

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2022.11.6>

УДК: 538.955

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОБМЕННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СПЛАВАХ $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$

А.В. Головчан<sup>1,2</sup>, А.П. Каманцев<sup>2</sup>, В.Г. Шавров<sup>2</sup>, О.Е. Ковалёв<sup>1,2</sup>, А.П. Сиваченко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина  
283114, Донецк, ул. Розы Люксембург, 72

<sup>2</sup> Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН  
125009, Москва, ул. Моховая, 11, корп. 7

Статья поступила в редакцию 26 ноября 2022 г.

**Аннотация.** В представленной работе проведен *ab initio* расчет электронной структуры и межатомных обменных интегралов системы  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ , обладающей гигантским магнитокалорическим эффектом. На основе полученных межатомных обменных интегралов в рамках классической модели Гейзенберга методом Монте-Карло выполнена оценка температурного хода намагниченности. Обнаружено, что стандартная структурная модель исследуемых сплавов, предполагающая распределение атомов Si только по вершинам правильного икосаэдра (позиции типа  $\text{Fe}_{\text{II}}$ ), дает значения температуры Кюри, превышающие экспериментальные в 2-3 раза. Переход части атомов Si в центр икосаэдра (позиции  $\text{Fe}_{\text{I}}$ ) приближает теоретическую температуру Кюри к экспериментальной.

**Ключевые слова:** магнитокалорический эффект, электронная структура, межатомное обменное взаимодействие.

**Финансирование:** Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 22-29-01201.

**Автор для переписки:** Головчан Алексей Витальевич, [golovchan1@yandex.ru](mailto:golovchan1@yandex.ru)

## Введение

В последнее время усилия исследовательских групп во всем мире направлены на разработку технологии магнитного охлаждения на основе твердотельных магнитных материалов. Найлены подходящие для этих целей материалы с магнитными фазовыми переходами (ФП) и созданы прототипы магнитных холодильников, которые по совокупности функциональных характеристик пока не могут конкурировать с традиционными парокомпрессионными системами [1, 2]. Магнитные интерметаллические сплавы системы  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  широко исследуются из-за обнаруженного в них значительного магнитокалорического эффекта (МКЭ), который в интервале концентраций  $1.2 \leq x \leq 2.2$  наблюдается вблизи комнатной температуры [3, 4]. Исследования сплавов системы  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  под давлением показали сильную барическую зависимость температуры Кюри  $dT_C/dP \approx -10,6$  К/кбар [5]. Добавление примесей, расширяющих кристаллическую решетку, также позволяет варьировать температуру Кюри от 180 К до 320 К при сохранении значительного МКЭ [2, 6]. Сильнее всего смещают температуру Кюри добавки Ce, Pr, Nd [7], Cr [8] и Mn [9-11], но только последний позволяет снизить температуру Кюри до 19 К [12], что делает данный материал перспективным как рабочее тело для магнитных криокулеров [13]. Проблема поиска оптимального легирования сплавов на основе  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  связана с технологией получения кубической кристаллической структуры типа  $\text{NaZn}_{13}$  [14, 15] для формирования которой при использовании технологии порошковой металлургии необходим 14-дневный отжиг при  $\sim 1400$  К, при этом многие примеси выходят из кристаллитов  $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$  на границы или формируют другие соединения [14].

Электронная структура  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  исследовалась в ряде работ методами FP-LAPW [16, 17], FPLO [18], PAW(VASP) [16, 19, 20], KKR-CPA [21]. В них рассчитана электронная структура ферромагнитной и парамагнитной фаз, методом фиксированного спинового момента исследовано влияние объема элементарной ячейки [18], магнитных примесей [19] и междоузельных

атомов [20] на существование метамагнитного ФП и стабильность высокоспинового состояния, рассчитана фононная плотность состояний и определен температурный ход энтропии кристаллической решетки [22]. Таким образом, сопровождающимся большим МКЭ магнитный ФП в  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  рассматривается большинством авторов как метамагнитный. Вместе с тем, согласно данным нейтронографии, атомы Fe обладают существенным локальным магнитным моментом [29] и для описания МКЭ в рассматриваемой системе вполне могут применяться локализованные спиновые модели. В качестве первого шага на пути к этим моделям в данной работе полнорелятивистским методом КKR-CPA выполнен расчет межатомных обменных интегралов и определены параметры классического гамильтониана Гейзенберга для  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ .

## 1. Детали вычислений

В представленной работе с помощью полнорелятивистского пакета SPRKKR v8.6 [23, 24] в рамках теории функционала электронной плотности выполнен расчет электронной структуры и проведена оценка параметров межатомных обменных взаимодействий для выбранных сплавов  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  (табл. 1). Предварительные расчеты показали, что использование GGA приближения для обменно-корреляционной энергии (в сравнении с LDA приближением) приводит к чрезмерному завышению «теоретической» температуры Кюри, поэтому в дальнейшем обменно-корреляционная энергия вычислялась в LDA приближении [25]. Для кристаллического потенциала использовалось приближение атомных сфер. Сплавы  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  имеют кубическую кристаллическую структуру типа  $\text{NaZn}_{13}$  (пространственная группа  $Fm\bar{3}c$ , рис.1) [26], в которой атомы Fe занимают два типа позиций  $8b(\text{Fe}_I)$  и  $96i(\text{Fe}_{II})$ . 12 атомов  $\text{Fe}_{II}$  находятся в вершинах правильного икосаэдра, в центре которого находится  $\text{Fe}_I$ . Следуя литературе, предполагаем, что атомы Si равномерно распределены по позициям  $\text{Fe}_{II}$  [26]. Атомы La занимают позиции

типа  $8a$ . Параметры кристаллической решетки взяты из [26] ( $a=11,461 \text{ \AA}$ ,  $y=0,179$ ,  $z=0,1168$ ).

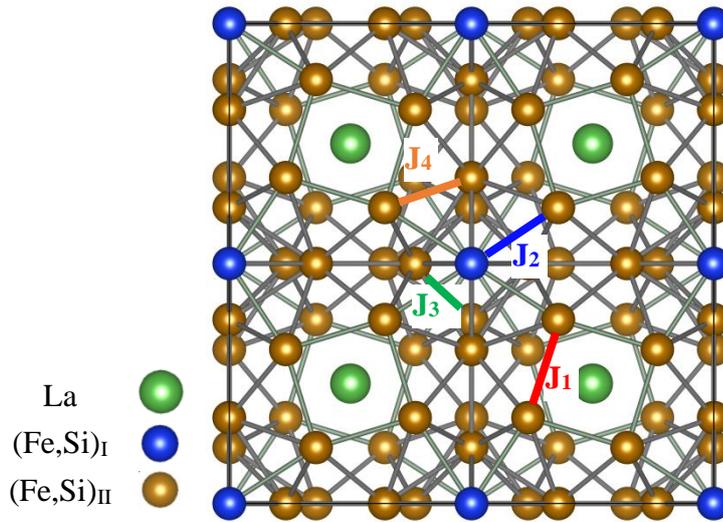


Рис. 1. Кристаллическая структура  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  и основные межатомные обменные интегралы

Межатомные обменные интегралы рассчитывались по методике [27], основанной на расчете второй производной функционала полной энергии по отклонениям избранной пары спинов от положения равновесия. В качестве основной магнитной конфигурации была для расчета обменных интегралов выбрана ферромагнитная конфигурация спинов. Используемая методика также позволяет рассчитывать также параметры взаимодействия Дзялошинского-Мория [28]. Таким образом система коллективизированных электронов заменяется эффективным спиновым гамильтонианом вида

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left[ J_{ij}^{\alpha\beta} e_i^\alpha e_j^\beta + \vec{D}_{ij} \vec{e}_i \times \vec{e}_j \right], \quad (1)$$

где  $\vec{e}_i$  – единичный вектор, указывающий направление магнитного момента на узле  $i$ ,  $J_{ij}^{\alpha\beta}$  коэффициенты матрицы обменного взаимодействия,  $\alpha, \beta = x, y$ ,  $\vec{D}_{ij}$  – параметры, описывающие взаимодействие Дзялошинского-Мория. В исследуемой системе  $\vec{D}_{ij}$  и недиагональные члены  $J_{ij}^{xy}, J_{ij}^{yx}$  не превышают  $0.3 \text{ meV}$ , поэтому в дальнейших расчетах не учитываются.

## 2. Результаты и обсуждение

Согласно проведенным расчетам, в ферромагнитной фазе  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  магнитный момент элементарной ячейки, содержащей 28 атомов, изменяется от  $37.2 \mu_B$  для  $\text{LaFe}_{10.0}\text{Si}_{3.0}$  до  $51.3 \mu_B$  для  $\text{LaFe}_{12.0}\text{Si}_{1.0}$ . Магнитные моменты атомов изменяются от  $-0.29 \mu_B$  до  $-0.37 \mu_B$  для La, от  $1.574 \mu_B$  до  $1.915 \mu_B$  для Fe в позиции  $\text{Fe}_I$ , от  $1.964 \mu_B$  до  $2.12 \mu_B$  для Fe в позиции  $\text{Fe}_{II}$ , и от  $-0.119 \mu_B$  до  $-0.17 \mu_B$  для Si, что согласуется как с данными расчета методом FPLAPW [16] для  $\text{LaFe}_{11.31}\text{Si}_{1.69}$  ( $M(\text{Fe}_I) = 2.07 \mu_B$ ,  $M(\text{Fe}_{II}) = 2.42 \mu_B$ ) и результатами нейтронографии [29] для  $\text{LaFe}_{11.4}\text{Si}_{1.6}$  ( $M(\text{Fe}_I) = 1.59 \mu_B$ ,  $M(\text{Fe}_{II}) = 2.12 \mu_B$ ).

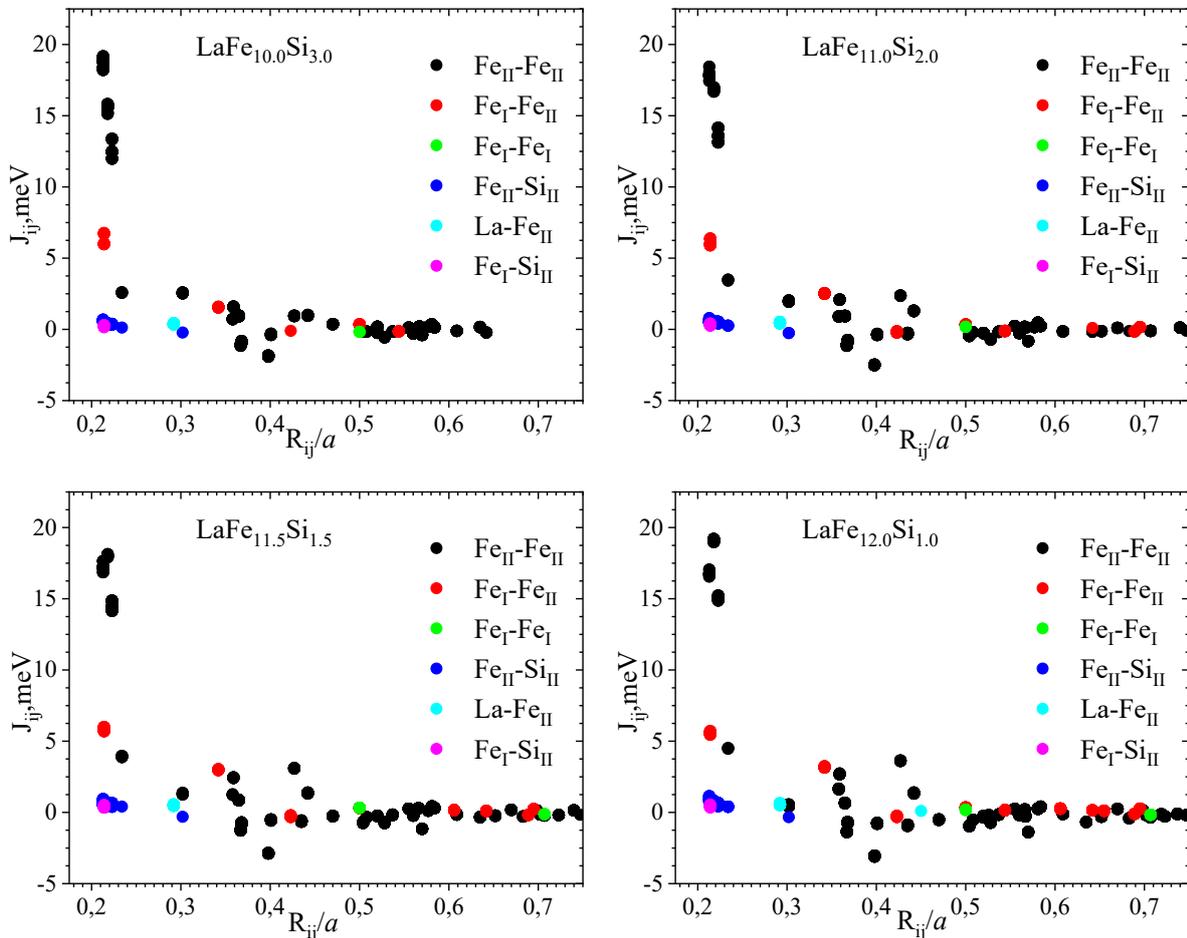


Рис. 2. Зависимость величин межатомных обменных интегралов в  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  от межатомного расстояния (в единицах постоянной решетки а)

Типичные зависимости основных обменных интегралов от межатомного расстояния для  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  показаны на рис. 2. Как видно из рисунка, обменные интегралы достаточно быстро уменьшаются с увеличением межатомного

расстояния и не превышают 1 мэВ уже на расстоянии 0.5  $a$ . Наиболее значимыми являются обменные взаимодействия между атомами Fe<sub>II</sub> (~18 мэВ). Взаимодействие Fe<sub>II</sub>-Fe<sub>I</sub> (между оболочкой икосаэдра и его центром) примерно в 3 раза меньше (~6 мэВ). Анализ позволил выделить 4 наиболее значимых обменных взаимодействия в исследуемой системе (см. также рис.1).

Таблица 1. Зависимость основных межатомных обменных интегралов от концентрации Si ( $J_{ij}$  в meV)

Тип обмена	Fe <sub>II</sub> - Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>I</sub> - Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> - Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> - Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> - Fe <sub>II</sub>	La-Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> - Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>I</sub> - Fe <sub>II</sub>
обозначение	$J_1$	$J_2$	$J_3$	$J_4$	$J_5$			
$R_{ij}/a$	0.213	0.214	0.218	0.223	0.234	0.292	0.302	0.342
LaFe <sub>13</sub>	20.3	6.5	22.9	20.2	7	1.8	-1.6	4
LaFe <sub>12</sub> Si	16.8	5.6	19.1	15	4.5	0.5	0.5	3.2
LaFe <sub>11.8</sub> Si <sub>1.2</sub>	17.0	5.8	18.5	14.8	4.1	0.5	0.9	3.1
LaFe <sub>11.5</sub> Si <sub>1.5</sub>	17.1	6	18	14.4	3.9	0.5	1.3	3
LaFe <sub>11</sub> Si <sub>2</sub>	17.9	6.1	16.9	13.6	3.5	0.5	2	2.5
LaFe <sub>10</sub> Si <sub>3</sub>	18.6	6.5	15.6	12.5	2.6	0.4	2.5	1.6

Увеличение концентрации Si в диапазоне  $x = 1..3$  приводит к разнонаправленному изменению  $J_{ij}$  (табл. 1). Обменные интегралы  $J_1$  и  $J_3$  соответствуют взаимодействию атомов Fe<sub>II</sub> из соседних икосаэдров и при увеличении содержания Si ведут себя по-разному.  $J_1$  – возрастает, а  $J_3$  – убывает. Обменные интегралы, соответствующие взаимодействию атомов Fe<sub>II</sub>, находящихся в вершинах икосаэдра –  $J_4, J_5$  ведут себя ожидаемо – убывают при увеличении содержания Si. Аналогичное поведение показывает и  $J_2$ , характеризующий взаимодействие между Fe<sub>I</sub>, находящимся в центре и атомами Fe<sub>II</sub>, расположенными в вершинах икосаэдра. Отметим, что случай малых концентраций Si требует отдельного рассмотрения в будущем, поскольку обменные интегралы, рассчитанные для гипотетического ферромагнитного LaFe<sub>13</sub> выбиваются из вышеприведенной тенденции.

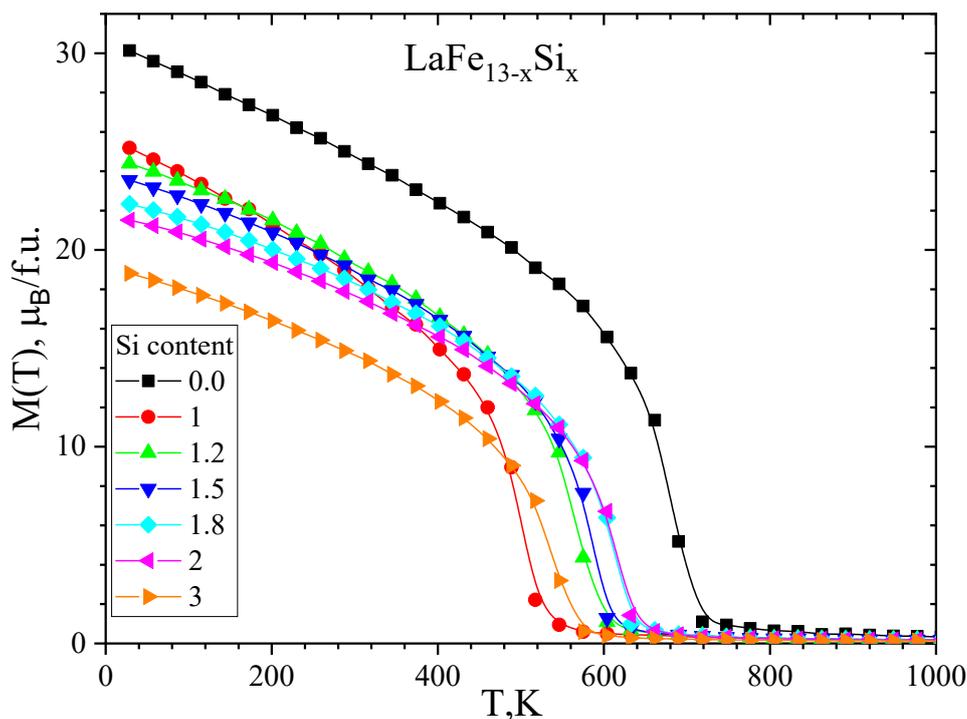


Рис. 3. Влияние Si на температурные зависимости намагниченности для сплавов  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$

На основе рассчитанных обменных интегралов в рамках классической модели Гейзенберга методом Монте-Карло [30] рассчитан температурный ход намагниченности и оценено влияние Si на температуру Кюри исследуемых сплавов (рис. 3). Вычислительная ячейка содержала  $12 \times 12 \times 12$  элементарных ячеек и 48384 атомов. Для достижения термодинамического равновесия выполнялось 5000 МК-шагов, после чего проводилось усреднение по 10000 МК-шагов. Каждый МК-шаг соответствует перевороту одного спина. Отметим, что оцененные из рис. 3 температуры Кюри значительно отличаются от экспериментальных:  $T_C = 192$  К для  $\text{LaFe}_{11.8}\text{Si}_{1.2}$ ,  $T_C = 203$  К для  $\text{LaFe}_{11.4}\text{Si}_{1.6}$ ,  $T_C = 229$  К для  $\text{LaFe}_{11.0}\text{Si}_{2.0}$  [4].

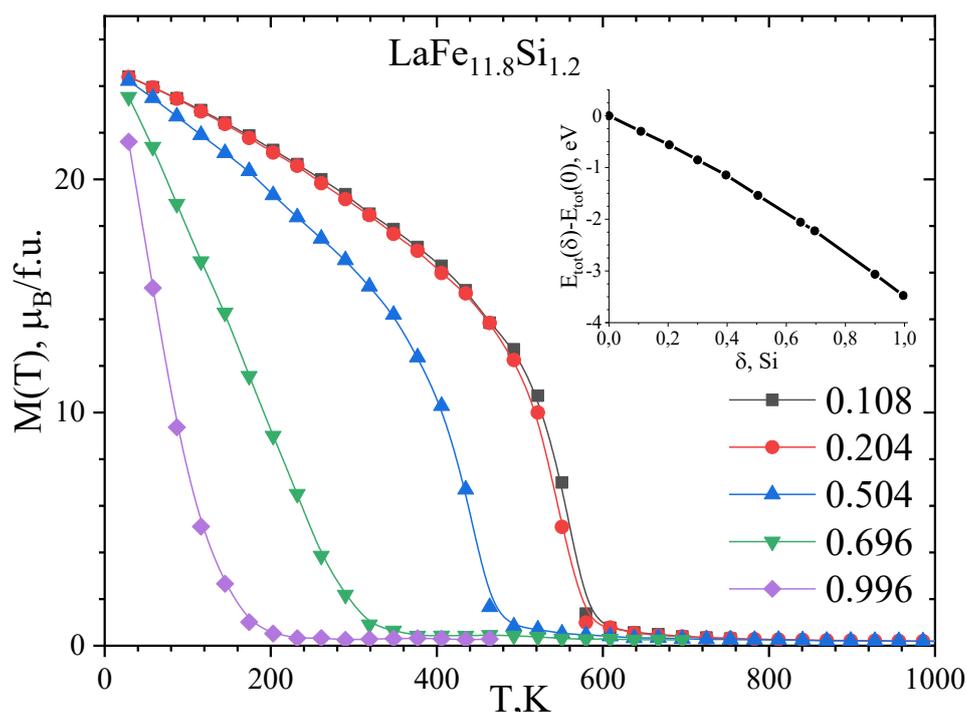


Рис. 4. Влияние перераспределения Si по позициям железа Fe<sub>I</sub>, Fe<sub>II</sub> на температурный ход намагниченности  $M(T)$  для  $\text{LaFe}_{11.8}\text{Si}_{1.2}$ . Цифрами обозначена  $\delta$  – доля атомов Si в позиции Fe<sub>I</sub>. На врезке показана зависимость полной энергии от  $\delta$

Таблица 2. Зависимость основных межатомных обменных интегралов в  $\text{LaFe}_{11.8}\text{Si}_{1.2}$  от доли кремния  $\delta$  в позиции Fe<sub>I</sub> ( $J_{ij}$  в мЭВ)

Тип обмена	Fe <sub>II</sub> -Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>I</sub> -Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> -Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> -Fe <sub>II</sub>	Fe <sub>II</sub> -Fe <sub>II</sub>
обозначение	$J_1$	$J_2$	$J_3$	$J_4$	$J_5$
$R_{ij}/a$	0.213	0.214	0.218	0.223	0.234
$\delta = 0.108$	16.3	5.6	17.8	15.5	5.1
$\delta = 0.204$	15.6	5.5	16.9	16.0	6
$\delta = 0.504$	13.75	5.3	13.7	17.4	8.9
$\delta = 0.696$	12.6	5.1	11.5	17.9	11
$\delta = 0.9$	11.1	5.15	8.55	18.1	13.4
$\delta = 0.996$	10.4	5.2	7.1	18.1	14.6

Для выяснения причины такого значительного расхождения нами было исследование влияние распределения атомов Si по позициям Fe на величины обменных взаимодействий и температурную зависимость  $M(T)$ . В качестве базового состава для исследований был выбран состав с наибольшим расхождением между теоретической ( $T_C = 610$  К) и экспериментальной

( $T_C = 192$  К [4]) температурами Кюри –  $\text{LaFe}_{11.8}\text{Si}_{1.2}$ . Расчеты выполнялись для серии сплавов  $\text{La}(\text{Fe}_{1-\delta}\text{Si}_\delta)_I(\text{Fe}_{10.8+\delta}\text{Si}_{1.2-\delta})_{II}$ , где  $\delta$  – доля атомов Si в позиции  $\text{Fe}_I$  (типа 8b). Рассчитанные методом Монте-Карло температурные зависимости намагниченности при различных  $\delta$  представлены на рис. 4. Как видно из рисунка, переход Si в центр икосаэдра сильно (в 3 раза) снижает температуру ФП из ферромагнитной в парамагнитную фазу, приближая её к экспериментальной (~180 К). Причиной этого является уменьшение обменного взаимодействия между соседними икосаэдрами (Табл. 2,  $J_1, J_2$ ) при перераспределении атомов кремния по позициям. Кроме того, такое перераспределение кремния сопровождается значительным уменьшением полной энергии элементарной ячейки (врезка на рис. 4).

## Заключение

В представленной работе рассмотрено влияние Si на магнитные свойства магнитокалорических сплавов семейства  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ . В рамках теории функционала электронной плотности рассчитаны межатомные обменные интегралы и, в рамках классической модели Гейзенберга методом Монте-Карло рассчитаны температурные зависимости намагниченности исследуемых сплавов. Обнаружено, что стандартная структурная модель исследуемых сплавов, предполагающая распределение атомов Si только по вершинам правильного икосаэдра (позиции типа  $\text{Fe}_{II}$ ) [26], дает значения температуры Кюри, превышающие экспериментальные в 2–3 раза. Переход части атомов Si в центр икосаэдра (позиции  $\text{Fe}_I$ ) приближает теоретическую температуру Кюри к экспериментальной. Такой переход является энергетически выгодным, а расхождение со стандартной структурной моделью исследуемых сплавов требует детального анализа экспериментальных данных и дальнейших расчетов.

**Благодарности:** Авторы признательны Соколовскому В.В. за обсуждение результатов данной работы.

**Финансирование:** Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 22-29-01201.

### Литература

1. Khovaylo V.V., Taskaev S.V. Magnetic Refrigeration: From Theory to Applications. *Encyclopedia of Smart Materials*. 2022. V.5. P.407-417. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-815732-9.00132-7>
2. 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. *Progress in Material Science*. 2018. V.93. P.112-232. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.10.005>
3. Fujieda S., Fujita A., Fukamichi K. Large magnetocaloric effect in  $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$  itinerant-electron metamagnetic compounds. *Applied Physics Letters*. 2002. V.81. №7. P.1276-1278. <https://doi.org/10.1063/1.1498148>
4. Bouthar A., Phejar M., Boncour V.P., Bessias L., Lassri H. Theoretical work in magnetocaloric effect of  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  compounds. *J. Supercond. Nov. Magn.* 2014. V.27. P.1795-1800. <http://dx.doi.org/10.1007/s10948-014-2542-z>
5. Jia L., Sun J.R., Wang F.W., Zhao T.Y. et al. Volume dependence of magnetic coupling in  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  based compounds. *Applied Physics Letters*. 2008. V.92. P.101904. <https://doi.org/10.1063/1.2894194>
6. Jia L., Sun J.R., Shen J., Dong Q.Y. et al. Magnetocaloric effect in the  $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$  intermetallics doped by different elements. *Journal of Applied Physics*. 2009. V.105. P.07A924. <https://doi.org/10.1063/1.3072021>
7. Jia L., Sun J.R., Shen J., Dong Q.Y. et al. Magnetic coupling between rare-earth and iron atoms in the  $\text{La}_{1-x}\text{R}_x\text{Fe}_{11.5}\text{Si}_{1.5}$  (R=Ce, Pr and Nd) intermetallics. *Applied Physics Letters*. 2008. V.92. P.182503. <https://doi.org/10.1063/1.2921781>
8. Moreno-Ramirez L.M., Romero-Muniz C., Law J.Y., Franco V. et al. Tunable first order transition in  $\text{La}(\text{Fe},\text{Cr},\text{Si})_{13}$  compounds: retaining magnetocaloric response despite a magnetic moment reduction. *Acta Materialia*. 2019. V.175. P.406. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.022>

9. Krautz M., Skokov K., Gottschall T., Teixeira C.S. et al. Systematic investigation of Mn substituted  $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$  alloys and their hydrides for room-temperature magnetocaloric application. *Journal of Alloys and Compounds*. 2014. T.598. P.27-32. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.02.015>
10. Lovell E., Bez H.N., Boldrin D.C. The  $\text{La}(\text{Fe},\text{Mn},\text{Si})_{13}\text{H}_z$  magnetic phase transition under pressure. *Physica Status Solidi*. 2017. V.11. P.1700143. <https://doi.org/10.1002/pssr.201700143>
11. Radulov I.A., Karpenkov D.Yu., Skokov K.P., Karpenkov A.Yu. et al. Production and properties of metal-bonded  $\text{La}(\text{Fe},\text{Mn},\text{Si})_{13}\text{H}_x$  composite material. *Acta Materialia*. 2017. V.127. P.389-399. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.01.054>
12. Fujieda S., Fujita A., Kawamoto N., Fukamichi K. Strong magnetocaloric effects in  $\text{La}_{1-z}\text{Ce}_z(\text{Fe}_{x-y}\text{Mn}_y\text{Si}_{1-x})_{13}$  at low temperatures. *Applied Physics Letters*. 2006. V.89. №6. P.062504. <https://doi.org/10.1063/1.2227631>
13. Suslov D.A., Shavrov V.G., Koledov V.V., Mashirov A.V. et al. Comparison of thermodynamic efficiency of cryogenic gas and solid-state magnetocaloric cycles. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*. 2020. V.5. P.612-617. [10.47475/2500-0101-2020-15420](https://doi.org/10.47475/2500-0101-2020-15420)
14. Liu J.J., Zhang Y., Xia W.X., Du J., Yan A.R. Systematic study of the microstructure and magnetocaloric effect of bulk and melt-spun ribbons of La-Pr-Fe-Si compounds. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2014. V.350. P.94-99. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.09.027>
15. Zong S.T., Wang C.L., Long Y., Fu B. et al. Solid solubility in 1:13 phase of doping element for  $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$  alloys. *AIP Advances*. 2016. V.6. P.056223. <https://doi.org/10.1063/1.4945996>
16. Boutahar A., Hlil E.K., Lassri A., Fruchart D. Magnetic and electronic studies of  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  compounds with  $1.3 \leq x \leq 1.69$ . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2013. V.347. P.161-164. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.07.040>

17. Wang G., Wang F., Di N., Shen B., Cheng Z. Hyperfine interactions and band structures of  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  intermetallic compounds with large magnetic entropy changes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2006. V.303. P.84-91. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.10.231>
18. Kuz'min M.D., Richter M. Mechanism of the strong magnetic refrigerant performance of  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ . *Physical Review B*. 2007. V.76. P.092401. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.092401>
19. Gercsi Z. Magnetic coupling in transition-metal-doped  $\text{LaSiFe}_{11.5}\text{TM}_{0.5}$  (TM = Cr, Mn, Co and Ni). *EPL*. 2015. V.110. P.47006. <http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/110/47006>
20. Gercsi Z., Fuller N., Sandeman K.G., Fujita A. Electronic structure, metamagnetism and thermopower of  $\text{LaSiFe}_{12}$  and interstitially doped  $\text{LaSiFe}_{12}$ . *J.Phys. D: Appl.Phys.* 2018. V.51. P.034003. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa9ed0>.
21. Fujita A. Relation between paramagnetic entropy and disordered local moment in  $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$  magnetocaloric compound. *APL Materials*. 2016. V.4. P.064108. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4953434>
22. Gruner M.E., Keune W., Cuenya B.R., Weis C. et al. Element-resolved thermodynamics of magnetocaloric  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ . *Physical Review Letters*. 2015. V.114. №5. P.057202. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.057202>
23. Ebert H., et al. Munich SPRKKR band structure program package, version 8.6 [web]. *Ludwig-Maximilians-Universität München*. Дата обращения: 20.11.22. URL: <https://www.ebert.cup.uni-muenchen.de/index.php/de/software/13-sprkkkr>
24. 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. V.74. P.096501. <http://doi.org/10.1088/0034-4885/74/9/096501>
25. Vosko S.H., Wilk L. Influence of an improved local-spin-density correlation-energy functional on the cohesive energy of alkali metals. *Physical Review B*. 1980. V.22. P.3812-3815. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.22.3812>

26. Liu X.B., Altounian Z., Ryan D.H. Structure and magnetic transition of  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$  compounds. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. V.15. P.7385-7394. <http://doi.org/10.1088/0953-8984/15/43/020>
27. Liechtenstein A.I., Katsnelson M.I., Antropov V.P., Gubanov V.A. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 1987. V.67. P.65-74. [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(87\)90721-9](https://doi.org/10.1016/0304-8853(87)90721-9)
28. Mankovsky S., Ebert H. Accurate scheme to calculate the interatomic Dzyaloshinskii-Moriya interaction parameters. *Physical Review B*. 2017. V.96. P.104416. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.104416>
29. Wang F., Wang G.-J., Hu F.-X., Kurbakov A., Shen B.-G., Cheng Z.-H. Strong interplay between structure and magnetism in the giant magnetocaloric intermetallic compound  $\text{LaFe}_{11.4}\text{Si}_{1.6}$ : a neutron diffraction study. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. V.15. P.5269-5278. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/15/30/309>
30. Landau L.D., Binder K. *A guide to Monte-Carlo simulation in statistical physics. Second edition*. Cambridge University Press, UK. 2005. 432 p.

**Для цитирования:**

Головчан А.В., Каманцев А.П., Шавров В.Г., Ковалев О.Е., Сиваченко А.П. Электронная структура и обменные взаимодействия в сплавах  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ . *Журнал радиоэлектроники [электронный журнал]*. 2022. №11. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2022.11.6>