

ZÁRÓJELENTÉS

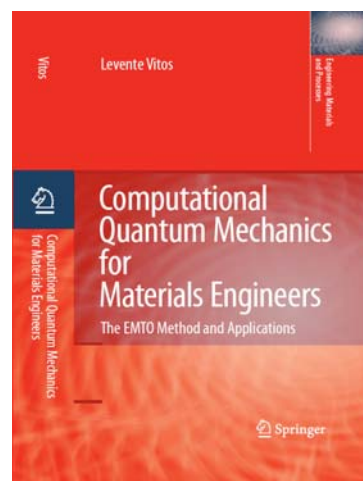
A téma megnevezése:

Fémek, ötvözetek és oxidok vizsgálata a Sűrűség Funkcionál Elmélet segítségével

Témavezető: **Vitos Levente**

Rövid összefoglaló

Korábban kifejlesztettünk egy új, az Egzakt Muffin-Tin Pálya (EMTO) elméleten és a Koherens Potenciál Közelítésen (CPA) alapuló módszert, amely alkalmas tetszőleges komponensű rendezetlen rendszerek energetikájának pontos leírására. Az EMTO egy, a világon jelenleg egyedülálló *ab initio* módszer, melynek segítségével lehetőség nyílt az ötvözetek fizikai, mechanikai és kémiai tulajdonságainak átfogó, atomi szintű tanulmányozására. A jelen OTKA támogatásával elvégzett kutatás kimagasló eredménye az EMTO módszer továbbfejlesztése, számos technikai és módszertani részletek kidolgozása (pl. véges hőmérséklet figyelembe vétele; Hopfield paraméter meghatározása; újabb kicserélődési-korrelációs funkcionál beépítése, stb.) valamint az EMTO5.3-5.7 számítógép programok elkészítése. A módszerből valamint annak legjelentősebb alkalmazásaiból 2007-ben a jelen OTKA támogatásával egy kb. 250 oldalas könyv jelent meg: *Computational Quantum Mechanics for Materials Engineers: The EMTO Method and Applications* Levente Vitos, ISBN: 978-1-84628-950-7, Springer-Verlag London, Series: Engineering Materials and Processes (2007). Az EMTO módszert jelenleg a világ több mint 16 országában, több mint 100 kutató használja. A jelen OTKA támogatásával elért további jelentős eredmény a 2005-ben (*Quantum Mechanical Studies of Solid Surfaces*) és 2008-ban (*New challenges in the Electronic Structure of Complex Materials*) az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetben megrendezett nemzetközi workshopok. A találkozokon mindkét esetben 25-30 külföldi és 15-20 hazai kutató vett részt.



Az elmúlt négy év folyamán a Kutatási Tervben megfogalmazott célkitűzésekhez szorosan kapcsolódó kutatásokat végeztünk (lásd a kutatási terv rövid összefoglalóját). Eredményeinkből 41 tudományos publikáció született: 1 könyv, 1 könyvfejezet, 1 *Science*, 4 *Physical Review Letters*, 3 *Surface Science*, 18 *Physical Review B*, 1 *Acta Materialia*, 3 *Applied Physics Letters*, 1 *J. Phys.: Condens. Matter*, 1 *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2 *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 1 *Earth and Planetary Science Letters*, 1 *Physica Scripta*, 1 *Journal of Applied Physics* és 2 *Computational Materials Science*, valamint számos további cikk van elfogadás vagy bírálat alatt. A alábbiakban röviden ismertetjük a 2004-től 2008 június végéig leközölt fontosabb eredményeinket. További részletek valamint a jelentésből kimaradt eredmények a publikációs listában felsorolt tudományos közleményekben találhatóak meg.

Fontosabb tudományos eredmények (2004-2008)

Átfogó teszt számolásokat végeztünk az EMTO módszer alkalmazhatóságára olyan rendszerek esetében ahol a kémiai és a mágneses rendezetlenség is jelen van. Eredményeink egyértelműen igazolják a fenti módszer pontosságát és hatékonyságát, valamint azt, hogy jelenleg az EMTO jelenti az egyetlen lehetőséget ilyen típusú rendszerek *ab initio* leírására. Részletesen tanulmányoztuk az módszer alap egyenletében megjelenő mennyiségek (pl. slope matrix, kink matrix) viselkedéseit egy kiterjedt energia tartományban és felállítottunk egy új paraméteres alakot, amely nagy pontossággal írja le ezen mátrixok energia függését. Ezzel lehetőség nyílt széles és komplex energia sávok (5-8 Ry) pontos leírására (Kutatási Terv A.1, B.3 és B.4.)

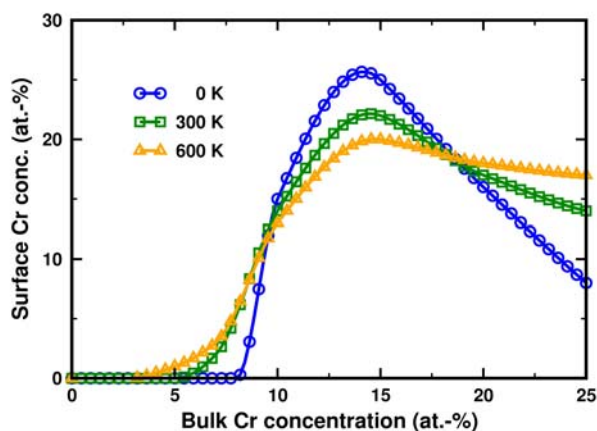
Az EMTO módszer segítségével megvizsgáltuk az Al-Li rendezetlen ötvözetek rugalmas tulajdonságait. Mint ismeretes, az Al-Li ötvözetek nyírási és Young modulusza egy érdekes viselkedést mutat a Li koncentráció függvényében. Tanulmányoztuk a Koherens Potenciál Közelítést (CPA) valamint a lokális relaxáció hatását a rugalmas állandók koncentráció függésén. A Ce-Th rendszer esetében a nyomásnak a kristályszerkezeten gyakorolt hatását vizsgáltuk meg. Mindkét esetben lépéseket tettünk az ötvözés hatásának atomi szintű megértése. A δ -Pu bulk tulajdonságainak elméleti leírásánál hasznos modelnek bizonyult a magashőmérsékletű paramágneses viselkedés leírására bevezetett úgynevezett Rendezetlen Lokális Momentum (DLM) közelítés. Az EMTO-CPA-DLM módszerrel meghatároztuk a δ -Pu rugalmas állandóit és fonon frekvenciáját. (Kutatási Terv A.1 és B. 3.)

Bevezettünk egy *ab initio* eljárást a rendezetlen ötvözetek rugalmas állandóinak hőmérséklet függésének tanulmányozására. A módszert α - és β -Be-ra, valamint Nb-Zr és paramágneses Fe-Cr-Ni ötvözetekre alkalmaztuk. Ez utóbbi esetben kiderült, hogy a rugalmas állandók hőmérséklet faktorát a rendezetlen lokális momentumok számottevően (40-60%-ban) befolyásolják (Kutatási Terv: A.1 és B.3.)

A spin-pálya (SP) kölcsönhatás fontos energia járuléka a nehéz elemek esetében. Továbbá a SP felelős olyan fontos jelenségeknél is mint például a pálya mágnesesség valamint a mágneses anizotrópia. Az elmúlt időszakban beépítettük a SP kölcsönhatást az EMTO módszerbe, és így sikerült kidolgozni egy relativisztikus, a Green függvényen technikán alapuló és rendezetlen rendszerek leírására is alkalmas eljárást. (Kutatási Terv A.1.)

Kifejlesztettünk egy *ab initio* eljárást a rendezetlen ötvözetek felületi szegregációjának tanulmányozására. Az eljárást a Pd-Ag ötvözet felületére alkalmaztuk, ahol nagy pontossággal meghatároztuk a felület koncentráció profilját, a szegregációs energiát, a felületi energiát, valamint ezeknek a hőmérséklet függését. Eredményeink jól egyeznek a létező kísérleti adatokkal. (Kutatási Terv B.1.)

Az EMTO módszer alkalmazásával elsőként mutattuk meg, hogy alacsony hőmérsékleten kb. 5% Cr oldható fel a ferromágneses tércentrált köbös Fe-ban, ugyanakkor az oldhatósági határ gyakorlatilag nulla a paramágneses fázisban. Ennek az anomális viselkedésnek fontos következményei vannak a Fe-Cr ötvözetek (ferrites acél) rugalmas és felületi tulajdonságaira. Az általunk kiszámolt tömbi képződésenergiát és effektív kémiai potenciált összevetettük a felületi kémiai potenciállal, és a következő meglepő következtetésre jutottunk: a kevesebb mint 10% Cr tartalmú Fe-Cr ötvözetekben a felület csak vasat tartalmaz, viszont ha az ötvözet 10%-nál több krómot tartalmaz akkor a Cr egy része szegregálódik a felületre. (A mellékelt ábrán az általunk számolt felületi Cr koncentráció van feltüntetve a bulk Cr koncentráció és a hőmérséklet függvényében.) A két tartomány létezése a ferromágneses Fe atomokhoz antiferromágnesesen csatolt Cr atomok közti erős taszító kölcsönhatás (mágneses frusztráció) következménye. *Ez az eredmény az egyik lehetséges magyarázat a Fe-Cr ötvözetek rozsdamentes viselkedésében kísérletileg tapasztalt átmenetre.* (Kutatási Terv B.1, B.3, B.4.)



Az EMTO módszert alkalmaztuk a geofizikában fontos szerepet betöltő MgSiO_3 és CaSiO_3 perovszkitok állapotegyenletének vizsgálatánál. Bebizonyítottuk, hogy az átmeneti zónában létező diszkontinuitás részben a gránát szerkezetű $(\text{MgCa})\text{SiO}_3$ disszociációjának tulajdonítható. Azt találtuk, hogy a fenti két perovszkit szilárd oldatot képez a Föld alsó kérgének melegebb rétegeiben is, magyarázatot adva az ebben a tartományban tapasztalt inhomogenitásokra. Elsőként határoztuk meg a rendezetlen $\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}$ (ferropericlas) mágneses és rugalmas tulajdonságait, és mutattuk meg, hogy a Fe koncentráció növelésével $\Delta c_{44}/\Delta T$ csökken és negatív lesz 20% Fe fölött. Eredményeink összhangban vannak a nemrégiben kísérletileg tapasztalt köbös-romboéderes fázis átalakulással (Kutatási Terv B.2.)

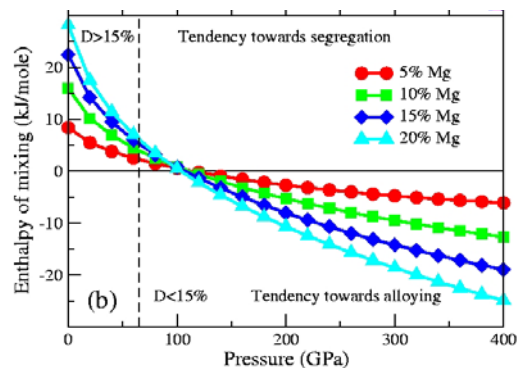
A rozsdamentes acéllemezek megmunkálásánál fontos lépés a formázási eljárás. Ezen technológiát alkalmazzák például az auto és repülőgép iparágakban, valamint a háztartási és orvosi felszerelések gyártásánál is. Az ismételt formázás során egy visszafordíthatatlan elhasználadás léphet fel az eszközök felületén ami megakadályozza a további alkalmazást. A folyamat tribológiai elnevezése a “durvulás” (galling). Módszereink segítségével megvizsgáltuk a “durvulást” előidéző atomi szintű folyamatokat. Bebizonyítottuk, hogy a felületi elektronok kölcsönhatásából származó kvantummechanikai érdekesség egy kulcsfontosságú parameter a “durvulást” megértésében. (Kutatási Terv B.4 pontja.)

Az EMTO módszer segítségével megvizsgáltuk a 4d átmeneti fémek felületi feszültségét (τ) valamint a felületi feszültség és a felületi rétegtávolság összefüggését. Elsőként állapítottuk meg a τ elektronszám (a d elektronok) függését és mutattuk meg, hogy τ a felületi energiához (γ) hasonlóan, a Friedel parabolát követő viselkedést mutat. Ugyanakkor, azt találtuk, hogy τ és γ erősen eltérő felületi geometria függést mutatnak. Míg γ csak kis mértékben függ a felületi relaxációtól, a τ esetében a relaxáció akár 50%-os csökkenést is eredményezhet. Ennek megfelelően rámutattunk, hogy a felületi feszültség *ab initio* meghatározásának elengedhetetlen feltétele a pontos felületi geometria előzetes meghatározása (Kutatási Terv B.1.)

A magasnyomású kísérleti berendezésekben sok esetben szilárd állapotú He, Ne, Ar stb. alkalmaznak. A nyomás növekedésével a közeg anizotropiája megváltozhat, ami megakadályozza, hogy a kísérletek szigorúan hidrosztatikus feltételeket mellett játszódjanak le. Az EMTO módszer segítségével tanulmányoztuk a szilárd He rugalmas tulajdonságainak nyomás függését. Megmutattuk, hogy legkevesebb 150 GPa nyomásig a szilárd He alkalmas közel hidrosztatikus feltételeket biztosítására. (Kutatási Terv B.4.)

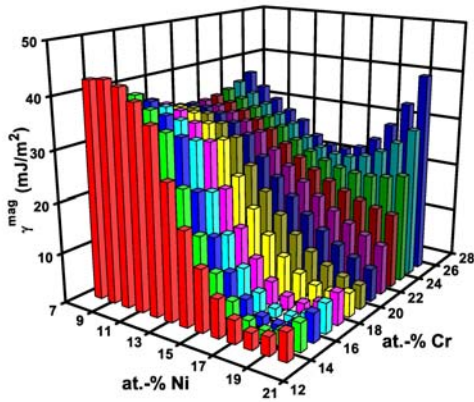
Az EMTO módszer segítségével tanulmányoztuk a (Fe-Co)Si ötvözet mégneses és szerkezeti tulajdonságainak koncentráció függését. Azt találtuk, hogy az $0.1 < x < 0.9$ tartományban a $Fe_{1-x}Co_xSi$ rendszer közel degenerált, ami egy erős mágneses momentum-kristály szerkezet összefüggésben tükröződik. Továbbá megmutattuk, hogy a rendezetlenségnek fontos szerepe van a (Fe-Co)Si ötvözetek mágneses szerkezetének leírásánál és megértésénél. (Kutatási Terv: B.3, B.4.)

Normál körülmények mellett a szilárd vasban elhanyagolhatóan kis mennyiségű Mg oldható fel. Kísérletis kollégáinkal közösen megmutattuk, hogy a nyomás növelésével az oldhatósági tartomány is növekszik, és 100 GPa nyomásnál akár 10% Mg is feloldható a Fe-ban. (A mellékelt ábra a Fe-Mg ötvözet általunk meghatározott képződési entalpiáját mutatja nyomás és koncentráció függvényében.) Hasonó következtetésre jutottunk Co és Ni esetében is. Eredményünk lehetőséget kínál újabb, napjainkban ismeretlen ötvözetek tervezésére, valamint magyarázatot ad a Föld magjában található anyagok Fe-nál kisebb átlagsűrűségére. (Kutatási Terv B.3, B.4.)



Hasonó következtetésre jutottunk Co és Ni esetében is. Eredményünk lehetőséget kínál újabb, napjainkban ismeretlen ötvözetek tervezésére, valamint magyarázatot ad a Föld magjában található anyagok Fe-nál kisebb átlagsűrűségére. (Kutatási Terv B.3, B.4.)

A Nb alapú ötvözetek a relatív magas szupravezetési hőmérsékletük miatt számos elméleti és kísérleti kutatás alaját képezik. Az elmúlt év folyamán megvizsgáltuk a Nb, V valamint Nb-V ötvözetek rugalmas állandóinak nyomás függését. Azt találtuk, hogy V esetében a c_{44} nyírási állandó 2 Mbar nyomáson eltűnik, míg Nb esetében lényegesen csökken 0.5 Mbar közelében. Ötvözéssel (5% Nb) a V-nál észlelt dinamikai instabilitás eltűnik. A fenti anomális viselkedések a Fermi-felület sajátos alakjára vezethető vissza. (Kutatási Terv B.3, B.4)



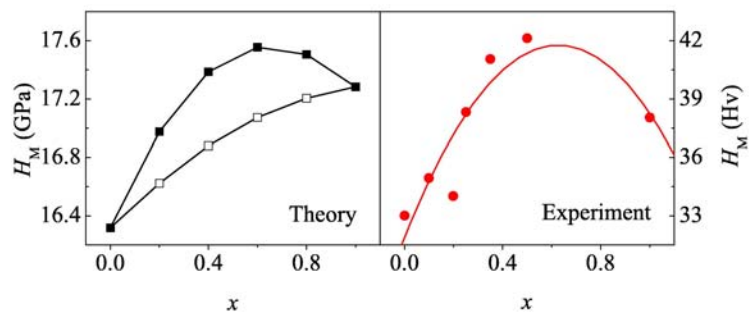
Az EMTO módszer segítségével elsőként számoltuk ki a rozsdamentes acél pakolási hiba energiáját (stacking fault energy, SFE). A kísérlettel való összehasonlítás során kiderült, hogy a szobahőmérsékleten jelenlevő mágneses fluktuációnak döntő szerepe van a pakolási hibáknál és ezáltal meghatározza ezen ötvözetek mechanikai tulajdonságait. (A mellékelt ábrán a számolt mágneses SFE látható. A teljes SFE azonos koncentráció tartományban -10 és 50 mJ/m² között változik, azaz a mágneses és a teljes SFE azonos nagyságúak.) Megállapítottuk hogy a SFE három alapvető mechanizmustól

függ: elektron szerkezeti, mágneses és térfogati effektusok. Megmutattuk, hogy a SFE, a korábbiakban feltételezett egyszerű (lineáris) koncentráció függésnél lényegesen bonyolultabb összefüggést mutat. (Kutatási Terv B.3, B.4.)

Általában a szorosan pakolt rácssíkok kevésbé összenyomhatóak mint a lazán pakolt síkok. Ezért azt várjuk, hogy az átmeneti fémek nyitott felületei nyomással termodinamikailag stabilá válnak (normál körülmények között ezek a felületek nem stabilak). Ötvözéssel (és felületi szegregációval) lokálisan megváltoztathatjuk a felületi rétegek nyomását és így különböző felületeket stabilizálhatunk. A jelenséget a Pd-Ag rendszeren elvégzett EMTO számolásokkal szemléltettük. Megmutattuk, hogy habár a Pd gazdag ötvözeteknél az (100) felület termodinamikailag stabilabb mint a szokásos (111) felület, viszont a rendkívüli nagy felületi feszültség mechanikailag destabilizálja a rendszert (és felületi átrendeződéshez vezet). (Kutatási Terv B.1, B.3)

Megvizsgáltuk a legújabban kifejlesztett Perdew féle kicserélődési és korrelációs energia funkcionál (PBEsol) viselkedését bulk és felületi rendszerekre. Azt találtuk, hogy az új közelítés nem javít lényegesen az elméletileg számolt tömbi tulajdonságokon, viszont a felületekre minden eddigi funkcionálnál jobb eredményekhez vezet. (Kutatási Terv A.1, A.2)

Kidolgoztunk egy új módszert az ionos és kovalens kristályok keménységének elméleti meghatározására. A módszer *ab initio* számolásokon alapszik, és a korábbi módszerekkel ellentétben rendezetlen szilárd oldatok esetében jó eredményekhez vezet. (A mellékelt ábra a Ti(N_{1-x}C_x) rendszer keménységét mutatja C koncentráció függvényében. Az általunk számolt keménység görbe (fekete négyzetek)



számolt keménység görbe (fekete négyzetek)

tökéletesen adja vissza a kísérletileg tapasztalt erősen nemlineáris viselkedést. Az új módszer lényeges előnye, hogy többkomponensű rendszerekre (akár vakanciák esetében is) alkalmazható. (Kutatási Terv B.1, B.3, B.4)

Az EMTO módszer felhasználásával megvizsgáltuk a Fe-Ni ötvözet szerkezetét magas nyomáson (200-350 GPa) és megmutattuk, hogy 10% Ni 230 GPa-on 32 meV-tal, míg 350 GPa-on 41 meV-tal stabilizálja a tércentrált köbös fázist a közel izotrop hexagonális fázishoz képest. Ebből arra lehet következtetni, hogy a Föld magjában a Fe-Ni tércentrált köbös fázisban van jelen, magyarázatot adva ezzel a mag szeizmikus hullámok segítségével megbecsült anizotrópiájára. Eredményeinket geofizikus kollégáink kísérletekkel igazolták, és rámutattak, hogy a tércentrált köbös Fe-Ni ötvözet egy lehetséges anyag a Föld belső magjában (ami jelenleg még ismeretlen). (Kutatási Terv B.2.)

Az OTKA lezártáig nem teljesített munkatervi pontok

A pénzügyi átcsoportosítások és elvonások miatt szükség volt az egyes munkatervi pontok elsőbbségi sorrendjének a megváltoztatására. Ennek megfelelően (az A.2 pont rovására) nagyobb hangsúlyt kapott a munkatervben megjelölt A.1 pont egyik része valamint a B pontok.

Az A.1 és A.2 pontokban megfogalmazott LSGF-EMTO és DMFT-EMTO módszerek kidolgozása részben befejeződött, beépítésük folyamatban van. Mindkét esetben előre nem látható bonyolult módszertani és numerikus részletekkel találkoztunk, melyeknek megoldása számottevő többlet időt igényelt. Előreláthatóan mindkét módszer az elkövetkező 12-16 hónap alatt befejezésre kerül.

A jelen OTKA támogatásával megjelent tudományos közlemények

2008

Theoretical evidence of a superconducting transition in doped silicon and germanium driven by a variation of chemical composition

K. Kádas, L. Vitos, and R. Ahuja,
Applied Physics Letters **92**, 052505 (2008).

Melting of Na at high pressure from ab initio calculations

L. Koci, R. Ahuja, L. Vitos and U. Pinsook,
Phys. Rev. B **77**, 132101 (2008).

Anomalous Bismuth-Stabilized (2x1) Reconstructions on GaAs(100) and InP(100) Surfaces

P. Laukkanen, M. P. J. Punkkinen, H.-P. Komsa, M. Ahola-Tuomi, K. Kokko, M. Kuzmin, J. Adell, J. Sadowski, R. E. Perälä, M. Ropo, T. T. Rantala, I. J. Väyrynen, M. Pessa, L. Vitos, J. Kollár, S. Mirbt, and B. Johansson,
Phys. Rev. Lett. **100**, 086101 (2008).

Exceptional surface stability in late transition metal alloys driven by lattice strain

L. Vitos, M. Ropo, K. Kokko, M. P. J. Punkkinen, J. Kollár, and B. Johansson,
Phys. Rev. B **77**, 121401(R)(2008).

Elastic properties of iron-rich hcp Fe-Mg alloys up to Earth's core pressure

Krisztina Kádas, Levente Vitos, Rajeev Ahuja,
Earth and Planetary Science Letters **271**, 221-225 (2008).

Hardness and elastic properties of covalent/ionic solid solutions from first-principles theory

Q. M. Hu, K. Kádas, S. Hogmark, R. Yang, B. Johansson, L. Vitos,
Journal of Applied Physics **103**, 083505 (2008).

Assessing the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation density functional revised for metallic bulk and surface systems

M. Ropo, K. Kokko, and L. Vitos
Phys. Rev. B **77**, 195445 (2008).

Stacking fault energy and magnetism in austenitic stainless steels

L. Vitos, P. A. Korzhavyi, J.-O. Nilsson, and B. Johansson,
Physica Scripta **77**, 065703 (2008).

2007**Hardness of covalent/ionic solid solution from first-principles theory**

Q. M. Hu, K. Kádas, S. Hogmark, R. Yang, B. Johansson, L. Vitos,
Applied Physics Letters **91**, 121918 (2007).

Temperature dependent elastic properties of α -beryllium from first principles theory

K. Kádas, L. Vitos, R. Ahuja, B. Johansson, and J. Kollár,
Phys. Rev. B **76**, 235109 (2007)

Computational Quantum Mechanics for Materials Engineers The EMTO Method and Applications

Levente Vitos, book, ISBN: 978-1-84628-950-7, Springer-Verlag
London, Series: Engineering Materials and Processes (2007).

Structural stability of β -beryllium

K. Kádas, L. Vitos, B. Johansson and J. Kollár
Phys. Rev. B **75**, 035132(8) (2007).

Mechanical properties of random alloys from quantum mechanical simulations

L. Vitos and B. Johansson
In *Applied Parallel Computing. State of the Art in Scientific*

Computing, Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, B. Kagström et al. (eds.) Volume **4699**, 510-519 (2007)

The energy dependence of the Exact Muffin-Tin Orbitals structure constants

A. E. Kissavos, L. Vitos, and I. A. Abrikosov
Phys. Rev. B **75**, 115117 (2007).

Effect of Zr on the properties of (TiZr)Ni alloys from first-principles calculations

Q. M. Hu, R. Yang, J. M. Lu, L. Wang, Y. J. Li, B. Johansson, and L. Vitos,
Phys. Rev. B **76**, 224201 (2007)

Theoretical evidence of the compositional threshold behavior of FeCr surfaces

M. Ropo, K. Kokko, M. P. J. Punkkinen, S. Hogmark, J. Kollár, B. Johansson, and L. Vitos,
Phys. Rev. B Rapid Communications **76**, 220401(R) (2007).

Ab initio calculations of the elastic properties of ferropericlase $Mg_{1-x}Fe_xO$ ($x \leq 0.20$)

L. Koci, L. Vitos, and R. Ahuja,
Physics of the Earth and Planetary Interiors **164**, 177-185 (2007).

Body-Centered-Cubic Iron-Nickel Alloy in Earth's Core

L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, O. Narygina, A. Kuznetsov, V. Prakapenka, L. Vitos, B. Johansson, A. S. Mikhaylushkin, S. I. Simak, I. A. Abrikosov
Science **316**, 1880 (2007).

Elastic properties of Fe-Mn random alloys studied by ab initio calculations

Denis Music, Tetsuya Takahashi, Levente Vitos, Christian Asker, Igor A. Abrikosov, Jochen M. Schneider,
Applied Physics Letters **91**, 191904(3) (2007).

Surface core-level shifts of the GaAs(100)(2x4) surface

M. P. J. Punkkinen, P. Laukkanen, K. Kokko, M. Ropo, M. Ahola-Tuomi, I. J. Väyrynen, H.-P. Komsa, T. T. Rantala, M. Pessa, M. Kuzmin, L. Vitos, J. Kollár, and B. Johansson,
Phys. Rev. B **76**, 115334 (2007).

Surface core-level shift of Pd at the $Ag_cPd_{1-c}(111)$ surface: nonlinear subsurface effects

K. Kokko, M. Ropo, M. P. J. Punkkinen, P. Laukkanen, M. Alatalo, L. Vitos, J. Kollár, and B. Johansson
Surf. Sci. **601**, 5419-5423 (2007).

2006

Alloying effects on the stacking fault energy in austenitic stainless steels from first-principles theory

L. Vitos, J.-O. Nilsson, and B. Johansson,

Acta Materialia **54**, 3821-3826 (2006).

Evidence of large magnetostructural effects in austenitic stainless steels

L. Vitos, P. A. Korzhavyi, and B. Johansson,
Phys. Rev. Lett., **96**, 117210 (2006).

An atomistic approach to the initiation mechanism of galling

L. Vitos, K. Larsson, B. Johansson, M. Hanson, and S. Hogmark
Comp. Mat. Sci. **37**, 193-197 (2006).

The chemical potential in surface segregation calculations: AgPd alloys

M. Ropo, K. Kokko, L. Vitos, J. Kollár, and B. Johansson,
Surf. Sci. **600**, 904-913 (2006).

Surface relaxation and surface stress of 4d transition metals

K. Kádas, Z. Nabi, S. K. Kwon, L. Vitos, R. Ahuja, B. Johansson, and J. Kollár
Surf. Sci. **600**, 395-402 (2006).

Total energy calculations for systems with magnetic and chemical disorder

A. E. Kissavos, S. I. Simak, P. Olsson, L. Vitos, and I. A. Abrikosov
Comp. Mat. Sci. **35** 1-5 (2006).

Ab initio calculations of elastic constants of the bcc V–Nb system at high pressures

A. Landa, , J. Klepeis, P. Söderlind, I. Naumov, O. Velikokhatnyi, L. Vitos, and A. Ruban
Journal of Physics and Chemistry of Solids **67**, 2056-2064 (2006).

Fermi surface nesting and pre-martensitic softening in V and Nb at high pressures

A. Landa, , J. Klepeis, P. Söderlind, I. Naumov, O. Velikokhatnyi, L. Vitos, and A. Ruban
J. Phys.: Condens. Matter **18**, 5079-5085 (2006).

Thermo-elastic properties of random alloys from first-principles theory

L. Huang, L. Vitos, S. K. Kwon, B. Johansson, and R. Ahuja
Phys. Rev. B **73**, 104203 (2006).

Magnetism of (FeCo)Si alloys: Extreme sensitivity on crystal structure

M.P.J. Punkkinen, K. Kokko, M. Ropo, and I.J. Väyrynen, L. Vitos, B. Johansson, and J. Kollár
Phys. Rev. B **73**, 024426(10) (2006).

**Phase transformations between garnet and perovskite phases in the Earth's mantle:
A theoretical study**

L. Vitos, B. Magyari-Köpe, J. Kollár, G. Grimvall, and B. Johansson
Physics of the Earth and Planetary Interiors, **156**, 108-116 (2006).

2005**Surface Energy and Stress Release by Layer Relaxation**

S. K. Kwon, Z. Nabi, K. Kádas, L. Vitos, J. Kollár, B. Johansson, and R. Ahuja
Phys. Rev. B **72**, 235423 (2005).

Ab initio calculation of elastic properties of solid He under pressure

Z. Nabi, L. Vitos, B. Johansson, and R. Ahuja
Phys. Rev. B **72**, 172102(4) (2005).

Beating the miscibility barrier between iron and magnesium by high-pressure alloying

N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, I. Kantor, W. A. Crichton, V. Dmitriev, V. Prakapenka, G. Shen, L. Vitos, R. Ahuja, B. Johansson, and I. A. Abrikosov
Phys. Rev. Lett. **95**, 245502 (2005).

Beating the miscibility barrier between iron and magnesium by high-pressure alloying

N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, I. Kantor, W. A. Crichton, V. Dmitriev, V. Prakapenka, G. Shen, L. Vitos, R. Ahuja, B. Johansson, and I. A. Abrikosov
Cover Picture from paper for Phys. Rev. Lett. **95**, December 9, (2005).

Ab initio calculation of the elastic properties of $\text{Al}_{1-x}\text{Li}_x$ ($x < 0.20$) random alloys

A. Taga, L. Vitos, B. Johansson, and G. Grimvall
Phys. Rev. B **71**, 014201 (2005).

Segregation at the PdAg(111) surface: Electronic structure calculations

M. Ropo, K. Kokko, L. Vitos, and J. Kollár,
Phys. Rev. B **71**, 045411 (2005).

Fully relativistic implementation of the Exact MT-orbitals method

L. V. Pourovskii, A. V. Ruban, L. Vitos, H. Ebett, B. Johansson, and I. A. Abrikosov
Phys. Rev. B **71**, 094415(10) (2005).

2004**First-principles phase diagram for Ce-Th system**

A. Landa, P. Sönderlind, A. Ruban, L. Vitos, and L. V. Pourovskii
Phys. Rev. B **70**, 224210(5) (2004).

First-principles elastic constants and phonons of δ -Pu

P. Sönderlind, A. Landa, B. Sadigh, L. Vitos, A. Ruban
Phys. Rev. B **70**, 144103(5) (2004).