра в свою очередь в плотности состояний отображается соответствующими наплывами. Расчёты также указали на немагнитный характер (см. ниже) фазы $K = 1$, как и на существование в ней непрямой (точки Γ и X в зоне Бриллюэна) минимальной энергетической щели величиной в 1,09 эВ, отделяющей занятые и свободные электронные состояния друг от друга. По данным других зонных расчётов значения упомянутой щели располагаются в интервале от 0,95 эВ [3, 19] до 1,06 эВ [4]. Оптические измерения [4] прямой энергетической щели в точке Γ зоны Бриллюэна привели к величине 1,8 эВ, что находится в очень хорошем согласии с полученным в настоящей работе её значением в 1,85 эВ.

Обнаруженное соответствие результатов расчётов и экспериментов указывает, во-первых, на правильность предложенной модели

расчётов; во-вторых, на то, что основное состояние исследуемого соединения действительно реализуется в схеме с атомом кобальта в октаэдрической позиции $4c$ его кристаллической решётки и, наконец, в-третьих, процедура поиска атомных конфигурации основного состояния с помощью зонных расчётов может оказаться полезной в исследованиях пространственного строения атомно разупорядоченных соединений.

Как и следовало ожидать энергетические распределения полных плотностей состояний валентных электронов для конфигураций с атомами титана и сурьмы в позиции $4c$ существенно отличаются

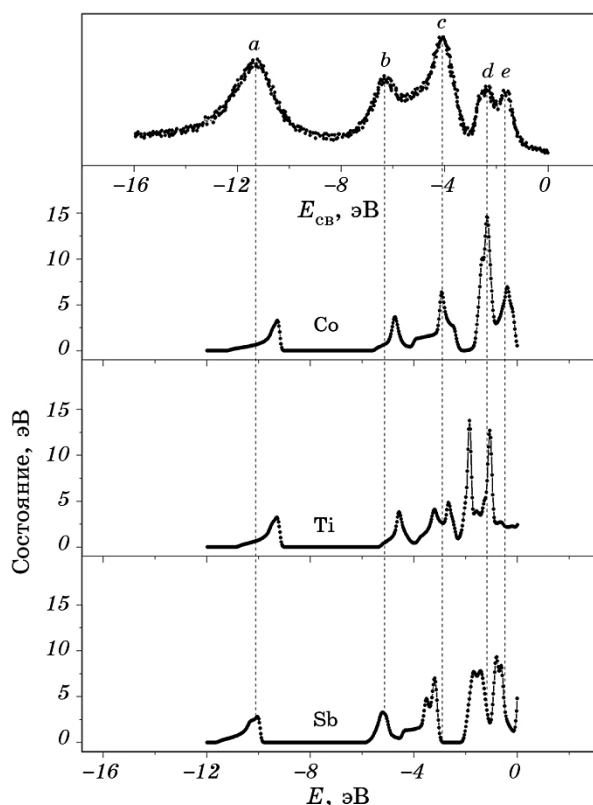


Рис. 2. Фотоэлектронный спектр (верхняя панель) [4] сплава CoTiSb и его полные плотности валентных электронов в структурных модификациях с различными элементами (указаны на рисунке) в позициях $4c$. Нулевые значения энергий соответствуют положению уровня Ферми.

Fig. 2. Photoelectron spectrum (top panel) [4] for CoTiSb alloy and its total valence electron density in various structural modifications of the elements (indicated in this Figure) at positions $4c$. Zero energy values correspond to the position of the Fermi level.

(рис. 2) от предыдущей конфигурации с атомом кобальта. Рассогласование проявляется не только в энергетических положениях основных компонентов плотностей, их форме, но и в их наличии непосредственно на уровне Ферми. Действительно, если конфигурации $K = 1, 2$ являются изоляторами с нулевой плотностью валентных электронов на уровне Ферми, то две другие превращаются в металлы с упомянутой плотностью 25,90 сост./Ru и 95,69 сост./Ru соответственно для фаз с титаном и сурьмой в позиции 4с.

Отмеченные изменения в характере распределения электронных плотностей сопровождаются их спиновой поляризацией. Детальный анализ показывает, что в наибольшей степени поляризованными оказываются $3d$ -состояния атомов титана и кобальта. Как следствие, это обеспечивает возникновение магнитных моментов на структурных фрагментах кристаллической решётки соединения CoTiSb, что в наглядной форме продемонстрировано на рис. 3. Здесь приведены рассчитанные зависимости магнитных моментов, приходящихся как на МТ-сферы отдельных атомов, их межсферные области, так и в целом на примитивные ячейки исследуемого соединения в его различных атомных конфигурациях.

Из этого рисунка видно, что конфигурации основного состояния с $K = 1, 2$, действительно [19] являются немагнитными, переход же к метастабильным фазам ($K \geq 3$) заметным образом отражается на магнитных характеристиках CoTiSb. Особенно сильно изменяются магнитные моменты на атомах кобальта, переходя от положительных своих значений в фазах $K = 3, 4$ с атомом титана в позиции 4с к отрицательным величинам для конфигураций $K = 5, 6$ с сурьмой в этом положении. Вариации магнитных моментов на атомах титана менее значительны и по знаку своих значений прямо противоположны таковым для атомов кобальта. Что касается атомов сурьмы, то значения возникающих на них магнитных моментов невелики, а их знаки при переходе между фазами изменяется симбатно со знаками магнитных моментов на кобальте.

Отмеченные особенности позволяют сделать вывод о том, что в метастабильных фазах соединения CoTiSb в основном реализуется ферромагнитное упорядочение атомных магнитных моментов, наиболее ярко проявляемое в металлических подрешётках. Суммарные значения магнитных моментов всех фрагментов кристаллических решёток метастабильных фаз приводят к положительным величинам магнитных моментов примитивных ячеек соединения CoTiSb. Для фаз с атомами сурьмы в кристаллографической позиции 4с положительность этих магнитных моментов достигается за счёт электронных состояний, принадлежащих атомам титана и межсферным областям Int. Что касается последних, то они фактически оказываются сформированными хвостами волновых функций атомов титана в области Int. Об этом свидетельствует «параллельный» ход кривых,

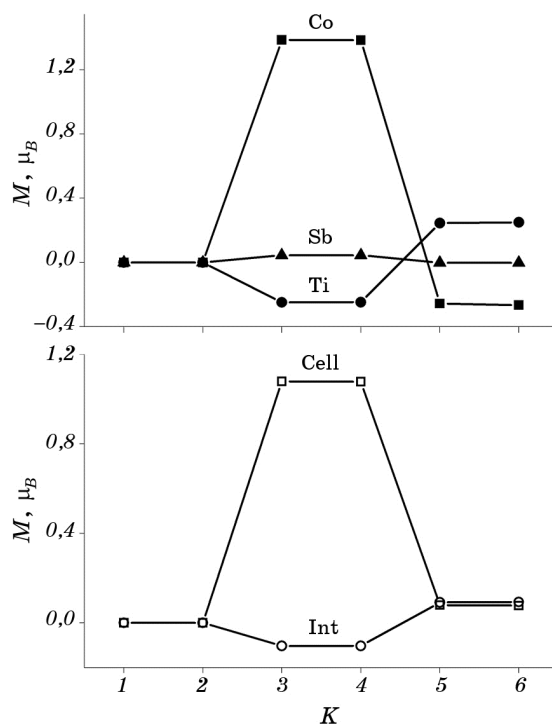


Рис. 3. Магнитные моменты (μ_B — магнетон Бора) в атомных МТ-сферах (верхняя панель), в области между ними (Int) и примитивной ячейке (Cell) соединения CoTiSb в его различных пространственных модификациях (K).

Fig. 3. Magnetic moments (μ_B —Bohr magneton) in the atomic MT-spheres (top panel), in the interstitial region (Int), and in the unit cell (Cell) for CoTiSb compound in its various spatial modifications (K).

обозначенных символами «Ti» и «Int» на рис. 3. Понятно также, что превалирование электронных состояний атомов титана в межсферной области обусловлено их большей пространственной делокализацией — реакцией на меньший в сравнении с другими атомами заряд его ядра.

Как уже упоминалось, степень поляризации электронных состояний на уровне Ферми является важной характеристикой применимости материалов в устройствах спинтроники. В связи с этим представляется полезным рассмотрение вопроса о влиянии на неё взаимных атомных замещений на примере изучаемого сплава CoTiSb. Соответствующая информация представлена на рис. 4. Видно, что поляризационные эффекты электронов в существенной мере зависят от сорта атомов, располагающихся в позиции 4с кристаллической решётки сплава CoTiSb. Поляризация состояний отсутствует в конфигурациях $K = 1, 2$, когда кобальт занимает упомя-

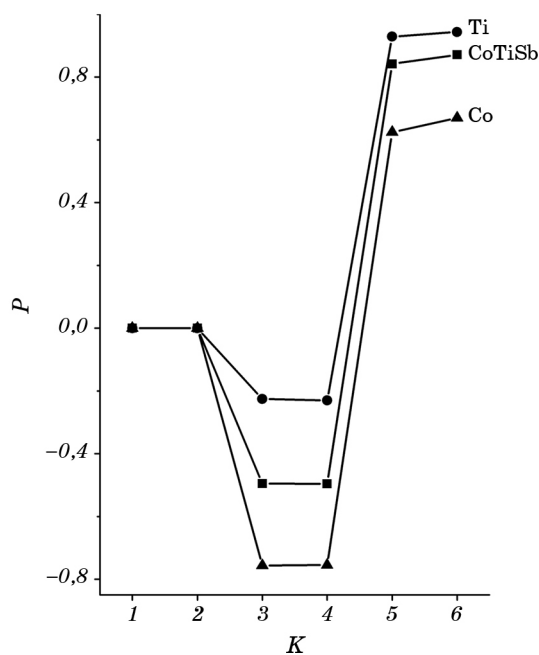


Рис. 4. Поляризация (P) фермиевских электронов сплава CoTiSb и входящих в его состав атомов металлов (Ti, Co).

Fig. 4. Polarization (P) of the Fermi electrons for CoTiSb alloy and its constituent metal atoms (Ti, Co).

нутое положение в решётке. Для атомных конфигураций с атомами титана и сурьмы в этой кристаллографической позиции поляризационные эффекты в полных электронных плотностях проявляются как в самом соединении CoTiSb, так и в его атомах титана и кобальта. Причём в наибольшей степени полуметаллический характер сплава CoTiSb проявляется в фазах ($K = 5, 6$) с сурьмой в атомной позиции $4c$.

4. ВЫВОДЫ

1. Основное состояние сплава CoTiSb с наибольшим значением когезионной энергии реализуется в случае присутствия атомов кобальта в положениях тетраэдрического атомного окружения (позиция $4c$). Замена кобальта атомами титана или сурьмы способствует возникновению энергетически высоковозбужденных метастабильных состояний соединения CoTiSb. Взаимный обмен атомами между позициями, формирующими его подрешётку типа NaCl, не приводит к изменениям в энергетических характеристиках и в элек-

тронном строении сплава CoTiSb.

2. Соединение CoTiSb в основном состоянии является немагнитным изолятором, метастабильные фазы превращаются в металлы со спин-поляризованными электронными состояниями и ферромагнитным типом упорядочения магнитных моментов атомов в подрешётках кобальта и титана. Значения возникающих на атомах сурьмы магнитных моментов невелики, а их знаки при переходе между фазами изменяются схожим образом со знаками магнитных моментов на кобальте.

3. Поляризация фермиевских электронов сплава CoTiSb и его металлических компонентов определяется сортом атомов, располагающихся в позициях 4с. Она отсутствует в фазах с кобальтом и существенно возрастает в решётках с титаном и сурьмой в упомянутом атомном положении. В наибольшей степени полуметаллический характер сплава CoTiSb проявляется в фазах с атомами сурьмы, располагающимися в кристаллографических позициях 4с.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Р. І. Крип'якевич і В. Я. Марків, *Доп. Акад. наук УРСР*, № 7: 1606 (1963).
2. T. Graf, C. Felser and Stuart S. P. Parkin, *Prog. Solid State Chem.*, **39**: 1 (2011).
3. Y. Xia, V. Ponnambalam, S. Bhattacharya, A. L. Pope, S. J. Poon, and T. M. Tritt, *J. Phys.: Condens. Matter*, **13**: 77 (2001).
4. S. Ouardi, *Electronic Structure and Physical Properties of Heusler Compounds for Thermoelectric and Spintronic Applications* (Thesis of Dissert.) (Mainz: 2012).
5. Y. Kawaharada, K. Kurosaki, H. Muta, M. Uno, and Sh. Yamanaka, *J. Alloys Compd.*, **381**: 308 (2004).
6. S. Ishida, T. Masaki, S. Fujii, and S. Asano, *Physica B*, **239**: 163 (1997).
7. J. Tobola, L. Jodin, P. Pecher, and G. Venturini, *J. Alloys Compd.*, **383**: 328 (2004).
8. P. Larson, S. D. Mahanti, and M. G. Kanatzidis, *Phys. Rev. B*, **62**: 12754 (2000).
9. T. Sekimoto, K. Kurosaki, H. Muta, and Sh. Yamanaka, *J. Alloys Compd.*, **394**: 122 (2005).
10. I. Skovsen, L. Bjerg, M. Christensen, E. Nishibori, B. Balke, C. Felser, and B. B. Iversen, *Dalton Trans.*, **39**: 10154 (2010).
11. G. E. Bacon and J. S. Plant, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **1**: 524 (1971).
12. D. Singh, *Plane Waves, Pseudopotentials and LAPW Method* (Boston: Kluwer Academic: 1994).
13. J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996).
14. P. Blaha, K. Schwarz, G. K. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Wien, Austria: Techn. Universität Wien: 2001).
15. http://www.wien2k.at/reg_user/faq/
16. B. R. K. Nanda, and I. Dasgupta, *J. Phys.: Condens. Matter*, **15**: 7307 (2003).
17. В. Н. Уваров, И. В. Урубков, Е. В. Урубкова, В. В. Климов, О. Ю. Хижун, В. В. Трачевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, спец. вып.: 145

- (2011).
18. В. М. Уваров, М. П. Мельник, М. В. Уваров, В. С. Михаленков, Т. Л. Сизова, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 2: 279 (2013).
 19. J. Tobola, J. Pierre, S. Kaprzyk, R. V. Skolozdra, and M. A. Kouacou, *J. Phys.: Condens. Matter*, **10**: 1013 (1998).

REFERENCES

1. P. I. Круг'якевич and V. Ya. Markiv, *Dop. Akad. Nauk USSR*, No. 7: 1606 (1963) (in Ukrainian).
2. T. Graf, C. Felser and Stuart S. P. Parkin, *Prog. Solid State Chem.*, **39**: 1 (2011).
3. Y. Xia, V. Ponnambalam, S. Bhattacharya, A. L. Pope, S. J. Poon, and T. M. Tritt, *J. Phys.: Condens. Matter*, **13**: 77 (2001).
4. S. Ouardi, *Electronic Structure and Physical Properties of Heusler Compounds for Thermoelectric and Spintronic Applications* (Thesis of Dissert.) (Mainz: 2012).
5. Y. Kawaharada, K. Kurosaki, H. Muta, M. Uno, and Sh. Yamanaka, *J. Alloys Compd.*, **381**: 308 (2004).
6. S. Ishida, T. Masaki, S. Fujii, and S. Asano, *Physica B*, **239**: 163 (1997).
7. J. Tobola, L. Jodin, P. Pecher, and G. Venturini, *J. Alloys Compd.*, **383**: 328 (2004).
8. P. Larson, S. D. Mahanti, and M. G. Kanatzidis, *Phys. Rev. B*, **62**: 12754 (2000).
9. T. Sekimoto, K. Kurosaki, H. Muta, and Sh. Yamanaka, *J. Alloys Compd.*, **394**: 122 (2005).
10. I. Skovsen, L. Bjerg, M. Christensen, E. Nishibori, B. Balke, C. Felser, and B. B. Iversen, *Dalton Trans.*, **39**: 10154 (2010).
11. G. E. Bacon and J. S. Plant, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **1**: 524 (1971).
12. D. Singh, *Plane Waves, Pseudopotentials and LAPW Method* (Boston: Kluwer Academic: 1994).
13. J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996).
14. P. Blaha, K. Schwarz, G. K. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Wien, Austria: Techn. Universität Wien: 2001).
15. http://www.wien2k.at/reg_user/faq/
16. B. R. K. Nanda, and I. Dasgupta, *J. Phys.: Condens. Matter*, **15**: 7307 (2003).
17. V. M. Uvarov, I. V. Urubkov, E. V. Urubkova, V. V. Klimov, O. Yu. Khyzhun, and V. V. Trachevs'kyi, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, Special Iss.: 145 (2011) (in Russian).
18. V. M. Uvarov, M. P. Mel'nyk, M. V. Uvarov, V. S. Mykhaleukov, and T. L. Syzova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 2: 279 (2013) (in Ukrainian).
19. J. Tobola, J. Pierre, S. Kaprzyk, R. V. Skolozdra, and M. A. Kouacou, *J. Phys.: Condens. Matter*, **10**: 1013 (1998).