ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2023, том 124, № 5, с. 363–368

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 538.958

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СОЕДИНЕНИЙ $ErNi_2Mn_x$

© 2023 г. Ю. В. Князев[a, *], А. В. Лукоянов[a, b], Ю. И. Кузьмин[a], Е. Г. Герасимов[a, b], Н. В. Мушников[a, b]

[a] *Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия*

[b] *Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия*

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

Поступила в редакцию 03.03.2023 г.
После доработки 28.03.2023 г.
Принята к публикации 03.04.2023 г.

Выполнены исследования электронной структуры и оптических свойств нестехиометрических соединений $ErNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0.5, 1$). Спин-поляризованные расчеты полных и парциальных плотностей электронных состояний проведены в рамках метода DFT + U с поправкой на сильные электронные корреляции в 4f-оболочке Er в приближении твердых растворов $ErNi_{2-x}Mn_x$. Установлены особенности их трансформации при изменении содержания марганца. В широком диапазоне длин волн исследованы оптические свойства данных соединений. Вычисленные спектры межзонной оптической проводимости сопоставлены с экспериментально полученными зависимостями. Обсуждается природа квантового поглощения света. Определены плазменные и релаксационные частоты носителей тока.

Ключевые слова: электронная структура, оптические свойства, интерметаллические соединения

DOI: 10.31857/S0015323023600351, **EDN:** OLQYNU

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованиям интерметаллических соединений редкоземельных R и переходных T металлов определяется многообразием их физико-технических свойств, имеющих перспективу практического использования. Большое внимание уделяется изучению интерметаллидов RT_2 с кубической структурой типа $MgCu_2$ (фаза Лавеса C15, пространственная группа $Fd\bar{3}m$), в которых относительно простая кристаллическая решетка сочетается с уникальными магнитными характеристиками: гигантской магнитострикцией, большим магнетокалорическим эффектом и высокими значениями магнитной анизотропии [1–5]. К такому типу материалов относится бинарное соединение $ErNi_2$, транспортные и магнитные свойства которого определяются взаимодействием различных по своей природе 3d- и 4f-электронных состояний [6–9]. В соединениях $ErNi_2Mn_x$ нестехиометрическая кубическая структура типа $MgCu_2$ сохраняется в интервале концентраций марганца $0 < x < 1.5$, при этом атомы Mn частично локализованы как в позициях Er, так и в позициях Ni [10–12]. В соединениях $ErNi_2Mn_x$ с более высокой концентрацией марганца формируется также кубическая структура $F43m$, содержание которой с ростом x увеличивается. Параметр кристаллической решетки при добавлении марганца монотонно растет от 7.13 ($x = 0$) до 7.15 Å ($x = 1.25$). При этом электросопротивление соединений существенно повышается, в частности, при изменении x от 0 до 1.25 возрастает более чем в два раза. Магнитные свойства системы $ErNi_2Mn_x$ исследовали в работах [10, 11, 13–15]. Показано, что увеличение содержания марганца приводит к резкому росту 3d–3d и 4f–3d-обменных взаимодействий, что приводит к повышению температуры Кюри T_C [11]. Максимальное значение $T_C = 48$ K достигается при $x = 0.5$, что существенно выше, чем в исходном бинарном соединении ($T_C = 7$ K). При введении марганца в соединение $ErNi_2$ возникает магнитный момент 3d-подрешетки, ориентированный противоположно магнитному моменту 4f-электронов. Это обстоятельство приводит к монотонному уменьшению результирующего магнитного момента с возрастанием x в системе $ErNi_2Mn_x$ [15].

Добавление марганца к бинарному $ErNi_2$, как показали рентгеновские фотоэмиссионные исследования [10], приводит к заметной модификации их электронной структуры вблизи уровня Ферми E_F. Наблюдается сильная гибридизация

валентных 3*d*-состояний марганца и никеля, приводящая к образованию в спектре максимума вблизи 1.7 эВ. С ростом концентрации Mn интенсивность данного максимума увеличивается, а плотность состояний на E_F возрастает. Отмечается прямая корреляция эволюции электронной структуры с изменением концентрационных зависимостей магнитных свойств. В частности, повышение T_C соединений, происходящее с ростом x, связывается с усилением Er 5*d*–Mn/Ni 3*d*-обменного взаимодействия. Результаты первопринципных спин-поляризованных расчетов электронной структуры $ErNi_2$, представленные в работе [16], выявили ряд особенностей локализации и гибридизации *d*- и *f*-состояний вблизи E_F. По-видимому, эти данные требуют определенного уточнения, поскольку 4*f*-зоны одной из спин-поляризованных систем электронов оказались расположенными непосредственно на уровне Ферми, что является весьма спорным. В настоящей работе для изучения электронных характеристик соединений $ErNi_2Mn_x$ использован подход, сочетающий теоретические расчеты плотностей электронных состояний и экспериментальные исследования оптических свойств. Цель работы – определить степень соответствия вычислительной модели, учитывающей сильные корреляции в 4*f*-оболочке Er, с наблюдаемыми спектрами межзонного оптического поглощения.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Электронная структура сплавов $ErNi_2Mn_x$ ($x = 0$, 0.5, 1) была теоретически рассчитана в пакете компьютерных программ QUANTUM ESPRESSO [17]. Вычисления выполняли на базе приближения обобщенной градиентной поправки (GGA) версии Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [18] для обменно-корреляционного потенциала и метода DFT + U [19]. Данный метод применяли для учета сильных электронных корреляций в 4*f*-оболочке ионов эрбия с параметрами прямого кулоновского $U = 4.9$ эВ и обменного (хундовского) взаимодействия $J_H = 0.7$ эВ. Эти значения ранее использованы в первопринципных расчетах интерметаллических соединений эрбия [20]. В вычислениях мы использовали стандартные псевдопотенциалы из библиотеки QUANTUM ESPRESSO и пакета псевдопотенциалов редкоземельных элементов [21]. Интегрирование в обратном пространстве производили по сетке 12 × 12 × 12 **k**-точек. Вычисленный спиновый момент ионов эрбия составил 3.0 μ_B, что соответствует величине эффективного магнитного момента 9.6 μ_B. Значение магнитного момента ионов марганца в расчетах составило 2.7 μ_B, ионов никеля – до 0.3 μ_B. Использованный нами метод не позволяет производить расчеты с учетом частичного занятия атомами марганца позиций редкоземельного атома Er в нестехиометрических соединениях $ErNi_2Mn_x$. Поэтому вычисления проводили в приближении твердых растворов замещения типа $ErNi_{2-x}Mn_x$ в предположении, что атомы марганца занимают только позиции 3*d*-переходного металла. Такой подход позволяет качественно оценить влияние частичного замещения никеля марганцем на электронную структуру нестехиометрических соединений $ErNi_2Mn_x$.

Способ получения исследуемых в данной работе образцов, а также их аттестация подробно изложены в работе [10]. Оптические свойства соединений исследованы в интервале длин волн 0.22–16 мкм (энергетический диапазон $E = 0.078$–5.64 эВ) при комнатной температуре. Эллипсометрическим методом определен ряд спектральных параметров, характеризующих оптический отклик среды: действительная ε_1 и мнимая ε_2 части комплексной диэлектрической проницаемости, оптическая проводимость $\sigma = \varepsilon_2\omega/4\pi$, отражательная способность $R(E)$. Плоские зеркальные поверхности образцов были приготовлены полированием на алмазных пастах различной зернистости.

РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Полные плотности электронных состояний $N(E)$ соединений $ErNi_{2-x}Mn_x$ ($x = 0$, 0.5, 1) для двух спиновых направлений представлены на рис. 1. Здесь же показано энергетическое распределение парциальных плотностей для 4*f*- и 5*d*-электронов Er, а также 3*d*-электронов Ni и Mn. Во всех трех соединениях структура $N(E)$ в интервале $-4 < E_F < 1$ эВ определяется преимущественно 3*d*-зонами Ni, образующими в обеих спиновых проекциях почти идентичные по форме энергетические полосы. Вклад 5*d*-состояний Er в $N(E)$ является слабым по величине и почти равномерно распределен в широком диапазоне энергий. Узкие интенсивные максимумы, расположенные в ↑-зоне в интервале 6–8 эВ ниже E_F, связаны с 4*f*-состояниями Er. Аналогичные пики в ↓-зоне локализованы при энергиях ~ –5 и ~1.5 эВ соответственно ниже и выше E_F. Электронным состояниям Mn (рис. 1б, 1в) соответствуют энергетически протяженные полосы. Увеличение содержания марганца приводит к росту интенсивности этих полос, а также заметной трансформации контура кривой полной $N(E)$. С ростом уровня легирования глубокий минимум между двумя пиками вблизи 1.5 эВ становится менее выразительным, а плотность состояний на уровне Ферми существенно возрастает.

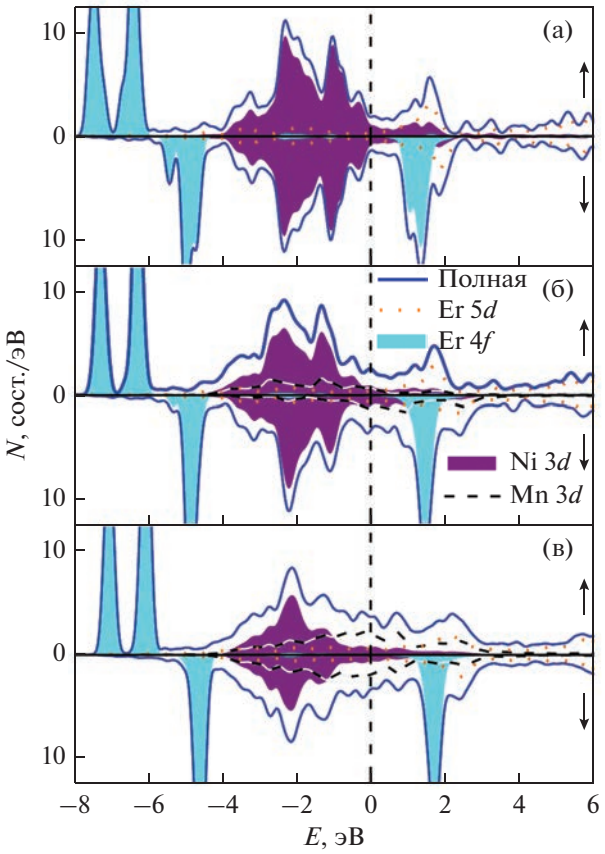

Рис. 1. Полные и парциальные плотности состояний соединений $ErNi_2$ (а), $ErNi_{1.5}Mn_{0.5}$ (б) и ErNiMn (в).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Энергетические зависимости отражательной способности и обеих компонент диэлектрической проницаемости соединений представлены на рис. 2. В инфракрасном диапазоне при $E < 1$ эВ, где доминирует внутризонное (друдевское) поглощение света, наблюдается монотонный рост $|\varepsilon_1|$, ε_2 и R, что типично для металлических материалов. В этом спектральном интервале трактовка оптических свойств, основанная на уравнении движения электронов в переменном электромагнитном поле [22], позволяет определить релаксационные γ и плазменные ω_p частоты электронов проводимости. Расчет показал, что частота релаксации, аддитивно учитывающая все типы рассеяния электронов при их взаимодействии с электромагнитной волной, возрастает с увеличением примеси Mn и принимает значения $\gamma = 2.9 \times 10^{14}$ с$^{-1}$ ($ErNi_2$), $\gamma = 3.6 \times 10^{14}$ с$^{-1}$ ($ErNi_2Mn_{0.5}$) и $\gamma = 4.2 \times 10^{14}$ с$^{-1}$ ($ErNi_2Mn$). Плазменная частота, характеризующая коллективные осцилляции электронов проводимости, с изменением концентрации марганца проявляет такую же тенденцию: $\omega_p = 5.6 \times 10^{15}$ с$^{-1}$ ($ErNi_2$), $\omega_p = 6.1 \times 10^{15}$ с$^{-1}$ ($ErNi_2Mn_{0.5}$), $\omega_p = 6.5 \times 10^{15}$ с$^{-1}$

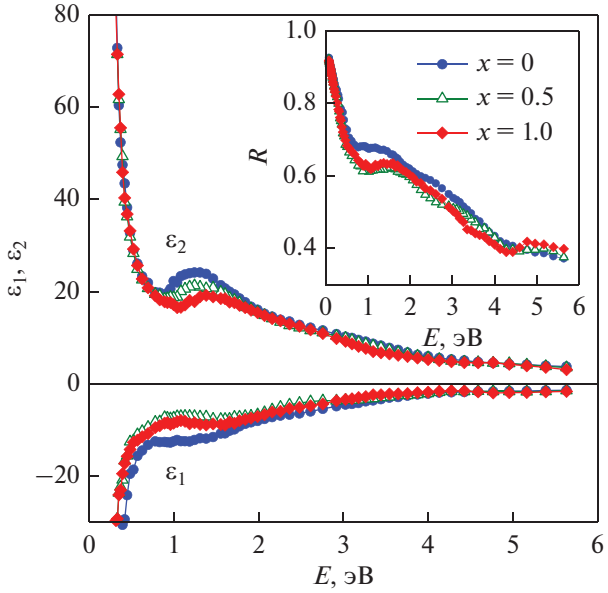

Рис. 2. Действмтельная ε_1 и мнимая ε_2 части комплексной диэлектрической проницаемости и отражательная способность R соединений $ErNi_2Mn_x$.

($ErNi_2Mn$). Этот параметр, зависящий от строения электронного спектра и эффектов межэлектронного взаимодействия [22], пропорционален плотности состояний на поверхности Ферми $N(E_F)$. Соотношение $n = \omega_p^2 m / 4\pi e^2$ (m и e – масса и заряд электрона) позволяет рассчитать концентрации электронов проводимости для всех трех соединений, которые также растут с увеличением содержания марганца: $n = 6.4 \times 10^{22}$ см$^{-3}$ ($ErNi_2$), $n = 7.0 \times 10^{22}$ см$^{-3}$ ($ErNi_2Mn_{0.5}$), $n = 7.4 \times 10^{22}$ см$^{-3}$ ($ErNi_2Mn$). Такая тенденция изменения γ и ω_p коррелирует с расчетами электронной структуры данных материалов, показывающими существенное возрастание $N(E_F)$ в тройных сплавах по сравнению с бинарным (рис. 1). Значения плазменных и релаксационных частот, приведенные выше, использованы для выделения друдевского вклада $\sigma_D(E) = \omega_p^2 \gamma / 4\pi(\omega^2 + \gamma^2)$ в оптическую проводимость каждого соединения.

Энергетические зависимости оптической проводимости $\sigma(E)$ соединений представлены на рис. 3 (кривые смещены по оси ординат друг относительно друга на 10 единиц). В их спектральном профиле отчетливо проявились две области, которые соответствуют двум различным видам фотовозбуждения электронов – внутри- и межзонному поглощению света. В инфракрасной области при $E < 0.7$ эВ в спектрах $\sigma(E)$ всех сплавов с ростом энергии фотонов наблюдается монотонный спад, соответствующий поглощению друдевского типа ($\sigma \sim \omega^{-2}$). С ростом частоты электро-

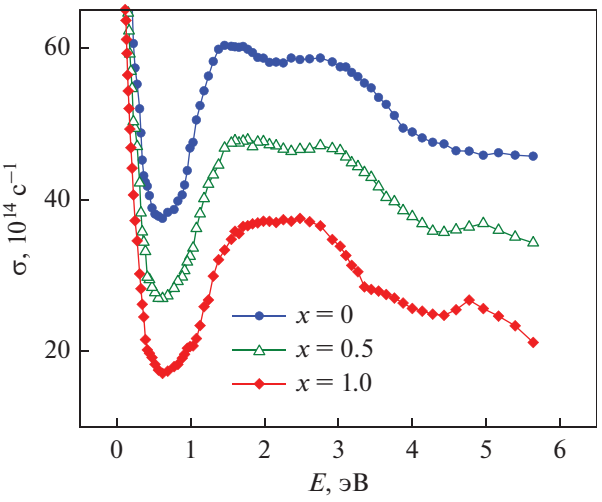

Рис. 3. Оптическая проводимость соединений $ErNi_2Mn_x$ (кривые смещены по оси ординат друг относительно друга на 10 единиц).

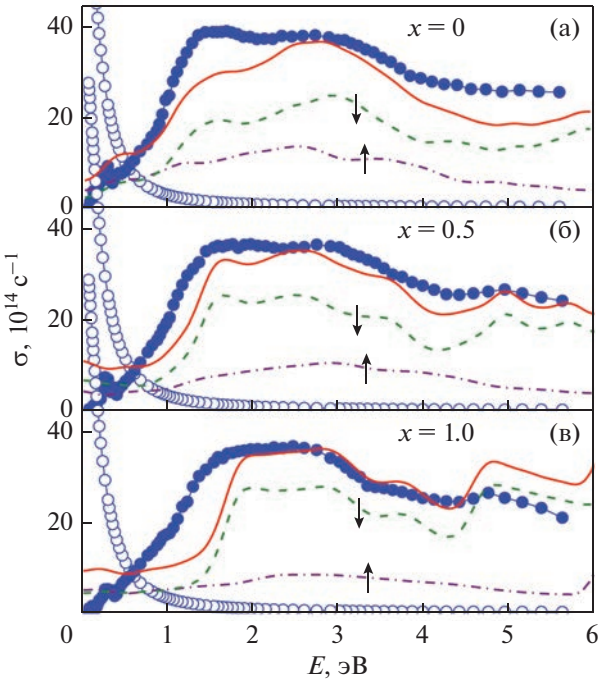

Рис. 4. Межзонный (закрашенные кружки) и внутризонный (пустые кружки) вклады в оптическую проводимость соединений $ErNi_2Mn_x$. Сплошная линия – расчет из плотностей состояний (в произвольных единицах). Штриховая и штрихпунктирная линии – вклады от двух спиновых подсистем.

магнитной волны начинает доминировать механизм межзонного поглощения света, связанный с переходами электронов из занятых состояний в свободные. При $E < 1.5$ эВ оба механизма дают заметные вклады в оптическую проводимость. Межзонное поглощение приводит к появлению в зависимостях $\sigma(E)$ ряда особенностей, вид которых индивидуален для конкретного материала и определяется его зонной структурой. Эксперимент показывает, что спектры оптической проводимости исследуемых соединений на фоне общего сходства обладают рядом различий. В бинарном $ErNi_2$ широкая полоса поглощения характеризуется двумя максимумами (вблизи 1.5 и 3 эВ). По мере возрастания количества Mn форма данной полосы трансформируется. При $x = 0.5$ указанные особенности становятся менее выразительными, а при $x = 1$ они сливаются в единый широкий максимум. Наблюдаемая модификация спектров $\sigma(E)$ в области интенсивного квантового поглощения света определяется изменением электронной структуры соединений при изменении содержания марганца.

Для понимания природы оптического поглощения исследуемых соединений представляет интерес сравнить экспериментальные спектры межзонной оптической проводимости $\sigma_{мз}(E) = \sigma(E) - \sigma_D(E)$ с теоретическими зависимостями данной характеристики, рассчитанными из плотностей электронных состояний (рис. 1). Последние были определены в соответствие с методом, используемым в [23], и выражаются интегральными функциями на основе сверток парциальных $N(E)$ ниже и выше E_F. В вычислениях учитывали правила отбора, при которых указанные $N(E)$ должны соответствовать атомам одного типа, определенной проекции спина и их квантовые числа должны отличаться на ± 1. При учете аддитивности вкладов от каждой системы спинов, полученные свертки просуммированы в соответствии с количеством атомов данного типа в элементарной ячейке. Поскольку расчеты $\sigma_{мз}(E)$ выполнены в предположении равной вероятности прямых и непрямых (с участием фононов) переходов, они носят качественный характер. Вычисленные зависимости представлены на рис. 4 совместно с экспериментальными кривыми. При их сопоставлении наблюдается довольно хорошее соответствие, однако сделанное приближение может приводить к тому, что ряд элементов тонкой структуры сравниваемых кривых не коррелируют друг с другом. Рисунок 4 показывает, что, как для бинарного, так и для тройных соединений рассчитанные спектры $\sigma_{мз}(E)$ воспроизводят основные структурные особенности эмпирических спектров. Характер их трансформации с ростом содержания марганца в общих чертах отвечает основным тенденциям, наблюдаемым в эксперименте: сужению интервала интенсивного поглощения и слиянию двух основных максимумов в единую полосу. В тройных сплавах прогнозируемые расчетом более слабые максимумы вблизи ~5 эВ также присутствуют в экспериментальных спектрах.

Природа возникновения интенсивных полос межзонного поглощения в данных соединениях, с учетом вычисленных $N(E)$, связана с происходящими в обеих спиновых системах переходами между гибридизированными зонами ниже и выше E_F. В бинарном $ErNi_2$ таковыми являются Ni $3d_\uparrow$, Er $5d_\uparrow \rightarrow$ $\rightarrow$ Ni $3d_\uparrow$, Er $5d_\uparrow$ и Ni $3d_\downarrow$, Er $5d_\downarrow \rightarrow$ Ni $3d_\downarrow$, Er $5d_\downarrow$,$4f_\downarrow$-переходы. В тройных соединениях в данный процесс включаются также Mn $3d$-состояния, которые смешиваются с Ni $3d$, Er $5d$ и Er $4f$-зонами. Поскольку локализация узких Er $4f_\downarrow$ зон в плотностях состояний всех трех сплавов выше E_F остается неизменной, то модификация формы $\sigma_{м3}(E)$ с ростом содержания Mn обусловлена изменением структуры $3d$-зон Ni и Mn ниже E_F.

Рассчитанные вклады в межзонную оптическую проводимость от каждой из спин-поляризованных зон также представлены на рис. 4. Видно, что с ростом примеси марганца вклад в оптическое поглощение, связанный с переходами в $\downarrow$-зоне, начинает существенно преобладать над вкладом от зоны с другой проекцией спина.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены самосогласованные DFT + U расчеты электронной структуры интерметаллических соединений $ErNi_{2-x}Mn_x$ (x = 0, 0.5, 1) с учетом электронных корреляций в $4f$-оболочке Er. Показано, что увеличение содержания марганца приводит к существенным изменениям в плотностях электронных состояний вблизи уровня Ферми. Для всех соединений проведен расчет энергетических зависимостей оптической проводимости в области квантового поглощения света.

Исследования оптических свойств нестехиометрических соединений $ErNi_2Mn_x$ (x = 0, 0.5, 1), проведенные эллипсометрическим методом, показали качественное соответствие полученных спектров межзонного поглощения с рассчитанной электронной структурой. Особенности экспериментальной частотной зависимости межзонной части оптической проводимости удовлетворительно воспроизводятся в рамках проведенных расчетов. Идентифицирована природа электронных состояний, формирующих спектры поглощения. Определены значения плазменных и релаксационных частот электронов проводимости.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема “Электрон” № 122021000039-4, тема “Магнит” № 122021000034-9) и Программы стратегического академического лидерства УрФУ “Приоритет-2030". Результаты исследований, представленные в разделе “Расчеты электронной структуры”, получены за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-10098 https://rscf.ru/project/18-72-10098/, ИФМ УрО РАН).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gschneidner Jr. K.A., Pecharsky V.K., Tsokol A.O.* Recent developments in magnetocaloric materials // Rep. Progr. Phys. 2005. V. 68. № 6. P. 1479–1539.
2. *Singh N.K., Suresh K.G., Nigam A.K., Malik S.K., Coelho A.A., Gama S.* Itinerant electron metamagnetism and magnetocaloric effect in RCo_2-based Laves phase compounds // J. Magn. Magn. Mater. 2007. V. 317. № 1–2. P. 68–79.
3. *Franco V., Blazquez J.S., Ipus J.J, Law J.Y., Moreno-Ramirez L.M., Conde A.* Magnetocaloric effect: From materials research to refrigeration devices // Prog. Mater. Sci. 2018. V. 93. P. 112–232.
4. *Singh N.K., Agarwal S., Suresh K.G., Nirmala R., Nigam A.K., Malik S.K.* Anomalous magnetocaloric effect and magnetoresistance in $Ho(Ni,Fe)_2$ compounds // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. № 1. P. 014452.
5. *de Souza M.V.* Investigation on the magnetocaloric effect in RNi_2 (R: Dy, Tb) melt-spun ribbon // J. Magn. Magn. Mater. 2016. V. 412. P. 11–14.
6. *von Ranke P.J., Nobrega E.P., de Oliveira I.G., Gomes A.M., Sarthour R.S.* Influence of the crystalline electrical field on the magnetocaloric effect in the series RNi_2 (R = Pr, Nd, Gd, Tb, Ho, Er). Phys. Rev. B. 2001. V. 63. № 18. P. 184406.
7. *Pawar H., Aynyas M., Sanyal S.P.* Thermoelectric properties of rare-earth based $RENi_2$ (RE = Dy, Ho and Er) Laves phase compounds // J. Magn. Magn. Mater. 2018. V. 468. P. 123–131.
8. *Ćwik J., Koshkid'ko Y., Nenkov K., Tereshina E.A., Rogacki K.* Structural, magnetic and magnetocaloric properties of $HoNi_2$ and $ErNi_2$ compounds ordered at low temperatures // J. Alloys. Compds. 2018. V. 735. P. 1088–1095.
9. *Plaza E.J.R., de Sousa V.S.R., Reis M.S., von Ranke P.J.* A comparative study of the magnetocaloric effect in RNi_2 (R = Dy, Ho, Er) intermetallic compounds // J. Alloys Compd. 2010. V. 505. № 1. P. 357–361.
10. *Balinski K., Kuznetsova T.V., Gerasimov E.G., Protasov A.V., Marchenkov V.V., Mushnikov N.V., Galakhov V.R., Mesilov V.V., Shamin S.N., Gaviko V.S., Senkovskiy B.V., Fijałkowski M., Schneider L., Ślebarski A., Chrobak A., Kuepper K.* Electrical resistivity, magnetism and electronic structure of the intermetallic $3d/4f$ Laves phase compounds $ErNi_2Mn_x$ // AIP Advances 2018. V. 8. № 1. P. 105225.
11. *Mushnikov N.V., Gerasimov E.G., Terent'ev P.B., Gaviko V.S., Inishev A.A.* Magnetic Properties of Nonstoichiometric 4f–3d Intermetallics // Phys. Met. Metallogr. 2019. V. 120. № 13. P. 1347–1353.
12. *Zhang Q.A., Dong Z.Q., Xie S.C.* Crystal structures and hydrogenation-dehydrogenation characteristics of $Er(Ni_{1-x}Mn_x)_2$ // J. Alloys Compd. 2015. V. 626. P. 189–193.
13. *Wang J.L., Marquina C., Ibarra M.R., Wu G.H.* Structure and magnetic properties of RNi_2Mn compounds (R = Tb, Dy, Ho and Er) // Phys. Rev. B 2006. V. 73. № 9. P. 094436.
14. *Wang J.L., Campbell S.J., Zeng R., Dou S.X., Kennedy S.J.* Magnetic phase transition and Mössbauer spectroscopy of $ErNi_2Mn_x$ compounds // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. № 7. P. 07E304.

15. *Инишев А.А., Герасимов Е.Г., Терентьев П.Б., Гавико В.С., Мушников Н.В.* Магнитокалорический эффект в нестехиометрических соединениях ErM_2Mn_x (M = Ni, Co, Fe) // ФММ. 2022. Т. 123. № 9. С. 929–934.
16. *Pawar H., Shugani M., Aynyas M., Sanyal S.P.* Localization effect of f-electron of heavier rare-earth atoms in $RENi_2$ (RE = Dy, Ho and Er) Laves phase compounds // Comp. Condens. Matter 2018. V. 16. P. e00316.
17. *Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Nardelli M.B., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Cococcioni M., Colonna N., Carnimeo I., Dal Corso A., de Gironcoli S., Delugas P., DiStasio Jr. R.A., Ferretti A., Floris A., Fratesi G., Fugallo G., Gebauer R., Gerstmann U., Giustino F., Gorni T., Jia J., Kawamura M., Ko H.-Y., Kokalj A., Küçükbenli E., Lazzeri M., Marsili M., Marzari N., Mauri F., Nguyen N.L., Nguyen H.-V., Otero-de-la-Roza A., Paulatto L., Poncé S., Rocca D., Sabatini R., Santra B., Schlipf M., Seitsonen A.P, Smogunov A., Timrov I., Thonhauser T., Umari P., Vast N., Wu X., Baroni S.* Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 29. № 46. P. 465901.
18. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868.
19. *Anisimov V.I., Aryasetiawan F., Lichtenstein A.I.* First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA + U // J. Phys.: Condens. Matter. 1997. V. 9. № 4. P. 767–808.
20. *Князев Ю.В., Лукоянов А.В., Кузьмин Ю.И., Мухачев Р.Д., Гупта С., Суреш К.Г.* Электронные состояния и оптические спектры соединений $ErSn_{1.1}Ge_{0.9}$ и $TmSn_{1.1}Ge_{0.9}$ // ФММ. 2020. Т. 121. № 6. С. 594–600.
21. *Topsakal M., Wentzcovitch R.M.* Accurate projected augmented wave (PAW) datasets for rare-earth elements (RE = La–Lu) // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 95. P. 263–270.
22. *Носков М.М.* Оптические свойства металлов. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1983. 220 с.
23. *Knyazev Yu.V., Lukoyanov A.V., Kuz'min Yu.I., Kuchin A.G., Nekrasov I.A.* Electronic structure, magnetic and optical properties of the intermetallic compounds R_2Fe_{17} (R = Pr, Gd) // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. № 9. P. 094410.