

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622

АТОМНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СПЛАВАХ Fe_2NiZ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$): ВЛИЯНИЕ НА АНИЗОТРОПИЮ И СВОЙСТВА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

© 2023 г. В. В. Соколовский^{a, b, *}, О. Н. Мирошкина^c, В. Д. Бучельников^a, М. Э. Грюнер^c

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

^bНИТУ «МИСИС», Ленинский просп. 4, Москва, 119049 Россия

^cУниверситет Дуйсбурга-Эссена, ул. Лотарштрассе, 1-21, Дуйсбург, 47057 Германия

*e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

Поступила в редакцию 22.09.2022 г.

После доработки 22.11.2022 г.

Принята к публикации 30.11.2022 г.

В рамках теории функционала плотности исследовано влияние атомных конфигураций на магнитные и структурные свойства сплавов Гейслера Fe_2NiZ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$). Обсуждена конкуренция между пятью структурными мотивами кубической фазы, полученными путем перестановок атомов Fe и Ni. Предсказана новая структура кубической фазы с послойным атомным упорядочением атомов Fe и Ni в качестве основного состояния. Рассмотренные соединения в данной структуре обладают высокими значениями магнитокристаллической анизотропии, превосходящими в несколько раз значения для сплава FeNi с тетрагональной симметрией.

Ключевые слова: сплавы Гейслера, магнитокристаллическая анизотропия, *ab initio* вычисления

DOI: 10.31857/S0015323022601337, **EDN:** KVZXVA

ВВЕДЕНИЕ

Поиск новых магнитотвердых материалов является актуальной задачей современного материаловедения, поскольку постоянные магниты являются стратегической продукцией и обладают широчайшей областью применения на макро- и микроуровне: в электрогенераторах, моторах и трансформаторах, различных электроприводах, силовой и бытовой электронике, запоминающих устройствах и т.д. К наиболее мощным постоянным магнитам относят интерметаллические соединения на основе редкоземельных металлов (Nd, Sm, Dy, Tb) и $3d$ переходных металлов Fe и Co. Редкоземельные элементы обладают сильной спин-орбитальной связью, способствующей возникновению высокой магнитокристаллической анизотропии и широкому магнитному гистерезису, в то время как $3d$ -металлы ответственны за высокую спонтанную намагниченность и температуру Кюри. Однако стоимость таких магнитотвердых материалов очень высока, и перед материаловедом стоит задача поиска более дешевых, но не уступающих по свойствам магнитотвердых материалов, не содержащих редкоземельных элементов.

Ряд обзорных статей [1–7] посвящен данной задаче. Например, к недавно изученным перспективным кандидатам можно отнести сплавы Fe–Co, легированные В и С, MnBi, FePt, CoNi, MnAl и Fe–Ni с тетрагональной структурой $L1_0$. Сплавы на

основе Fe являются одними из многообещающих кандидатов для производства безредкоземельных постоянных магнитов. Тем не менее в большинстве случаев ряд перспективных сплавов обладают кубической кристаллической структурой, что отражается в низких значениях магнитной анизотропии и коэрцитивной силы.

Фундаментальные исследования в рамках теории функционала плотности (ТФП) позволяют расширить область поиска безредкоземельных постоянных магнитов и обеспечивают возможность сравнительно простого поиска и дизайна новых высокоэффективных магнитотвердых материалов. На сегодняшний день ТФП зарекомендовала себя как мощный инструмент для изучения электронной структуры и свойств основного состояния, позволяющий предсказать намагниченность насыщения, магнитокристаллическую анизотропию, параметры обменного и спин-орбитального взаимодействий. К популярным объектам теоретического исследования в вопросах поиска эффективных магнитотвердых материалов можно отнести бинарные соединения Fe–Ni [8–10], Fe–N [11], Fe–B [12], Co–Ni, Mn–Al, Mn–Ga [8], трех- и четырехкомпонентные соединения на их основе, такие как Fe–Co–C [13], Fe–P–B с добавкой Co [14], Fe–Si–B с добавками P, S, и Co [15], Fe–Co–B [12, 16].

В течение последних десятилетий на роль постоянных магнитов рассматриваются сплавы Гейслера X_2YZ , которые хорошо зарекомендовали себя в различных технологических областях. Одним из преимуществ сплавов Гейслера является то, что их свойства очень гибко варьируются в зависимости от состава и дефектности структуры. В ряде теоретических работ [17–19] рассматривались сплавы Гейслера на основе Ni [17, 18], Fe и Co [18, 19], Rh, Au, Mn [18]. В указанных работах исследовано влияние Y и Z элементов, добавки четвертого элемента, а также деформации решетки на энергию магнитокристаллической анизотропии (ЭМА). Показано, что добавка четвертого элемента из главной подгруппы III и IV групп позволяет усилить фазовую стабильность и увеличить ЭМА. Кроме того, добиться роста ЭМА можно с помощью небольшого тетрагонального искажения кубической структуры. Для большинства систем ЭМА демонстрирует квазилинейное поведение со сменой знака при степени тетрагональности $c/a \cong 1$. Для ряда составов на основе Ni, Fe, Co, Rh, Au, Mn рассмотрено влияние атомов внедрения (H, B, C и N) на ЭМА [18] и показано, что атомы внедрения стабилизируют тетрагональную структуру $L1_0$. Обнаружено 32 состава сплавов с $L1_0$ структурой, обладающих большой энергией одноосной анизотропии (>0.4 МДж/м³), и 10 составов с отрицательной энергией анизотропии в плоскости.

Следует отметить, что для магнитотвердых материалов интерес представляют только положительные значения ЭМА, которые соответствуют случаю ориентации магнитных моментов вдоль оси тетрагональной деформации. Однако в большинстве исследований уделено внимание только прямой и инверсионной гейслеровским структурам и не рассмотрены варианты с альтернативным атомным упорядочением. В недавней работе [20] нами было показано, что послойное атомное упорядочение атомов Fe и Ni в кубической фазе сплава Fe_2NiAl приводит к высокой ЭМА (1.05 МДж/м³), превосходящей ЭМА сплава FeNi с тетрагональной симметрией. Полученные результаты стимулируют дальнейшие исследования сплавов Гейслера на основе Fe. Данная работа посвящена исследованию вопросов влияния атомного упорядочения в кубической и тетрагональной фазах сплавов Fe_2NiZ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$) на магнитные свойства и ЭМА в рамках ТФП.

ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Исследования выполнены с использованием метода проекционных присоединенных плоских волн (projector augmented wave, PAW), реализованного в программном пакете VASP [21, 22]. Для расчета обменно-корреляционной энергии выбрано приближение обобщенного градиента в

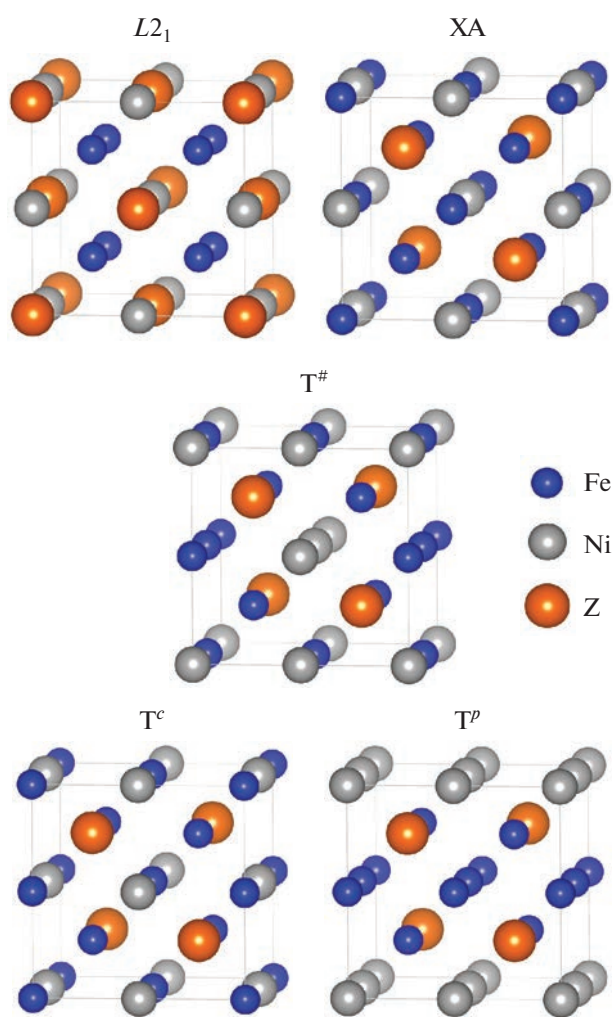


Рис. 1. Пять кристаллических структур кубической фазы Fe_2NiZ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$). Подробное описание $T^\#$, T^c и T^p структур представлено в работах [20, 24].

формулировке Пердью, Бурке и Эрнзерхофа [23]. Для описания электрон-ионных взаимодействий использованы PAW потенциалы со следующими электронными конфигурациями: $3p^6 3d^7 4s^1$ для Fe, $3p^6 3d^8 4s^2$ для Ni, $3s^2 3p^1$ для Al, $3d^{10} 4s^2 4p^1$ для Ga, $4d^{10} 5s^2 5p^1$ для In и $4d^{10} 5s^2 5p^2$ для Sn. Энергия обрезания плоских волн составляла 500 эВ. Для интегрирования зоны Бриллюэна в обратном пространстве применена схема Монкхорста–Пака с плотностью k -точек $15 \times 15 \times 15$. Критерии сходимости по полной энергии и остаточным силам равны 10^{-6} эВ/ат. и 10^{-3} эВ/Å соответственно.

Оптимизация геометрии кристаллической структуры выполнена на суперячейке из 16 атомов. Рассмотрены следующие структуры, изображенные на рис. 1: $L2_1$ ($Fm\bar{3}m$, №225, прямая гейслеровская структура), XA ($F4\bar{3}m$, № 216, инверсионная гейслеровская структура), а также три структуры тетрагональной симметрии с парамет-

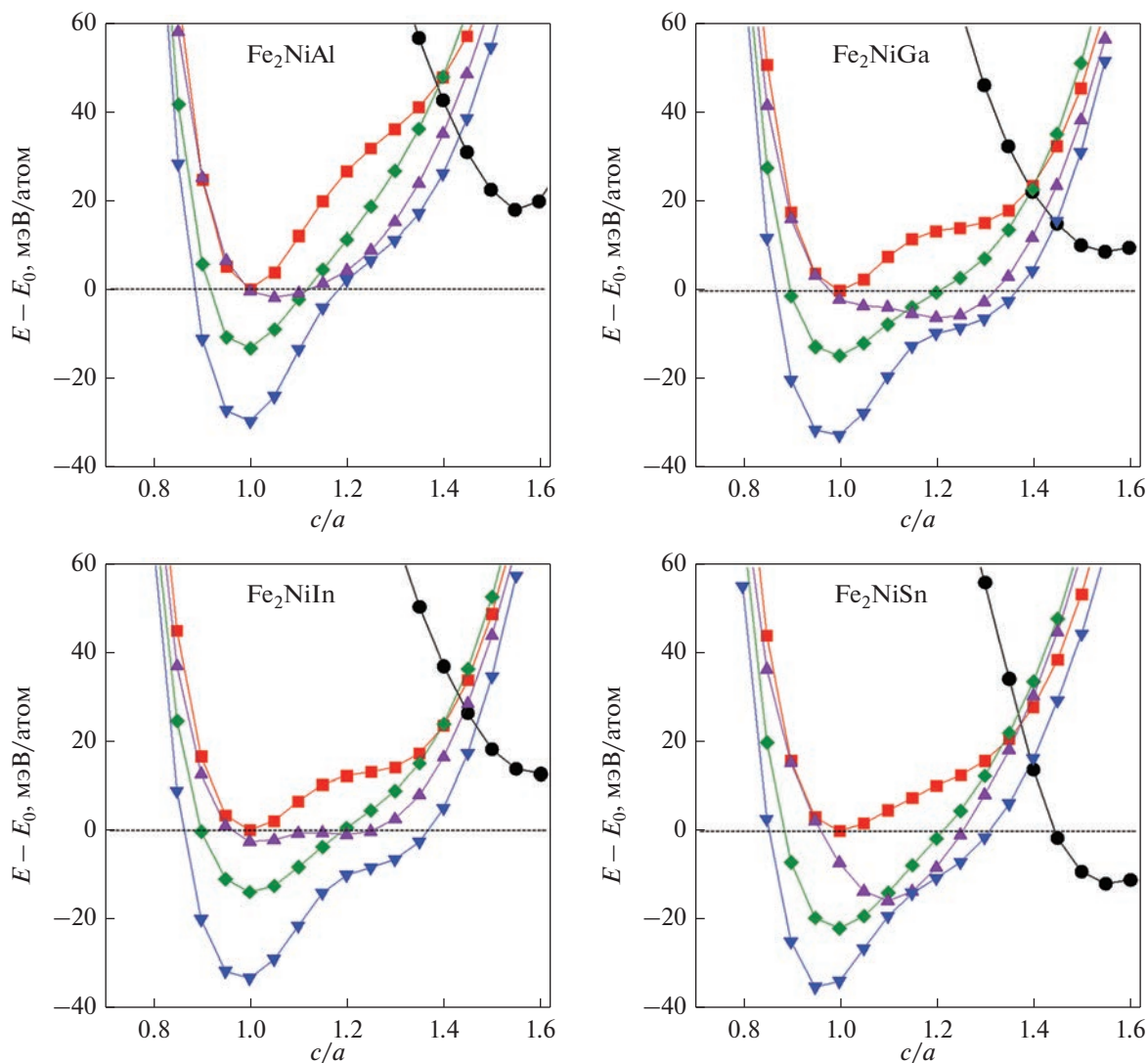


Рис. 2. Изменение полной энергии как функция степени тетрагонального искажения кубических кристаллических структур $L2_1$, XA, $T^\#$, T^c и T^p соединений Fe_2NiZ ($Z = Al, Ga, In, Sn$). В качестве E_0 взята энергия инверсионной XA структуры. Символы $\bullet$, $\blacksquare$, $\blacklozenge$, $\blacktriangle$ и $\blacktriangledown$ соответствуют структурам $L2_1$, XA, $T^\#$, T^c и T^p .

рами решетки $a = b \approx c$: $T^\#$ ($P4222$, № 93), T^c ($P42/mmc$, № 131) и T^p ($P4/nmm$, № 129). Последние структуры получены на базе инверсионной структуры путем различных перестановок пар атомов Fe и Ni, расположенных в позициях Вайкоффа $4a$ (0, 0, 0) и $4b$ (1/2, 1/2, 1/2) соответственно [24].

Для определения ЭМА выполнены последовательные самосогласованные расчеты с учетом спин-орбитального взаимодействия для структур с ориентацией магнитных моментов вдоль направлений $[001]$ и $[100]$ с использованием волновых функций из самосогласованных вычислений. ЭМА определена следующим образом: $E_{ЭМА} = E_{100} - E_{001}$, где E_{100} и E_{001} — полные энергии соединений с учетом соответствующих ориентаций магнитных моментов. Отрицательный знак $E_{ЭМА}$

говорит об анизотропии типа “легкая плоскость”, а положительный знак указывает на анизотропию типа “легкая ось”.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для расчета свойств основного состояния сплавов Fe_2NiZ ($Z = Al, Ga, In, Sn$) и определения энергетически выгодных структур в кубической и тетрагональной фазах на первом этапе исследования выполнена задача минимизации энергии в рамках полной геометрической оптимизации рассматриваемых кристаллических структур. На рис. 2 представлены зависимости полной энергии от степени тетрагонального искажения кубических решеток с различным атомным упорядочением.

Таблица 1. Равновесные параметры решетки (a и c), тетрагональное соотношение (c/a), объем ячейки, приходящийся на атом (V), и полный магнитный момент (μ_{tot}) сплавов Fe₂NiZ (Z = Al, Ga, In, Sn) с различными вариантами кристаллического упорядочения

Соединение	Структура	a , Å	c , Å	c/a	V , Å ³ /ат.	μ_{tot} , $\mu_B/\text{ф.е.}$
Fe ₂ NiAl	$L1_0$	4.943	7.721	1.562	11.791	4.555
	ХА	5.729	5.728	0.999	11.750	4.785
	$T^\#$	5.744	5.682	0.989	11.717	4.616
	T^c	5.658	5.866	1.036	11.737	4.685
	T^p	5.741	5.697	0.992	11.735	4.696
Fe ₂ NiGa	$L1_0$	4.974	7.686	1.545	11.884	4.752
	ХА	5.751	5.750	0.999	11.886	4.880
	$T^\#$	5.750	5.737	0.997	11.855	4.797
	T^c	5.409	6.494	1.201	11.875	4.794
	T^p	5.766	5.723	0.992	11.892	4.825
Fe ₂ NiIn	$L1_0$	5.200	8.078	1.553	13.652	5.149
	ХА	6.016	6.014	0.999	13.604	5.199
	$T^\#$	6.005	6.009	1.001	13.543	5.137
	T^c	6.023	6.022	0.999	13.653	5.302
	T^p	6.025	5.982	0.992	13.572	5.009
Fe ₂ NiSn	$L1_0$	5.209	7.985	1.532	13.541	4.976
	ХА	6.018	6.017	0.999	13.619	5.225
	$T^\#$	6.017	5.986	0.994	13.545	5.010
	T^c	5.826	6.379	1.090	13.532	5.008
	T^p	6.059	5.918	0.976	13.579	5.112

В данном случае полагалось равенство объемов кубической ($c/a = 1$) и тетрагональной ($c/a \neq 1$) фаз. Из рисунков видно, что для всех соединений в состоянии кубической фазы предложенные структуры $T^\#$, T^c и T^p , сформированные на основе инверсионной структуры, являются энергетически выгодными по сравнению с общеизвестными гейслеровскими кубическими структурами $L2_1$ и ХА. При этом T^p структура с послойным упорядочением атомов Fe и Ni выступает в качестве основного состояния. В целом для всех сплавов разница энергий между T^p и ХА структурами при $c/a = 1$ лежит в интервале от 30 до 35 мэВ/атом, тогда как для структур T^p и $L2_1$ разница энергий значительно больше: ≈ 175 – 180 мэВ/атом для Fe₂Ni(Ga, Sn) и ≈ 210 мэВ/атом для Fe₂Ni(Al, In). Отметим, что зависимости энергии от тетрагональной деформации кубической структуры $L2_1$ для $c/a < 1.3$ лежат за областью рис. 2.

Для ХА, $T^\#$ и T^p структур наблюдается один глобальный минимум энергии в области кубической фазы, что говорит об отсутствии тетрагональной фазы. В сплавах Fe₂NiGa и Fe₂NiSn со структурой T^c наблюдается тетрагональная фаза со степенью тетрагональности 1.25 и 1.15, соответственно, тогда как в соединении Fe₂NiIn кубическая и тетрагональная структура T^c обладают

близкими значениями энергии. Тетрагональное искажение структуры $L2_1$ для всех сплавов приводит к появлению минимума энергии при $c/a \approx 1.55$, указывающего на тетрагональную фазу $L1_0$. Можно видеть, что при переходе от Al к Sn, т.е. при увеличении порядкового номера Z -элемента, минимум энергии тетрагональной $L1_0$ фазы приближается к значению для ХА структуры. В случае Fe₂NiSn структура $L1_0$ с соотношением $c/a \approx 1.55$ становится энергетически выгодной по сравнению с инверсионной кубической ХА структурой. Схожие результаты были получены ранее в работе [19]. Авторы показали, что степень тетрагонального искажения зависит от плотности электронных состояний на уровне Ферми для кубической и тетрагональной фазы. Следует также отметить, что энергия структуры $L1_0$ близка к значению энергии тетрагональной ($c/a \approx 1.15$) структуры T^c (см. рис. 2, Fe₂NiSn).

В табл. 1 представлены результаты расчетов параметров решетки и магнитного момента для исследуемых соединений. В случае прямой гейслеровской структуры данные приведены для тетрагональной фазы $L1_0$. Можно видеть, что для всех сплавов структура ХА наиболее близка к идеальной кубической структуре ($c/a \approx 0.999$), тогда как предложенные $T^\#$, T^c , T^p структуры тетрагональной симметрии характеризуются незначи-

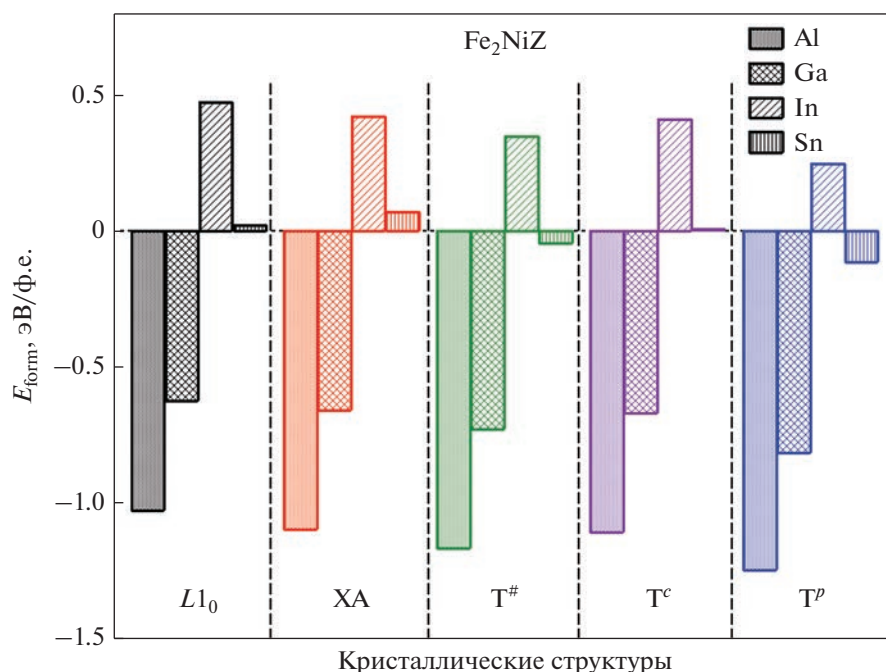


Рис. 3. Энергия формирования E_{form} для сплавов Fe_2NiZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$) со структурами $L1_0$, XA, $T^\#$, T^c и T^p . Результаты приведены для конфигураций из табл. 1.

тельными искажениями: $c/a \lesssim 0.995$ для $T^\#$ и T^p , $c/a \gtrsim 1.003$ для T^c . Тетрагональная фаза соединения Fe_2NiSn со структурами T^c и T^p характеризуется несколько большими отклонениями c/a от 1: $c/a = 1.09$ и 0.976 соответственно. Из табл. 1 также видно, что с увеличением порядкового номера Z -элемента в соединениях Fe_2NiZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$) наблюдается рост объема элементарных ячеек рассмотренных структур, сопровождающийся возрастанием полного магнитного момента. Данная тенденция четко прослеживается для всех составов со структурами XA и T^p вследствие их несущественных тетрагональных искажений. Тем не менее сплав Fe_2NiIn со структурами $T^\#$, T^c и $L1_0$ обладает несколько большим магнитным моментом по сравнению с Fe_2NiSn .

Для определения термодинамической стабильности рассмотренных соединений были выполнены расчеты энергии формирования (E_{form}) каждой из кристаллических структур, отмеченных в табл. 1. В данном случае E_{form} рассчитывалась как разница полной энергии соединения и суммы полных энергий составляющих это соединение элементов в своих кристаллических структурах. Отрицательные значения E_{form} говорят о термодинамической стабильности соединений. Для чистых элементов рассмотрены следующие структуры: ОЦК для Fe, ГЦК для Ni и Al, орторомбическая для Ga, тетрагональная для In, кубическая алмазного типа для Sn.

Результаты расчетов E_{form} представлены на рис. 3. Видно, что энергии формирования сплавов Fe_2NiAl и Fe_2NiGa во всех кристаллических структурах имеют отрицательные значения, что свидетельствует о термодинамической устойчивости этих фаз. Напротив, для сплава Fe_2NiIn получены положительные значения E_{form} . Наименьшее положительное значение E_{form} получено для слоистой T^p структуры. Данный результат говорит о ее возможном метастабильном состоянии. Сплав Fe_2NiSn характеризуется положительными, но близкими к нулю значениями E_{form} для XA и $L1_0$ структур, тогда как предложенные структуры тетрагональной симметрии $T^\#$, T^c и T^p являются стабильными. При этом T^p структура является наиболее устойчивой, так как обладает наибольшей по модулю отрицательной E_{form} .

Перейдем к обсуждению расчетов ЭМА в зависимости от типа атомного упорядочения, представленных на рис. 4. Отметим, что структура XA не представлена на рисунке, так как для всех составов ЭМА равна нулю ввиду сохранения кубической симметрии ($c/a \approx 0.999$). Рассмотрим сначала результаты расчетов ЭМА для соединений с тетрагональной структурой $L1_0$. В силу большой степени тетрагональности ($c/a \approx 1.55$ для всех соединений) значения ЭМА лежат в интервале от 0.5 до 1.0 МДж/м³. Можно видеть, что ЭМА возрастает при переходе от Fe_2NiAl к Fe_2NiSn , что

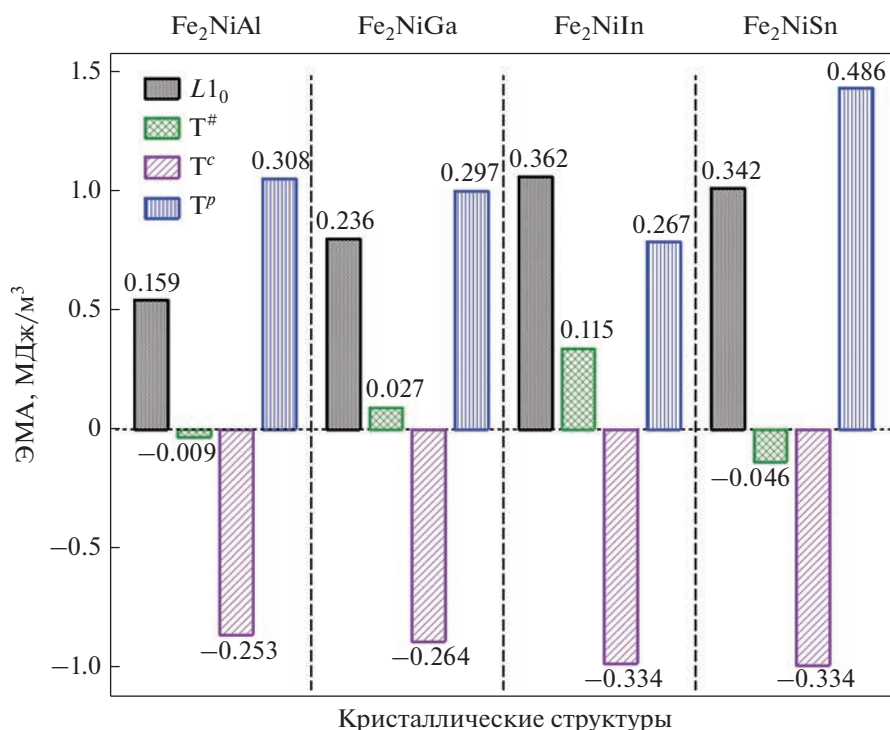


Рис. 4. Энергия магнитокристаллической анизотропии для сплавов Fe_2NiZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$) со структурами L_{10} , $T^\#$, T^c и T^p . Результаты приведены для конфигураций из табл. 1. Над столбцами указаны значения ЭМА в мЭВ/ф.е.

связано с ростом полного магнитного момента (см. табл. 1).

Интересно отметить, что соединения в предложенных структурах тетрагональной симметрии $T^\#$, T^c и T^p также обладают ЭМА, несмотря на слабую степень искажения кубической решетки ($c/a \approx 1$). При этом ЭМА T^c и T^p структур больше, чем ЭМА структуры L_{10} . Практически для всех соединений наибольшая анизотропия наблюдается для структуры T^p с послойным упорядочением атомов Fe и Ni. Полученные значения примерно в два-три раза превышают величину ЭМА для бинарного сплава FeNi в тетрагональной L_{10} фазе. Теоретические значения ЭМА для FeNi, полученные другими авторами, лежат в диапазоне от 0.22 до 0.77 МДж/м³ [8, 9, 25, 26], тогда как экспериментальные значения — от 0.32 до 1.3 МДж/м³ [27–29]. Однако хорошо известно, что упорядоченная фаза L_{10} -FeNi образуется в течение длительного времени в космических телах, и вопросы ее синтеза в современных лабораториях остаются открытыми. В недавней работе [20] нами было показано, что большая ЭМА в структуре T^p сплава Fe_2NiAl обеспечивается за счет вкладов спин-орбитальной связи в атомах Fe и Ni, которые в 2–3 раза больше по сравнению с вкладами в L_{10} -FeNi.

В целом можно видеть, что для всех структур за исключением T^c и $T^\#$ в Fe_2NiAl и Fe_2NiSn наблюдаются положительные значения ЭМА, которые указывают на одноосную анизотропию типа “легкая ось”, тогда как в T^c структуре реализуется анизотропия типа “легкая плоскость”. Стоит отметить, что именно наведенная одноосная анизотропия является предпочтительным фактором для создания постоянных магнитов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе рассмотрено влияние атомного упорядочения в кубической фазе соединений Fe_2NiZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Sn}$) в рамках ТФП. Выполнена полная оптимизация геометрии систем с прямой и инверсионной гейслеровскими структурами, а также с тремя предложенными структурами $T^\#$, T^c и T^p тетрагональной симметрии. Последние структуры сформированы на основе ХА структуры путем перестановки пар атомов Fe и Ni по типу анти-сайт дефекта. Согласно расчетам, T^p структура ($c/a \approx 1$), характеризующаяся чередующимися в плоскости (110) слоями атомов Fe и Ni, является энергетически выгодной для всех соединений Fe_2NiZ . При этом $T^\#$ и T^c также представляются предпочтительными по сравнению с кубическими прямой $L2_1$ и инверсионной ХА структурами ($c/a = 1$).

Исследование вопросов устойчивости сплавов Fe_2NiZ в рамках вычислений энергии формирования (возможности распада на отдельные элементы) показало, что все предложенные структуры сплавов Fe_2NiAl и Fe_2NiGa являются устойчивыми, тогда как система Fe_2NiSn стабильна только в $T^\#$ и T^p структурах. Остальные варианты кристаллического упорядочения в сплавах Fe_2Ni (Sn, In) можно рассматривать как метастабильные фазы.

В работе также выполнены расчеты ЭМА для всех рассмотренных составов. Показано, что послойное упорядочение атомов Fe и Ni в структуре T^p приводит к существенному увеличению ЭМА типа “легкая ось” по сравнению с другими структурами рассматриваемых соединений и даже со сплавом $L1_0\text{-FeNi}$ — наиболее популярным кандидатом на роль постоянного магнита. Наибольшая величина ЭМА (≈ 1.48 МДж/м³) предсказана для Fe_2NiSn . Таким образом, можно полагать, что изучение слоистых структур в сплавах Гейслера на основе Fe имеет особую важность, так как они должны обладать высокой ЭМА, при этом их составляющие элементы дешевле по сравнению с редкоземельными составами.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 075-01391-22-03. Расчеты энергии формирования выполнены финансовой поддержкой Программы “Приоритет-2030” НИТУ “МИСИС” (грант № K2-2022-022).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuz'min M.D., Skokov K.P., Jian H., Radulov I., Gutfleisch O. Towards high-performance permanent magnets without rare earths // J. Phys. Condens. Matter. 2014. V. 26. № 6. P. 064205.
2. McCallum R.W., Lewis L.H., Skomski R., Kramer M.J., Anderson I.E. Practical aspects of modern and future permanent magnets // Annu. Rev. Mater. Res. 2014. V. 44. P. 451–477.
3. Niarchos D., Giannopoulos G., Gjoka M., Sarafidis C., Psycharis V., Rusz J., Edström A.A., Eriksson O., Toson P., Fidler J., Anagnostopoulou E., Sanyal U., Ott F., Lacroix L.M., Viau G., Bran C., Vazquez M., Reichel L., Schultz L., Fähler S. Toward rare-earth-free permanent magnets: a combinatorial approach exploiting the possibilities of modeling, shape anisotropy in elongated nanoparticles, and combinatorial thin-film approach // JOM. 2015. V. 67. № 6. P. 1318–1328.
4. Hirose S. Current status of research and development toward permanent magnets free from critical elements // J. Magn. Soc. Jpn. 2015. V. 39. № 3. P. 85–95.
5. Skomski R., Coey J.M.D. Magnetic anisotropy—How much is enough for a permanent magnet? // Scr. Mater. 2016. V. 112. P. 3–8.
6. Li D., Pan D., Li S., Zhang Z. Recent developments of rare-earth-free hard-magnetic materials // Sci. China Phys. Mech. Astron. 2016. V. 59. № 1. P. 617501.
7. Skokov K.P., Gutfleisch O. Heavy rare earth free, free rare earth and rare earth free magnets—Vision and reality // Scr. Mater. 2018. V. 154. P. 289–294.
8. Edström A., Chico J., Jakobsson A., Bergman A., Rusz J. Electronic structure and magnetic properties of $L1_0$ binary alloys // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. № 1. P. 014402.
9. Werwin'ski M., Marciniak W. Ab initio study of magnetocrystalline anisotropy, magnetostriction, and Fermi surface of $L1_0$ FeNi (tetragonal) // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. № 49. P. 495008.
10. Tian L.-Y., Levamäki H., Eriksson O., Kokko K., Nagy Á., Delczeg-Czirjak E.K., Vitos L. Density Functional Theory description of the order-disorder transformation in Fe-Ni // Sci. Rep. 2019. V. 9. № 1. P. 1–7.
11. Bhattacharjee S., Lee S.-C. First-principles study of the complex magnetism in Fe_{16}N_2 // Sci. Rep. 2019. V. 9. № 1. P. 1–9.
12. Reichel L., Schultz L., Pohl D., Oswald S., Fähler S., Werwin'ski M., Edström A., Delczeg-Czirjak E.K., Rusz J. From soft to hard magnetic Fe-Co-B by spontaneous strain: a combined first principles and thin film study // J. Condens. Matter Phys. 2015. V. 27. № 47. P. 476002.
13. Delczeg-Czirjak E.K., Edström A., Werwin'ski M., Rusz J., Skorodumova N.V., Vitos L., Eriksson O. Stabilization of the tetragonal distortion of $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ alloys by C impurities: A potential new permanent magnet // Phys. Rev. B. 2014. V. 89. № 14. P. 144403.
14. Werwin'ski M., Edström A., Rusz J., Hedlund D., Gunnarsson K., Svedlindh P., Cedervall J., Sahlberg M. Magnetocrystalline anisotropy of Fe_5PB_2 and its alloys with Co and 5d elements: A combined first-principles and experimental study // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. № 21. P. 214431.
15. Werwin'ski M., Kontos S., Gunnarsson K., Svedlindh P., Cedervall J., Höglén V., Sahlberg M., Edström A., Eriksson O., Rusz J. Magnetic properties of Fe_5SiB_2 and its alloys with P, S, and Co // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. № 17. P. 174412.
16. Edström A., Werwin'ski M., Işan D., Rusz J., Eriksson O., Skokov K.P., Radulov I.A., Ener S., Kuz'min M.D., Hong J. et al. Magnetic properties of $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{B}$ alloys and the effect of doping by 5d elements // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. № 17. P. 174413.
17. Herper H.C. Ni-based Heusler compounds: How to tune the magnetocrystalline anisotropy // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. № 1. P. 014411.
18. Gao Q., Opahle I., Gutfleisch O., Zhang H. Designing rare-earth free permanent magnets in Heusler alloys via interstitial doping // Acta Mater. 2020. V. 186. P. 355–362.
19. Matsushita Y.I., Madjarova G., Dewhurst J.K., Shallcross S., Felser C., Sharma S., Gross E.K.U. Large magnetocrystalline anisotropy in tetragonally distorted Heuslers: a systematic study // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. № 9. P. 095002.
20. Sokolovskiy V.V., Miroshkina O.N., Buchelnikov V.D., Gruner M.E. Impact of local arrangement of Fe and Ni on the phase stability and magnetocrystalline anisotropy

- py in Fe–Ni–Al Heusler alloys // *Phys. Rev. Mater.* 2022. V. 6. № 2. P. 025402.
21. *Kresse G., Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* 1996. Oct. V. 54. P. 11 169–11 186.
22. *Kresse G., Joubert D.* From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. P. 1758.
23. *Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
24. *Neibecker P., Gruner M.E., Xu X., Kainuma R., Petry W., Pentcheva R., Leitner M.* Ordering tendencies and electronic properties in quaternary Heusler derivatives // *Phys. Rev. B.* 2017. V. 96. № 16. P. 165131.
25. *Wu R., Freeman A.J.* Spin-orbit induced magnetic phenomena in bulk metals and their surfaces and interfaces // *J. Magn. Magn. Mater.* 1999. V. 200. № 1. P. 498–514.
26. *Bruno P.* Tight-binding approach to the orbital magnetic moment and magnetocrystalline anisotropy of transition-metal monolayers // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. № 1. P. 865.
27. *Paulevé J., Chamberod A., Krebs K., Bourret A.* Magnetization curves of Fe–Ni (50–50) single crystals ordered by neutron irradiation with an applied magnetic field // *J. Appl. Phys.* 1968. V. 39. № 2. P. 989–990.
28. *Poirier E., Pinkerton F.E., Kubic R., Mishra R.K., Bordeaux N., Mubarak A., Lewis L.H., Goldstein J.I., Skomski R., Barmak K.* Intrinsic magnetic properties of L1₀ FeNi obtained from meteorite NWA 6259 // *J. Appl. Phys.* 2015. V. 117. № 17. P. 17E318.
29. *Lewis L.H., Pinkerton F.E., Bordeaux N., Mubarak A., Poirier E., Goldstein J.I., Skomski R., Barmak K.* De Magnete et Meteorite: Cosmically Motivated Materials // *IEEE Magn. Lett.* 2014. V. 5. P. 1–4.