

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

Е. И. Шредер^a, *А. В. Лукоянов*^{a,b*}, *А. А. Махнев*^a, *Ю. И. Кузьмин*^a,
Шубра Даш^{c**}, *Аджит К. Патра*^{c**}, *М. Васундхара*^{d**}

^a *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

^b *Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия*

^c *Central University of Rajasthan
NH-8, Bandrasindri 305817, Rajasthan, India*

^d *Polymers and Functional Materials Department, CSIR-Indian Institution of Chemical Technology
Tarnaka-500007, Hyderabad, Telangana, India*

Поступила в редакцию 6 апреля 2021 г.,
после переработки 27 мая 2021 г.
Принята к публикации 27 мая 2021 г.

Выполнены теоретические расчеты электронной структуры и измерение оптических свойств сплава Гейслера $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. Оптимизированная кристаллическая структура типа β -Mn, основанная на теории функционала плотности, представлена для $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. Обнаружено аномальное для металлов поведение оптической проводимости сплава в инфракрасной области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Такие особенности оптического спектра указывают на сложную структуру зонного спектра и высокую плотность состояний в окрестности и на уровне Ферми. Особенности на кривой оптической проводимости соответствуют определенным межзонным переходам электронов.

DOI: 10.31857/S0044451021100114

1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера на основе марганца привлекают большое внимание благодаря разнообразным и сложным магнитным фазовым диаграммам и возможным улучшенным термоэлектрическим свойствам [1]. В этой серии сплавов Гейслера антиструктурные дефекты и отклонения от стехиометрии могут привести к улучшению необходимых характеристик, что делает их перспективными для многофункциональных приложений. Недавно сплавы Гейслера Mn_2MeZ (Me — переходный металл, Z — элемент III–V групп) привлекли внимание как перспективные материалы для спинтроники, поскольку, как сообщается, обладают бесщелевой спино-

вой плотностью состояний полупроводникового типа. Система сплавов Mn_2MeAl ($Me = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$) демонстрирует сильный ферромагнетизм или компенсированный ферримагнетизм с возможностью фазовых переходов с изменением магнитной структуры [2], обсуждаются изменения электронной структуры, включая состояния полуметаллического ферромагнетика и спинового бесщелевого полупроводника.

Среди большого семейства сплавов Гейслера материалы, содержащие переходные металлы Mn и Fe, представляют интерес благодаря их химическому подобию, которое допускает богатую и сложную магнитную фазовую диаграмму [3, 4]. Более того, с точки зрения рентабельности, доступность и отсутствие редкоземельных элементов в составе, сплавы на основе Mn и Fe, являются многообещающими кандидатами для разработки новых сплавов Гейслера. В нашей предыдущей работе [5] для сплава Гейслера Mn_2FeAl было показано, что картина плот-

* E-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

** Shubhra Dash, Ajit K. Patra, M. Vasundhara

ности состояний $N(E)$ существенно различается для структур типа $L2_1$, X и β -Mn.

В настоящей работе мы сообщаем результаты изучения кристаллической и электронной структур через исследование оптических свойств сплава Гейслера $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. Цель этой работы провести структурную оптимизацию и расчеты электронной структуры, а также получить информацию об электронной структуре из экспериментального изучения оптических свойств данного сплава Гейслера и дать их интерпретацию на основе теоретических расчетов.

2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Поликристаллический образец сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ был приготовлен традиционным методом дуговой плавки с последующим отжигом, как сообщалось в нашей ранней работе [5]. Переплавка была повторена несколько раз для обеспечения лучшей однородности. Полученный слиток был отожжен в вакууме в течение 3 дней при температуре $1000^\circ C$, охлажден до $650^\circ C$ и вновь отожжен в течение 3 дней, а затем следовало медленное охлаждение со скоростью $5^\circ C/мин$. Образец в виде порошка был проанализирован на рентгеновском дифрактометре PANalytical, Empyrean, Нидерланды, в K_α -излучении Cu при комнатной температуре. Химический состав образца определен с помощью рентгеновской энерго-дисперсионной спектроскопии (EDX) на сканирующем электронном микроскопе (JEOL-SEM 5601v, Токио, Япония), найдено, что он находится в рамках номинального состава.

Зеркальные поверхности для оптических исследований были получены шлифованием образцов на микропорошках карбида бора разной дисперсности и полированием на окиси хрома. Действительная $\epsilon_1(\omega)$ и мнимая $\epsilon_2(\omega)$ части диэлектрической проницаемости измерены эллисометрическим методом Битти при комнатной температуре на воздухе в спектральной области 0.1–5 эВ (0.25–13 мкм). Точность измерений составила 2–5% в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной (ИК) областях спектра. Оптическая проводимость равна $\sigma(\omega) = \epsilon_2\omega/4\pi$, где ω — циклическая частота световой волны. Электронная структура сплава Гейслера была рассчитана в компьютерном пакете программ Quantum ESPRESSO (QE) [6] с обменно-корреляционным потенциалом в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) в версии Педью–Бурке–Эрнзенхофа (PBE). Волновые функ-

ции разложены по плоским волнам. В расчетах мы использовали те же стандартные ультрамягкие псевдопотенциалы из библиотеки QE, что и в работе [5]. В наших расчетах для достижения требуемой сходимости в цикле самосогласования использован предел энергии 60 Ry для плоских волн. Интегрирование в обратном пространстве проведено по сетке из \mathbf{k} -точек $8 \times 8 \times 8$, аналогично [5]. Код постобработки QE epsilon.x [6] использован для вычисления действительной и мнимой частей диэлектрического тензора совместно с плотностью состояний, исходя из вычисленных собственных значений и собственных векторов. В расчетах этого кода берутся межзонные переходы, т. е. вертикальные переходы, при которых сохраняется импульс электрона \mathbf{k} .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Уточнение данных рентгеновской дифракции (XRD) методом Ритвельда представлено на рис. 1. Измеренная полная картина XRD структуры типа β -Mn (пространственная группа $P4_132$) может быть проиндексирована как кубическая элементарная ячейка. Подобные наблюдения ранее сообщались для соединения $Fe_{1.5}Pd_{0.5}Mo_3N$ [7] и сплава Mn_2FeAl , полученного дуговой или индукционной плавкой [5, 8]. Не обнаружено никаких следов какой-либо второй фазы, что указывало на то, что сплав однофазный. Уточнение экспериментальных данных по Ритвельду с использованием пакета FULLPROF было выполнено в рамках простран-

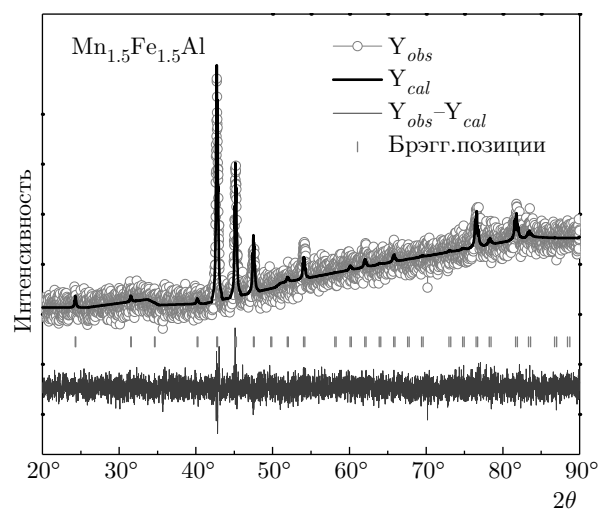


Рис. 1. (В цвете онлайн) Рентгенограмма сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ при комнатной температуре вместе с данными уточнения Ритвельда

Таблица. Рассчитанные в данной работе оптимизированные координаты ионов в $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

Ион	x	y	z
Al	0.0717	0.0690	0.0744
Fe	0.3213	0.1920	-0.1896
Fe	-0.2105	0.3139	0.1697
Fe	0.1925	-0.1908	0.3208
Fe	-0.3228	-0.3178	-0.3145
Mn1	-0.4426	0.4427	-0.0631
Mn1	0.4435	-0.0635	-0.4275
Al	-0.0669	-0.4486	0.4231
Fe	-0.3055	0.0349	-0.1100
Fe	-0.1239	-0.2934	0.0433
Al	0.0481	-0.1244	-0.2960
Fe	0.3750	-0.1956	-0.0451
Al	-0.0518	0.3677	-0.1974
Al	-0.1972	-0.0411	0.3668
Mn2	0.4557	0.1134	0.1973
Mn2	0.2035	0.4601	0.1171
Mn2	0.1459	0.2032	0.4609
Mn2	-0.4526	-0.3671	0.2928
Mn2	0.2975	-0.4480	-0.3670
Mn2	-0.3810	0.2934	-0.4559

ственной группы $P4_132$ с выбором функций псевдо-Фойгта и полиномиальных функций соответственно для определения формы пика и уточнения фона. Уточненный параметр решетки $a = 6.34(4) \text{ \AA}$.

При вычислениях электронной структуры было использовано экспериментальное значение параметра решетки для оптимизированных позиций атомов. Оптимизированные координаты ионов в сплаве $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$, вычисленные в работе, приведены в таблице. Кривые плотности состояний (DOS) и изображение кристаллической структуры, полученные в программном пакете XCrysDen ((X-Window) Crystalline Structures and Densities) [9], приведены на рис. 2 и 3. Была использована структура типа β -Mn близкого по составу сплава Mn_2FeAl [5]

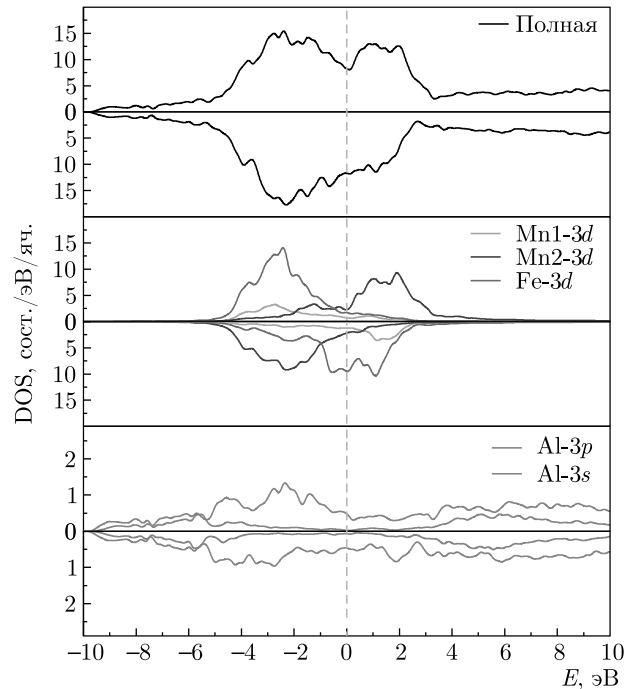


Рис. 2. (В цвете онлайн) Полная и частичная плотности состояний сплава Гейслера $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

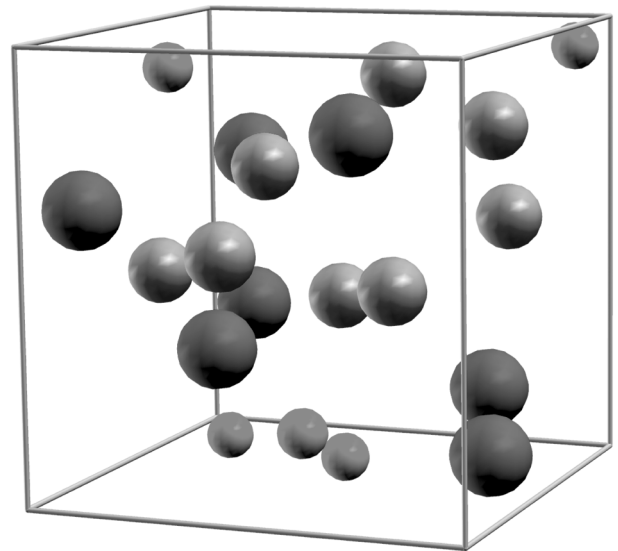


Рис. 3. (В цвете онлайн) Оптимизированная кристаллическая структура $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$, где Al показан маленькими зелеными сферами, Fe — большими красными сферами, Mn — серыми сферами

с $12d$ -позициями, занятыми атомами 3 Al, 3 Fe, 6 Mn, и $8c$, занятыми атомами 2 Al, 4 Fe, 2 Mn. Рассчитанный полный магнитный момент определен как $1.76 \mu_B$ /форм. ед. Возникающее в результате магнитное упорядочение в этих конфигурациях

состоит из ферро- и антиферромагнитно расположенных атомов Mn, антиферромагнитно упорядоченных в основном в позициях 8с. Средний магнитный момент определен соответственно как 3.1 (Mn2) и 2.2 (Mn1), 0.7 (Fe) и 0.2 (Al) μ_B . В результате они дают разные вклады в плотность состояний и результирующий магнитный момент. Для Mn_2FeAl расчеты электронной структуры [5] привели к той же структуре и типу упорядочения со средним магнитным моментом на атомах Mn, Fe и Al соответственно как 3.1, 1.1 и $0.2\mu_B$ с полным магнитным моментом $4.4\mu_B$ /форм. ед. Разница полного магнитного момента сплавов $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ и Mn_2FeAl [5] обусловлена разным числом ионов Mn и Fe в ячейке, ионы Fe и Mn1 упорядочены антиферромагнитно ионам Mn2. Таким образом, $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ оказался ферромагнетиком с более низким полным магнитным моментом в сравнении с Mn_2FeAl (все данные для Mn_2FeAl взяты из работы [5]).

На рис. 2 приведены кривые плотности состояний (DOS) сплава. Нужно отметить существенную разницу картин плотности $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1 для зон со спином вверх и вниз. В результате магнитные моменты атомов Fe, Mn1 направлены в одну сторону, атомов Mn2 — в противоположную. Таким образом, мы видим ферромагнетик. Плотность состояний на уровне Ферми для обеих спиновых подсистем достаточно высокая. В сравнении со сплавом Mn_2FeAl с той же кристаллической структурой [5] обе проекции спина более симметричны, поскольку наиболее спин-поляризованные состояния ионов Mn2 в Mn_2FeAl , менее интенсивные в $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$, частично замещены ионами Fe. С другой стороны, большее число ионов Fe со спиновой поляризацией дает дополнительные электронные состояния в занятой части со спином «вверх» и свободной части со спином «вниз» в сравнении с Mn_2FeAl . Для спинов «вверх» вклад в плотность состояний происходит от $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1. Для спинов «вниз» $3d$ -состояния атомов Fe дают основной вклад. Плотность $3p$ - $3s$ -состояний Al низкая и равномерно распределена по широкой области энергий.

Оптические свойства металлов определяются комплексной диэлектрической проницаемостью $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$ [10]. В ИК-области спектра основную роль в формировании оптических свойств играет механизм внутризонного ускорения электронов полем световой волны, так называемый вклад Друде. Вклад этого механизма определяется параметрами электронов проводимости: плазменной частотой Ω и частотой релаксации γ , и убывает

пропорционально квадрату частоты падающего света ω^2 . Для кубических кристаллов Ω^2 связана с потоком скорости электронов через поверхность Ферми. Частота релаксации γ включает все механизмы рассеяния электронов. Отрицательные значения действительной части диэлектрической проницаемости ϵ_1 в ИК-области спектра является оптическим критерием металлического типа проводимости.

В видимой и ультрафиолетовой областях спектра основным является механизм квантового поглощения света с переходом электронов с занятого уровня на свободный, т.е. межзонное поглощение, дающее информацию об электронном энергетическом спектре. Вклад межзонного поглощения $\epsilon_2^i(\omega)$ определяется выражением [10]

$$\epsilon_2^i(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{3m^2 \omega^2} \sum_{ij} \int \frac{2}{(2\pi)^3} [f(E_{ik}) - f(E_{jk})] \times \frac{|M_{ij}(\mathbf{k})|^2 dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij}|}. \quad (1)$$

Здесь $f(E_{ik})$, $f(E_{jk})$ — функция распределения электронов, $|M_{ij}(\mathbf{k})|$ — вероятность перехода,

$$\hbar \omega_{ij} = E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}) \quad (2)$$

— разность энергий между свободной и занятой зонами,

$$\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij} = \nabla_{\mathbf{k}} [E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})] \quad (3)$$

— градиент разности энергий. Комплексная диэлектрическая проницаемость представляет сумму вкладов от этих механизмов, которые могут сосуществовать в некоторой области энергий.

Дисперсия действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 части диэлектрической проницаемости представлена на рис. 4. В ИК-области спектра наблюдается монотонное увеличение ϵ_2 и $|\epsilon_1|$ с уменьшением энергии падающего света вплоть до границы исследованного интервала. Это указывает на металлический характер зависимости данных параметров. Однако абсолютные значения невелики, значительно ниже тех, которые характерны для хороших металлов, и указывает на то, что исследуемый сплав является плохим металлом.

Можно отметить резкое увеличение $|\epsilon_1|$ при энергиях $E < 0.25$ эВ. По-видимому, именно в этой области становится заметным вклад внутризонных переходов. Попытаемся оценить величину Ω^2 из анализа зависимости $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$ в ИК-области спектра, которая в длинноволновой области

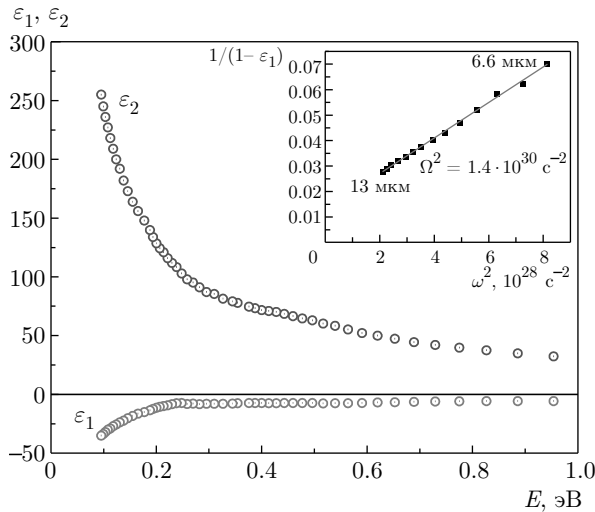


Рис. 4. (В цвете онлайн) Дисперсия действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 частей диэлектрической проницаемости сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. На вставке показана зависимость $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$ в области 6.6–13 мкм

6.6–13 мкм (0.95–0.19 эВ) описывается прямой линией, см. вставку на рис. 4. Наклон прямой соответствует отношению $1/\Omega^2$ и дает возможность оценить квадрат плазменной частоты электронов проводимости как $\Omega^2 \sim 1.4 \cdot 10^{30} \text{ c}^{-2}$.

Для кубических кристаллов квадрат плазменной частоты Ω^2 определяется скоростью электронов на поверхности Ферми, которая, в свою очередь, связана с плотностью состояний на уровне Ферми [10]:

$$\Omega^2 = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar} \int v dS_F, N(E_F) = \frac{1}{4\pi^3\hbar} \int \frac{dS_F}{v_s}. \quad (4)$$

Здесь v — абсолютная величина зонной скорости электрона, v_s — по полосе s [10]. Согласно зонным расчетам, на уровне Ферми отмечена высокая плотность состояний, образованная d -состояниями атомов Mn и Fe (рис. 2). Поэтому естественно ожидать низкие значения квадрата плазменной частоты Ω^2 и связанной с ней эффективной концентрации свободных носителей $N_{eff} = \Omega^2 m/4^2$ (e , m — заряд и масса свободного электрона). Установлено, что $N_{eff} \sim 4.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, и это значение на 1–2 порядка ниже значений, характерных для хороших металлов.

Основной особенностью спектра оптического поглощения сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ является отсутствие друдевского подъема на кривой $\sigma(\omega)$, вплоть до границы исследованного диапазона (рис. 5). Вместе с данными по диэлектрической проницаемости (рис. 4) мы можем рассматривать исследуемый сплав как плохой металл [10]. Спектр оптической

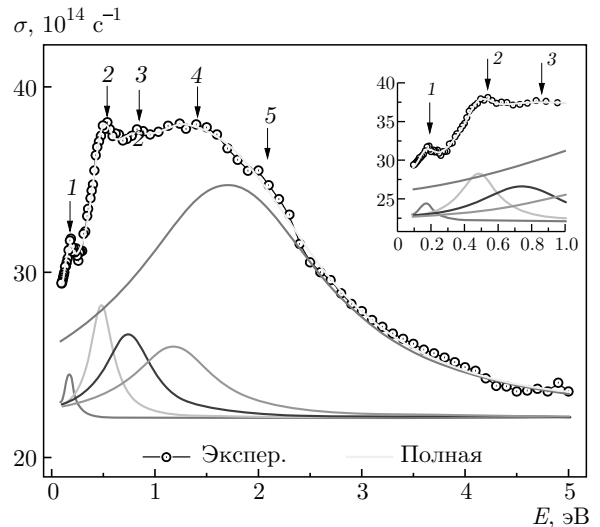


Рис. 5. (В цвете онлайн) Дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. На вставке дан крупный ИК-план. Цветные линии — это разложение кривой $\sigma(\omega)$ на лоренцевы пики

проводимости представляет полосу поглощения, где можно выделить пики при энергиях 0.18, 0.54, 0.83, 1.4 эВ, «плечо» при 1.9–2.3 эВ. Затем интенсивность поглощения медленно уменьшается до уровня $\sigma \sim 24 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$. Поскольку кривая оптической проводимости имеет несколько пиков, выполним ее разложение на лоренцевские пики (цветные линии на рис. 5). Разложение показало, что зона поглощения может быть представлена суммой вкладов 5 осцилляторов.

Следует отметить отсутствие друдевского подъема на кривой $\sigma(\omega)$, что аномально для металлов и сплавов. Аномальное поведение $\sigma(\omega)$ ранее было отмечено для некоторых сплавов Гейслера со структурой $L2_1$, например, Fe_2VAl , $Mn_{1.8}Co_{1.2}Al$, Co_2MnAl , и было связано с наличием энергетической щели в зонном спектре для одной или обеих спиновых подсистем [11–14]. Однако для сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ ситуация другая. Зонные расчеты, проведенные для структуры β -Mn, показали высокую плотность состояний как на уровне Ферми, так и в его окрестности (3–4 эВ) в обеих спиновых подсистемах.

Анализ особенностей межзонного поглощения проведем на основе вычисления зонного спектра и плотности состояний $N(E)$ сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$, см. рис. 2. Дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ определяется реальной картиной электронного спектра материала, так что представляет интерес сравнить экспериментальную зависимость с теоретическими кривыми, полученными из $E(k)$ в моде-

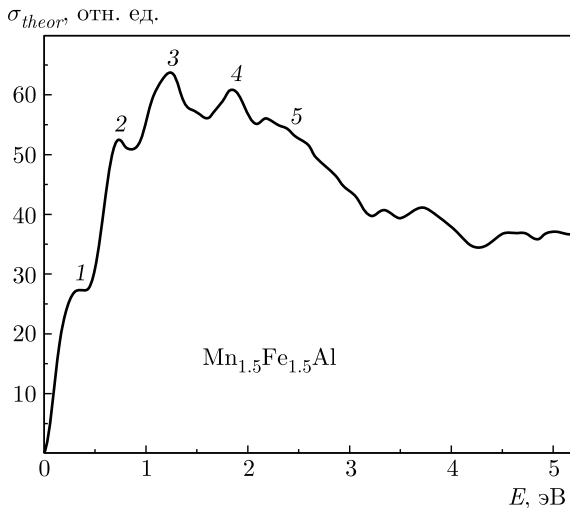


Рис. 6. Расчетный спектр межзонной оптической проводимости сплава $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

ли прямых переходов. Расчетный спектр межзонной части оптической проводимости приведен на рис. 6.

В согласии с экспериментом, основные особенности спектра оптической проводимости ясно проявились в вычислениях, см. рис. 5 и 6. Следует отметить, что экспериментальная и теоретическая кривые слегка отличаются по ширине, энергетическому положению и интенсивности пиков поглощения в исследованной спектральной области. Согласно зонным расчетам, плотность состояний на уровне Ферми в обеих спиновых подсистемах довольно высокая, рис. 2. Расчетные кривые межзонной оптической проводимости $\sigma(\omega)$ предсказывают наличие довольно высокого низкоэнергетического вклада. На основе расчетов и с учетом распределения парциальной плотности состояний можно заключить следующее. Переходы с участием $3d$ -состояния Fe со спином вниз формируют пики 1, 2 и 3, см. рис. 5. При более высоких энергиях становится заметным вклад от переходов с участием $3d$ -состояний Mn2, Mn1 и Fe в обеих спиновых подсистемах: пики 3, 4, «плечо» 5. Вклад от межзонных переходов с участием s - и p -состояний незначителен из-за малости их парциальных плотностей состояний.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены расчеты электронной структуры и изучение оптических свойств сплава Гейслера $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. Оптимизированная кристаллическая структура типа β -Mn представлена для $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$. Для электронной структуры

$Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ в структуре β -Mn мы получили металлический тип плотности состояний с более низкой плотностью для одной спиновой проекции, соответствующей ферромагнитному упорядочению магнитных моментов Mn. Установлено, что некоторые ионы Mn образуют антиферромагнитное упорядочение с другими магнитными моментами Mn и Fe подобно ранее изученному Mn_2FeAl . Анализ дисперсии диэлектрической проницаемости в ИК-области спектра указывает на низкие значения эффективной концентрации носителей заряда. Это позволяет охарактеризовать исследуемый сплав как плохой металл. Обнаружено anomalous поведение оптической проводимости сплава в ИК-области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Спектр оптической проводимости имеет сложную частотную зависимость. Особенности на кривой сопоставлены с определенными межзонными переходами электронов. Полученная картина зонного спектра позволяет нам качественно объяснить особенности спектра оптического поглощения и дисперсию диэлектрической проницаемости.

Благодарности. Авторы благодарят В. Е. Шилова за помощь с обработкой плотностей состояний.

Финансирование. Представленное исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-52-45008 и ДНТ Нью Дели, Индия (проект INT/RUS/RFBR/379). Авторы подтверждают выполнение государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5) (расчет теоретической проводимости). М. Васундхара подтверждает поддержку, оказанную Департаментом K&IM of CSIR-Индийский институт Химических Технологий (ICT/Pubs./2021/065).

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Graf, S. S. P. Parkin, and C. Felser, IEEE Trans. Magn. **47**, 367 (2011).
2. В. В. Марченков, В. Ю. Ирхин, Ю. А. Первозчикова, П. Б. Терентьев, А. А. Семянникова, Е. Б. Марченкова, М. Эйстерер, ЖЭТФ **155**, 1083 (2019).
3. L. Wollmann, S. Chadov, J. Kübler, and C. Felser, Phys. Rev. B. **90**, 214420 (2014).

4. Z. J. Yang, Q. H. Gao, H. N. Xiong, J. X. Shao, X. W. Wang, and Z. J. Xu, *Sci. Rep.* **7**, 16522 (2017).
5. Shubhra Dash, A. V. Lukoyanov, Nancy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **513**, 167205 (2020).
6. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter.* **29**, 465901 (2017).
7. T. J. Prior, D. Nguyen-Manh, V. J. Couper, and P. D. Battle, *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, 2273 (2004).
8. I. Gavrikov, M. Seredina, M. Zheleznyy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **478**, 55 (2019).
9. A. Kokalj, *J. Mol. Graph. Model.* **17**, 176 (1999).
10. A. V. Sokolov, *Optical Properties of Metals*, Blackie and Son Limited, London and Glasgow (1965).
11. E. I. Shreder, A. D. Svyazhin, and A. A. Makhnev, *Opt. Spectr.* **119**, 969 (2015).
12. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and K. G. Suresh, *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 965 (2017).
13. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and V. V. Marchenkov, *Phys. Met. Metallogr.* **119**, 1068 (2018).
14. E. I. Shreder, M. M. Kirillova, and V. P. Dyakina, *Phys. Met. Metallogr.* **81**, 406 (1996).