

ИССЛЕДОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ PdMnSn И PtMnSn, ИМЕЮЩИХ СТРУКТУРУ $C1_b$, С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСЧЕТОВ *ab initio*

Н. Арикан^{a*}, Я. Г. Илдуз^{b**}, Г. Д. Илдуз^c

^a Department of Mathematics and Science, Education Faculty, Ahi Evran University, 40100, Kırşehir, Turkey

^b Department of Electronics and Automation, Kırıkkale University, 71450, Kırıkkale, Turkey

^c Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, Kırıkkale University, 71450, Kırıkkale, Turkey

Поступила в редакцию 9 июня 2019 г.,
после переработки 8 сентября 2019 г.
Принята к публикации 20 сентября 2019 г.

(Перевод с английского)

FIRST-PRINCIPLES STUDY ON PdMnSn AND PtMnSn COMPOUNDS IN $C1_b$ STRUCTURE

Nihat Arıkan, Yasin Göktürk Yıldız, Gökçen Dikici Yıldız

С помощью расчетов *ab initio* в рамках теории функционала электронной плотности в обобщенном градиентном приближении исследованы электронные, механические и решеточно-колебательные свойства соединений PdMnSn и PtMnSn, имеющих структуру $C1_b$, а также их стабильность. Вычисленные постоянные решетки PdMnSn и PtMnSn находятся в согласии с опубликованными ранее экспериментальными и теоретическими данными. Константы упругости для PdMnSn и PtMnSn со структурой $C1_b$ были получены с помощью метода расчета энергий деформации. Для полученных значений трех независимых констант упругой деформации оба соединения обладают механической стабильностью в кристаллической структуре типа $C1$ и удовлетворяют критериям стабильности. Для указанных соединений были рассчитаны электронная структура, полная и парциальная плотности состояний, а также полный магнитный момент и проведено сравнение с уже известными результатами. Динамические свойства соединений PdMnSn и PtMnSn были исследованы с помощью теории возмущения функционала электронной плотности. Оба вещества обладают динамической стабильностью благодаря отсутствию мнимых фононных частот. Дополнительно было найдено, что удельные теплоемкости обоих соединений быстро возрастают в интервале температур от нуля до 300 К.

DOI: 10.31857/S0044451020050065

1. ВВЕДЕНИЕ

Тройные сплавы Гейслера относятся к двум отдельным семействам, в которые входят так называемые полные сплавы Гейслера, которые кристаллизуются в структуре $L2_1$ и имеют формулу X_2YZ

[1], и полугейслеровы сплавы, имеющие общую формулу XYZ и кристаллизующиеся по типу AlLiSi ($C1_b$) [2–4]. Здесь X — это типичный тяжелый переходный металл, Y — редкоземельный или переходный металл, а Z — элемент основной подгруппы. Во многих работах, использующих различные экспериментальные и теоретические подходы, исследовалась структура, фазовые переходы, конфигурация электронных зон, свойства химических связей, зарядовой плотности, перенос зарядов и механические

* E-mail: narikan@ahievran.edu.tr

** E-mail: gokturk@kku.edu.tr

кие свойства соединения PtMnSn [5–19]. Структурные и магнитные свойства соединения PtMnSn измерялись с помощью рентгеновских, магнитных и ЯМР-методов, как описано в работе [5]. В работе [6] был измерен магнитный момент PtMnSn и других $C1_b$ -соединений. Кристаллическая структура и магнитные свойства PtMnSn исследовались с помощью рентгеновского и магнитного анализов [7]. В работе [8] были измерены поля сверхтонкой структуры с помощью техники зависящих от времени возмущенных угловых корреляций (РАС). Мессбауэровские измерения, а также измерения намагниченности и измерения методом рентгеновской порошковой дифракции были выполнены для разупорядоченных ферромагнетиков PtMnSn в работе [10]. С помощью метода линейных орбиталей (LMTO) в работе [11] были вычислены электронная структура и спектры рентгеновского магнитного кругового дихроизма для соединения PtMnSn. В работе [12] были исследованы электронная структура, химическая связь, плотность заряда, перенос заряда и магнитные свойства соединения PtMnSn с помощью метода LMTO в представлении сильной связи (ТВ) в приближении атомных сфер (ASA). Устойчивость структуры, электронные свойства, константы упругости, фазовые переходы и магнитные свойства соединения PtMnSn изучались в работе [13] при использовании пакета программ VASP. Кроме того, структура электронных зон и упругие свойства соединения PtMnSn были определены с помощью программы VASP с обобщенным градиентным приближением (GGA) [14, 15]. В работе [3] была определена кристаллическая структура и измерены микроструктурные и магнитные свойства соединения PtMnSn. Температура Кюри, кристаллографические и магнитные свойства соединения PtMnSn на основе марганца исследовались в публикации [16]. Температуры Кюри и Нееля, величины магнитных моментов, удельного электрического сопротивления, частоты плазменных колебаний, частоты релаксации и оптическое сопротивление соединения PtMnSn в кристаллической структуре $C1_b$ были опубликованы в работе [17]. Доступных данных для соединения PdMnSn крайне мало. В работе [18] исследовалась спиновая проекция электронной зонной структуры соединения PdMnSn в фазе $C1_b$ с помощью метода присоединенных сферических волн. Свойства фононов важны для понимания динамических свойств твердых тел. Знание фононных свойств необходимо для понимания физических свойств, включая фазовые переходы, термодинамическую устойчивость, транспортные и тепло-

вые свойства. Поиск по имеющейся литературе показал, что опубликованных данных по фононным свойствам обоих соединений нет. Для того чтобы разобраться в них, в этой работе проведены расчеты *ab initio* свойств основного состояния соединений PdMnSn и PtMnSn в фазе $C1_b$, включая постоянные решетки, электронную зонную структуру, упругие, термодинамические, фононные свойства, а также пластичность.

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Расчеты *ab initio* проводились с использованием пакета компьютерных программ Quantum-ESPRESSO [19]. Для обменно-корреляционного потенциала мы использовали приближение PBE [20]. Волновые функции раскладывались по базису плоских волн с обрезкой по кинетической энергии 40 Ry для структуры $C1_b$. Зарядовая плотность электронов вычислялась с обрезкой по кинетической энергии 400 Ry. Порог сходимости выбирался равным 10⁻⁹ Ry с величиной смешивания $\beta = 0.7$ для обеспечения адекватной точности результатов. Сходимость по энергии в 1 mRy на атом была обеспечена посредством выбора сетки 10 × 10 × 10 k -точек Монкхорста – Пака [21], покрывающей всю зону Бриллюэна.

Для того чтобы найти полную дисперсию фононов и плотность состояний, мы определяли восемь динамических матриц на сетке q -точек размером 4 × 4 × 4. Для определения динамических матриц при любых значениях волновых векторов использовалась обратная свертка Фурье. Используя вычисленные значения фононных частот и плотности состояний, с помощью квазигармонического подхода (QHA) [22] мы определили зависимость удельной теплоемкости при постоянном объеме C_v от температуры.

Одним из источников важной информации о механических и динамических свойствах материалов являются константы упругости. Для кубических материалов имеются три независимые константы упругости (C_{11} , C_{12} , C_{44}). Значения этих трех констант упругости использовались при определении разности энергий возмущенной и невозмущенной ячеек решетки. Вначале можно вычислить константы упругости, а затем определить связанные с ними параметры кристаллической решетки, такие как модуль объемного сжатия (B), модуль сдвига (G) и модуль Юнга (E). Модуль объемного сжатия является мерой сопротивляемости материала, под-

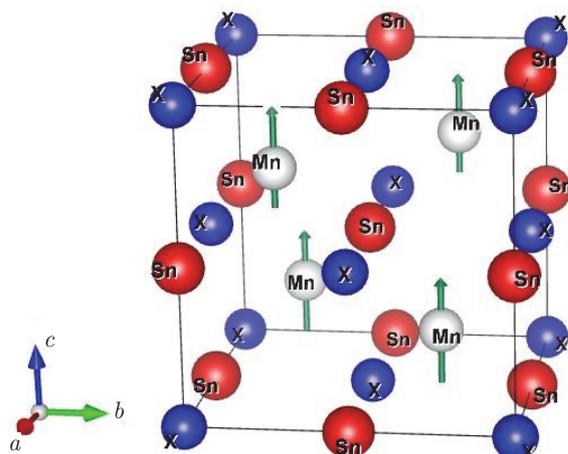


Рис. 1. Структура $C1_b$ -соединений PdMnSn и PtMnSn и спины атомов Mn, ориентированные вдоль оси c

вергнутого всестороннему сжатию, и дается формулой

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3. \quad (1)$$

Модуль сдвига, обозначаемый G , определяется как отношение сдвигового напряжения к величине деформации сдвига:

$$G = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5. \quad (2)$$

Модуль Юнга является мерой твердости материала и рассчитывается на основании объемного модуля и модуля сдвига:

$$E = 9BG/(3B + G). \quad (3)$$

Фактор анизотропии (A) кристаллов кубической симметрии определяет величину анизотропии в сравнении с изотропным материалом, информация о которой является важной в технике:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}. \quad (4)$$

Коэффициент Пуассона (σ) дает детальную информацию о типе химической связи в веществе и определяется как степень продольного растяжения при поперечном сжатии:

$$\sigma = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{3B} \right). \quad (5)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследованные соединения PdMnSn и PtMnSn являются полугейслеровыми сплавами и кристаллизуются в фазе $C1_b$, соответствующей пространственной группе $F43m$ (№ 216). Структура типа $C1_b$ соединений PdMnSn и PtMnSn, состоящая из одной молекулы с тремя атомами на элементарную ячейку, а также спины атомов Mn, ориентированные вдоль оси c , показаны на рис. 1. Таким образом, информация о структуре этих материалов полностью определяется величиной параметра решетки a . Чтобы определить структурные характеристики соединений PdMnSn и PtMnSn, выполнялись вычисления полных энергий как функций параметра решетки. На основе вычисленных полных энергий, пользуясь уравнением состояния Мурнагана [23], мы определяли параметры структуры, а именно, постоянную решетки (a), модуль объемного сжатия (B) и его производную по давлению (B'). Вычисленные параметры структуры соединений PdMnSn и PtMnSn приведены в табл. 1, и там же приведено сравнение с имеющимися данными. Параметр решетки a , модуль объемного сжатия и его производная по давлению приведены в табл. 1 вместе с опубликованными ранее экспериментальными и теоретическими значениями [5–13]. В большинстве теоретических работ, несмотря на то что в них используются разные вычислительные подходы, получается близкий к экспериментальному значению параметр решетки, который варьируется в довольно широком диапазоне от 6.129 Å до 6.264 Å. Параметр решетки, рассчитанный нами для соединения PtMnSn, оказался меньше, чем значения, полученные в эксперименте. При расчетах в обобщенном градиентном приближении (GGA) экспериментальное значение параметра решетки оказывается больше. Однако в ряду соединений с платиной, содержащих Sn, Sb, Te, происходит небольшой рост числа валентных электронов и наблюдается уменьшение параметра решетки [11]. Как и в случае TiNiSn, расчеты в приближениях LDA и GGA весьма сильно недооценивают величину параметра решетки, в то время как данные эксперимента демонстрируют противоположную тенденцию и переоценивают его [24]. Мы сделали расчет суммарных магнитных моментов соединений PdMnSn и PtMnSn. Суммарный магнитный момент сплавов Гейслера подчиняется простому правилу Слэтера – Полинга (СП-правило) [25] $M = Z - 18$, где Z – полное количество валентных электронов в элементарной ячейке. Величина Z определяется как сумма количеств электронов с основным направлением

Таблица 1. Вычисленные значения постоянной решетки a , модуля объемного сжатия B и полного магнитного момента PdMnSn и PtMnSn

Соединение	Ref.	a , Å	B , ГПа	B' , ГПа	M , μ_B
PdMnSn	Данная работа	6.095	81	5.43	3.61
PtMnSn	Данная работа	6.068	96.5	5.87	3.591
	Экспер. [3]	6.261	–	–	3.50
	Экспер. [5]	6.201	–	–	3.04
	Теория [6]	–	–	–	3.60
	Экспер. [7]	6.241	–	–	3.25
	Экспер. [8]	–	–	–	3.95
	FLAPW [9]	6.204	–	–	3.96
	Экспер. [10]	6.262	–	–	3.45
	FP-LMTO [11]	6.182	–	–	3.88
	TB-LMTO-ASA [12]	6.264	–	–	3.54
	VASP [13]	6.264	–	–	3.54
	VASP [14]	6.129	–	–	3.487
	VASP [15]	6.222	–	–	3.693
	Экспер. [16]	6.264	–	–	3.42
	Экспер. [17]	–	–	–	3.57

Таблица 2. Вычисленные константы упругости (C_{ij1}) соединений PdMnSn и PtMnSn

Соединение	Ref.	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$P_C = C_{12} - C_{44}$
PdMnSn	Данная работа	113.339	95.630	9.290	86.340
PtMnSn	Данная работа	139.574	110.926	12.526	98.400
	Ref. [13]	214.65	141.01	35.09	105.920
	VASP [14]	103	79	16	63
	VASP [15]	134	95	31	64

спина (вверх) и неосновным направлением (вниз). Таким образом, для Z имеем

$$\begin{aligned} Z &= N\uparrow + N\downarrow, \\ M &= N\uparrow - N\downarrow \rightarrow M = Z - 2N\uparrow. \end{aligned} \quad (6)$$

Вычисленные суммарные магнитные моменты оказались равны $3.61\mu_B$ и $3.591\mu_B$ для ферромагнитных соединений соответственно PdMnSn и PtMnSn,

что согласуется с СП-правилом. Вычисленные суммарные магнитные моменты вдоль оси c приведены в табл. 1 вместе с известными из других работ экспериментальными и теоретическими значениями [5–17].

Константы упругости характеризуют механические свойства материала и часто бывают полезны при оценке его механической стабильности. Рас-

Таблица 3. Вычисленные значения модуля сдвига G , B/G , модуля Юнга E , коэффициента Пуассона σ , фактора анизотропии A для соединений PdMnSn и PtMnSn

Соединение		B	G , ГПа	B/G	E , ГПа	σ	A
PdMnSn	Данная работа	101.533	9.113	11.141	26.547	0.45	1.05
PtMnSn	Данная работа	120.477	13.216	9.115	38.171	0.44	0.87
	VASP [13]	129.77	35.78	3.626	98.305	0.37	0.95
	VASP [14]	87	14	6.214	39.861	0.42	0.27
	VASP [15]	108	26	3.857	72.205	0.39	1.59

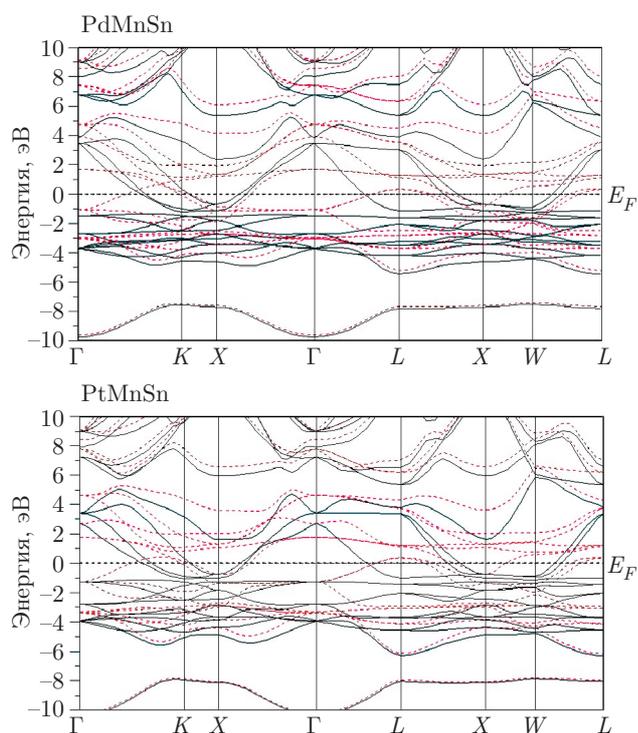


Рис. 2. Профили энергетических зон для обеих ориентаций электронного спина соединений PdMnSn и PtMnSn: сплошные линии — спин вверх, штриховые линии — спин вниз

считанные значения B , C_{11} , C_{12} , C_{44} соединений PtMnSn и PdMnSn приведены в табл. 2 вместе с данными, вычисленными в других работах [13–15]. Насколько мы смогли определить по имеющимся публикациям, в литературе нет ни экспериментальных, ни расчетных данных для констант упругости PdMnSn, таким образом, наши расчеты для фазы $C1_b$ могут быть приняты в качестве оценочных для будущих исследований. Вычисленные нами значения констант упругости для PtMnSn оказались

больше, чем полученные в работах [14, 15], но меньше, чем полученные в работе [13]. Используя значения констант упругости, мы оценили и проанализировали механическую стабильность обоих соединений. Критерии Борна механической стабильности [26] для кубических структур имеют следующий вид:

$$C_{44} > 0, \quad (C_{11} - C_{12})/2 > 0, \quad (7)$$

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 > 0.$$

Как следует из табл. 2, эти критерии выполняются, таким образом, можно сделать вывод о том, что оба соединения являются механически стабильными в фазе $C1_b$. Давление Коши $P_C = C_{11} - C_{44}$ является весьма полезной величиной для предсказания типа связи в веществах. Если характер химической связи в веществе ковалентный, значение P_C отрицательно. Если в материале есть металлические зоны, значение P_C положительно. Как следует из табл. 1, вычисленные значения P_C для обоих материалов положительны и свидетельствуют о наличии металлических зон. Согласно критерию Пью [27], величина отношения B/G , как правило, может использоваться для получения данных о хрупкости и пластичности материалов. Отношение B/G для пластичных материалов превышает 1.75, а для хрупких материалов оно меньше, чем 1.75. Модуль объемного сжатия, модуль сдвига, модуль Юнга, коэффициент Пуассона и коэффициент анизотропии приведены в табл. 3 вместе с данными других работ для сравнения [13–15]. Из табл. 3 следует, что согласно рассчитанным значениям B/G , оба вещества являются пластичными. Сравнение коэффициента Пуассона с критическими значениями в диапазоне $0 < \sigma < 0.5$ является простым способом определения типа связи в кристалле. Если коэффициент Пуассона $\sigma = 0.1$, тип связи в материале ковалентный. Если коэффициент Пуассона σ равен 0.25, связь в материале по-

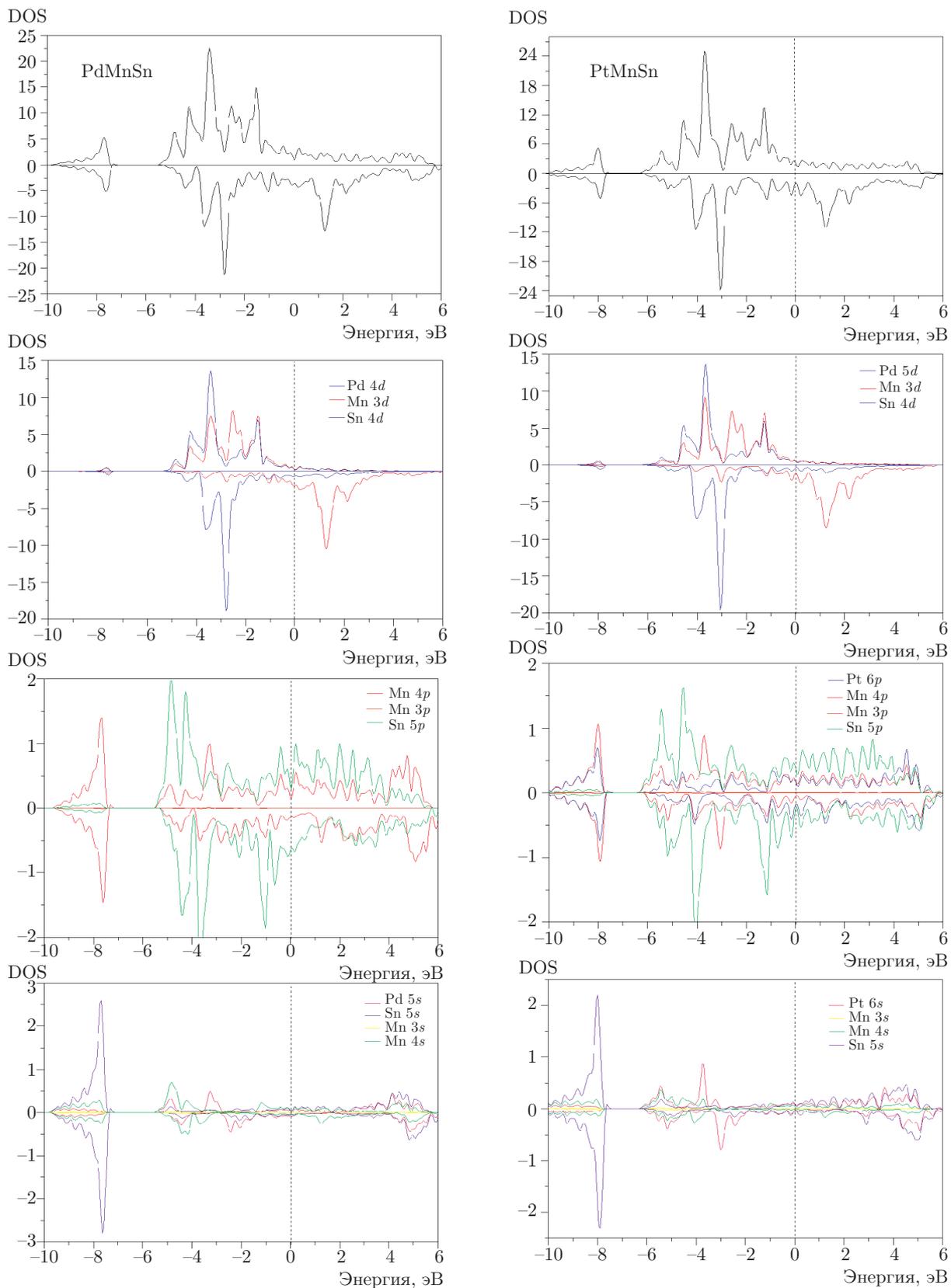


Рис. 3. (В цвете онлайн) Вычисленные полные (сплошные линии) и парциальные плотности электронных состояний (число состояний в элементарной ячейке на электронвольт) в соединениях PdMnSn и PtMnSn

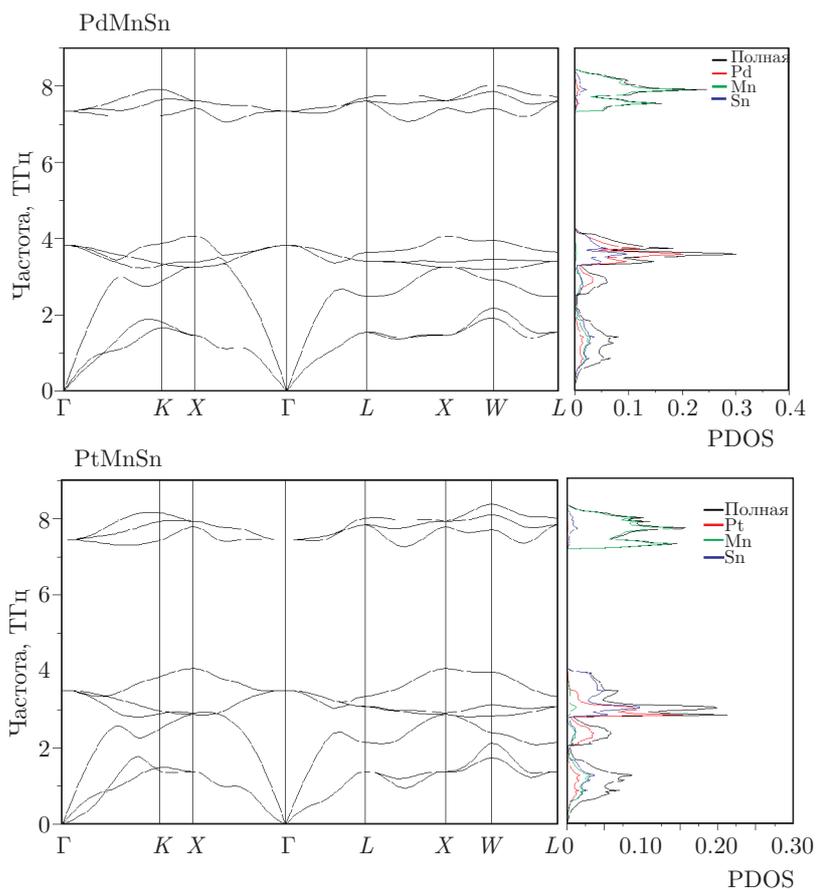


Рис. 4. Кривые фоновой дисперсии и плотности фоновых состояний в PdMnSn и PtMnSn вдоль нескольких линий высокой симметрии зоны Бриллюэна

сит ионный характер. Согласно найденным величинам коэффициента Пуассона, оба соединения характеризуются ионно-металлическим взаимодействием. Профили зон PdMnSn и PtMnSn, зависящие от направления спина, были рассчитаны с использованием теории функционала электронной плотности в обобщенном градиентном приближении. Они показаны на рис. 2. Как видно на рис. 2, уровни Ферми (E_F), изображенные горизонтальными штриховыми линиями, в некоторых диапазонах энергий пересекаются с профилями зон, соответствующих направлению спина вверх и вниз. Видно, что в обоих соединениях электроны с проекцией спина, направленной вверх, и с проекцией спина, направленной вниз, имеют металлический характер. В опубликованных работах нет результатов для PdMnSn, с которыми можно было бы провести сравнение, а что касается PtMnSn, наш результат согласуется с результатами других теоретических работ [11–15, 18]. Как хорошо видно на рис. 2, вычисленные профили электронных зон для обоих соединений похожи. Чтобы получить

более полное представление об электронных свойствах этих материалов, на рис. 3 показаны вычисленные полные и парциальные плотности электронных состояний. Нижние зоны, лежащие в диапазоне энергий между -2 эВ и -4 эВ, в обоих соединениях для спинов, направленных как вверх, так и вниз, в основном состоят из d -электронов Pd, Pt, Mn. Самая низкоэнергетическая часть спектра в районе -8 эВ в обоих соединениях образована преимущественно s -состояниями атомов Sn. Электроны на уровне Ферми в основном находятся в состояниях $3d$, $4d$ Pt и небольшая их доля находится в $3d$ -состояниях Mn в PdMnSn и PtMnSn, а вклад от d -состояний Sn невелик. Для PtMnSn эти результаты согласуются с опубликованными ранее результатами теоретических расчетов. На рис. 4 показаны фоновые спектры полугейслеровых сплавов PdMnSn и PtMnSn в фазе $C1_b$ вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна. В пределах зоны Бриллюэна нет мнимых частот фононов, что свидетельствует о динамической стабильности обоих соединений в

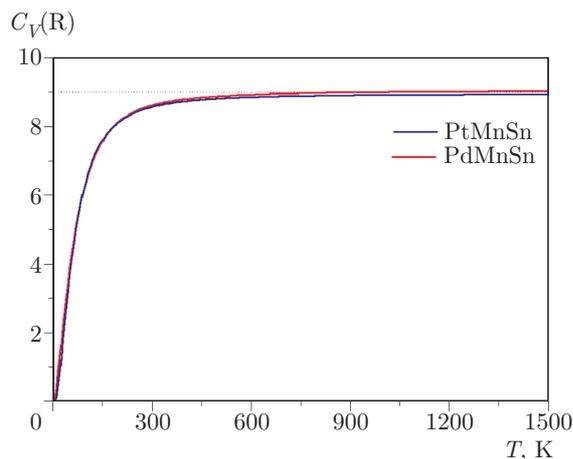


Рис. 5. Удельные теплоемкости PdMnSn и PtMnSn при постоянном объеме как функции температуры

фазе $C1_b$. На элементарную ячейку полугейслеровых сплавов PdMnSn и PtMnSn приходится по три атома. Таким образом, имеются всего девять ветвей фононного спектра, включающих три акустические ветви и шесть оптических ветвей. В обоих веществах поперечные акустические моды вдоль направлений $(\Gamma-X)$ и $(\Gamma-L)$ двукратно вырождены благодаря симметрии. В обоих соединениях фононные спектры очень похожи.

Вследствие различия масс атомов в элементарной ячейке в обоих соединениях фононные спектры можно отнести к двум отдельным областям, разделенным полосой запрещенных энергий. Как хорошо видно на рис. 4, одна из этих областей находится в низкочастотной части спектра между нулем и 4 ТГц, а вторая находится в высокочастотной части спектра между 7 ТГц и 8 ТГц. В обоих соединениях низкочастотная часть спектра с частотой ниже 4 ТГц содержит девять фононных мод. К высокочастотной области относятся три оптические ветви, и эти фононные ветви характеризуются меньшей дисперсией, чем другие оптические ветви, принадлежащие низкочастотной области. Чтобы лучше понять фононные спектры, нужно посмотреть на полную и парциальные плотности фононных состояний на рис. 4 (панель справа). Для обоих соединений низкочастотная область до 2 ТГц состоит из колебаний всех трех атомов, благодаря наличию между ними слабых сил связи. Более высокочастотные оптические моды между 7 ТГц и 8 ТГц в основном вызваны колебаниями атомов Mn. Удельную теплоемкость при постоянном объеме (C_V) можно посчитать как функцию температуры, используя квазигармоническое приближение (QHA). На рис. 5 пока-

заны удельные теплоемкости при постоянном объеме соединений PdMnSn и PtMnSn, рассчитанные как функции температуры в диапазоне 0–1500 К. В обоих соединениях наблюдается быстрый рост теплоемкости с температурой вплоть до $T = 300$ К, а затем она насыщается, приближаясь к пределу Дюлонга–Пти [28]. К сожалению, в литературе нет соответствующих данных, с которыми мы могли бы провести сравнение этих результатов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование соединений PdMnSn и PtMnSn при помощи теории функционала электронной плотности (DFT) в приближении обобщенного градиента плотности (GGA) с целью определения структурных, электронных и колебательных свойств этих материалов. Вычисленные значения постоянной решетки и модуля объемного сжатия соединений PdMnSn и PtMnSn сравнивались с теоретическими и экспериментальными результатами ранее опубликованных работ. Используя рассчитанные значения констант упругости, мы проанализировали механическую стабильность обоих соединений. На основании этих значений получено, что оба исследованных соединения являются механически стабильными. Хрупкость и пластичность обоих материалов исследовались при помощи критерия Пью, и было найдено, что оба соединения являются пластичными. Кроме того, пластичность соединения PtMnSn была подтверждена сравнением отношения B/G с величиной коэффициента Пуассона σ . Исследованы электронные зонные структуры обоих материалов в фазе $C1_b$ и было найдено, что они демонстрируют металлическое поведение. Вычисленные значения давления Коши P_C оказались положительными, что подтверждает металлический характер электронных зон. С помощью теории линейного отклика исследованы фононные спектры в фазе $C1_b$ полугейслеровых сплавов PdMnSn и PtMnSn вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна. Для обоих соединений вычисленные фононные спектры свидетельствуют об их динамической стабильности, поскольку мнимые частоты фононов отсутствуют. Дополнительно, помимо фононных свойств, мы исследовали и проанализировали термодинамические свойства обоих соединений. Удельная теплоемкость быстро возрастает вплоть до температуры 300 К, а затем ее значение выходит на уровень насыщения, приближаясь к пределу Дюлонга–Пти. К сожалению, сравнение с ранее опубликованными результатами невозможно ввиду их отсутствия.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Villars and L. D. Calvert, *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, 2nd ed., ASM International, Materials Park, OH (1991).
2. L. Offernes, P. Ravindran, C. W. Seim, and A. Kjekshus, *J. Alloys Comp.* **458**, 47 (2008).
3. M. J. Otto, R. A. M. van Woerden, P. J. van der Valk et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **1**, 2341 (1989).
4. M. J. Otto, H. Feil, R. A. M. van Woerden et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **70**, 33 (1987).
5. K. Watanebe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **28**, 302 (1970).
6. R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2024 (1983).
7. M. Masumoto and K. Watanabe, *Trans. Jpn. Inst. Met.* **14**, 408 (1970).
8. B. Lindgren, K. Pernestal, S. Bedi, and E. Karlsson, *J. Phys. F* **7**, 2405 (1977).
9. S. E. Kulkova, S. V. Ereemeev, T. Kakeshita, S. S. Kulkov, and G. E. Rudenski, *Mater. Trans.* **47**, 599 (2006).
10. E. A. Görlich, R. Kmieć, K. Łątka et al., *Phys. Stat. Sol. (a)* **30**, 331 (1975).
11. I. Galanakis, S. Ostanin, M. Alouani, H. Dreysse, and J. M. Wills, *Phys. Rev. B* **61**, 4093 (2000).
12. L. Offernes, P. Ravindran, and A. Kjekshus, *J. Alloys Comp.* **439**, 37 (2007).
13. A. Amudhavalli, R. Rajeswarapalanichamy, and K. Iyakutti, *J. Alloys Comp.* **708**, 1216 (2017).
14. M. De Jong, W. Chen, T. Angsten et al., *Scientific Data* **2**, 150009 (2015).
15. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier et al., *Appl. Mater.* **1**, 011002 (2013).
16. P. G. van Engen, K. H. J. Buschow, R. Jongebreur, and M. Erman, *Appl. Phys. Lett.* **42**, 202 (1983).
17. M. M. Kirillova, A. A. Makhnev, E. I. Shreder, V. P. Dyakina, and N. B. Gorina, *Phys. Stat. Sol. (b)* **187**, 231 (1995).
18. E. Şaşıoğlu, L. M. Sandratskii, and P. Bruno, *Phys. Rev. B* **77**, 064417 (2008).
19. S. Baroni, A. Dal Corso, S. de Gironcoli et al., *QuantumESPRESSO: Open-Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization*, <http://www.pwscf.org/>, 2005.
20. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 891 (1998).
21. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
22. E. I. Isaev, QHA Project. <http://qe-forge.org/qha> (2013).
23. F. D. Murnaghan, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **30**, 244 (1944).
24. D. Wee, B. Kozinsky, B. Pavan, and M. Fornari, *J. Electronic Mater.* **41**, 977 (2012).
25. I. Galanakis, P. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**, 765 (2006).
26. M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, New York (1954).
27. S. F. Pugh, *The London, Edinburgh, and Dublin Philos. Mag. J. Sci.* **45**, 823 (1954).
28. A. Petit and P. Dulong, *Ann. Chem. Phys.* **10**, 395 (1819).