

М. А. Загребин, В. В. Соколовский, В. Д. Бучельников (Челябинск, ЮУрГУ, ЧелГУ). **Первопринципные исследования магнитных свойств магнитоупорядоченных сплавов Гейслера.**

В последнее время исследование магнитных свойств с помощью первопринципных вычислений ведется достаточно интенсивно [1]. Особый интерес представляют магнитоупорядоченные сплавы Гейслера [1]. Одни из ярких представителей данных сплавов — сплавы $Ni-Mn-Ga$ интересны для практических применений из-за множества таких необычных эффектов, как магнитный эффект памяти формы, магнитодеформации, гигантское магнитосопротивление и магнитокалорический эффект [1]. Экспериментальные данные показывают, что магнитные свойства сплавов Гейслера (параметры обменного взаимодействия, магнитный момент, температура Кюри и др.) существенно зависят от степени структурного и химического беспорядка [2]. В случае стехиометрического состава Ni_2MnGa упорядочивается в $L2_1$ -структуру, в которой атомы Ga занимают позиции $(0; 0; 0)$, атомы Mn — позиции $(1/2; 1/2; 1/2)$ и атомы Ni располагаются на позициях $(1/4; 1/4; 1/4)$ и $(3/4; 3/4; 3/4)$ с 16 атомами в элементарной ячейке.

В работе [2] рассматривается 2 типа сплавов $Ni-Mn-Ga$ различного стехиометрического состава. В сплавах первого типа избыточные атомы Mn занимают позиции Ni и Ga . В сплавах второго типа избыточные атомы Ni вытесняют атомы Mn , которые, в свою очередь, занимают позиции Ga [2]. В работе, представленной данным докладом, с помощью первопринципных вычислений исследуются микроскопические магнитные свойства сплавов Гейслера $Ni-Mn-Ga$. Для вычислений используется программный пакет SPR-KKR (Spin Polarized Relativistic Korringa-Kohn-Rostoker code) [3]. Параметры сплавов для расчетов (постоянная кристаллической решетки, стехиометрический состав, конфигурация атомов) взяты из работ [2, 4]. Расчеты магнитного момента показывают, что в сплавах $Ni-Mn-Ga$ первого типа магнитный момент атомов Mn , расположенных на позициях Ni , является отрицательным, в отличие от магнитного момента атомов Mn на регулярных позициях и позициях Ga . Это говорит о том, что спиновая ориентация атомов Mn на позициях Ni и Mn на регулярных позициях и позициях Ga является антипараллельной. Более того, расстояние между этими атомами является наименьшим. Следовательно, в этом случае имеет место сильное антиферромагнитное взаимодействие. Результаты расчетов полного магнитного момента качественно совпадают с экспериментальной зависимостью магнитного момента от композиции [2]. Расчеты обменных постоянных показывают, что атомы Mn на регулярных позициях и атомы Mn на позициях Ga взаимодействуют антиферромагнитно. Величина взаимодействия составляет ≈ 15 мэВ. Соответствующие параметры обменного взаимодействия при переходе в низкотемпературную (мартенситную) фазу увеличиваются примерно в 4 раза. Данное поведение соответствует наблюдаемому экспериментально в работе [2].

Вычисления проводились с использованием ресурсов НИЦ СКТ и ОПО ЧелГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Entel P., Gruner M. E., Dannenberg A. et al.* Fundamental Aspects of Magnetic Shape Memory Alloys: Insights from ab initio and Monte Carlo Studies. – Materials Science Forum, 2010, v. 635, p. 3–12.
2. *Lázpita P., Barandiaran J. M., Gutierrez J. et al.* Magnetic moment and chemical order in off-stoichiometric *Ni–Mn–Ga* ferromagnetic shape memory alloys. — New Journal of Physics, 2011, v. 13, p. 033039.
3. *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.
4. *Wedel B., Suzuki M., Murakami Y. et al.* Low temperature crystal structure of Ni-Mn-Ga alloys. — Journal of Alloys and Compounds, 1999, v. 290, p. 137–143.