

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ Mn СОДЕРЖАЩИХ СПЛАВОВ

ГЕЙСЛЕРА Mn_2NiX ($X = Ga, In, Sn, Sb$)Соколовский В.В.^{1,2}, Загребин М.А.^{1,3}, Соколовская Ю.А.¹,Бучельников В.Д.¹¹Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия²НИТУ «Московский институт сталей и сплавов», Москва, Россия³Южно-уральский государственный университет, Челябинск, Россия

vsokolovsky84@mail.ru

В последние годы огромное внимание исследователей направлено на поиск и синтез новых ферромагнитных материалов с эффектом памяти формы вследствие их технологического потенциала. К одним из таких материалов можно отнести сплавы семейства Гейслера с общей формулой X_2YZ , где элементы X и Y – переходные 3d металлы, тогда как Z – элементы III-V группы [1]. В большинстве композиций в зависимости от химического состава наблюдается бездиффузионное превращение из высокотемпературной кубической фазы (аустенит) в низкотемпературную фазу низкой симметрии (мартенсит). На сегодняшний день одним из хорошо изученных сплавов являются Ni- содержащие сплавы Ni_2MnZ ($Z = Ga, In, Sn, Sb$) [2, 3]. Данная серия сплавов, а также их нестехиометрические вариации, обладают рядом уникальных эффектов (н/р магнитный эффект памяти формы, магнитокалорический эффект, сверхупругие обратимые магнитодеформации, магнитосопротивление и др.), вызванных тесной взаимосвязью между магнитной подсистемой и кристаллической структурой вследствие разнообразной последовательности фазовых переходов. Что касается новых Mn содержащих композиций сплавов Гейслера Mn_2NiZ ($Z = Ga, In, Sn, Sb$), то в настоящее время данные сплавы мало исследованы и изучены как экспериментальной, так и теоретической точки зрения. Недавние экспериментальные исследования композиции Mn_2NiGa показали, что температуры структурного и магнитного перехода ($T_m \sim 270$ К и $T_C \sim 588$ К) [4] существенно отличаются от критических температур, наблюдаемых в сплаве Ni_2MnGa ($T_m \sim 202$ К и $T_C \sim 370$ К) [5]. Вычисления зонной структуры сплава Mn_2NiGa позволили сделать предположение о ферромагнитном упорядочении атомов Mn, расположенных в кристаллографических позициях X и Y [6]. В работе [7] авторами были теоретически предсказаны мартенситные фазовые превращения и высокие температуры Кюри в сплавах Mn_2NiX ($X = In, Sn, Sb$). Высокие температуры фазовых переходов делают Mn содержащие сплавы более привлекательными в качестве технологического применения. Ожидается,

что в данных сплавах возможно реализовать более лучшие магнитные, магнитокалорические и магнитотранспортные свойства.

В данной работе представлены теоретические исследования структурных и магнитных свойств сплавов Mn_2NiX ($X = Ga, In, Sn, Sb$) с помощью первопринципных методов в рамках теории функционала плотности. Для соответствующих расчетов были использованы два хорошо известных *ab initio* программных пакета (Quantum ESPRESSO [8] и SPR-KKR [9]). Пакет Quantum ESPRESSO был применен для определения равновесного параметра решетки кубической аустенитной $L2_1$ фазы сплавов Mn_2NiX ($X = Ga, In, Sn, Sb$) с ферромагнитным (ФМ) и ферримагнитным (ФРМ) упорядочением с целью определения наиболее выгодной конфигурации магнитного порядка. Здесь, под ФРМ упорядочением понимается то, что два атома Mn имеют противоположные по знаку магнитные моменты. В качестве обменно-корреляционного потенциала было выбрано приближение обобщенного градиента (GGA). Структурная оптимизация кристаллической решетки была выполнена с помощью алгоритма Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно [8]. Вычисления обменных параметров были выполнены с помощью пакета SPR-KKR [9]. В основе данного пакета лежит формализм функций Грина с применением теории многочастичного рассеяния. Для вычисленного равновесного параметра решетки на первом этапе были проведены расчеты самосогласованного потенциала (SCF). Для SCF циклов была сгенерирована сетка $\{22, 22, 22\}$ с $834 k$ точками. Все вычисления были выполнены с точностью до 0.01 мРд. На втором этапе были вычислены параметры магнитного обменного взаимодействия с использованием спин-поляризованного релятивистского гамильтониана на пространственной сетке $\{57, 57, 57\}$, содержащей $4495 k$ точек. Все вычисления были выполнены на $L2_1$ кубической структуре, состоящей из четырех атомов в элементарной ячейке. Атомные позиции представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Атомные позиции сплавов Mn_2NiX ($X = Ga, In, Sn, Sb$)

Атом	Координаты (x, y, z)
Mn ₁	(0.25, 0.25, 0.25)
X	(0.75, 0.75, 0.75)
Mn ₂	(0.5, 0.5, 0.5)
Ni	(0, 0, 0)

На рисунке 1(а, б) представлены зависимости энергии сплавов Mn_2NiX ($X = Ga, In, Sn, Sb$) от параметра элементарной ячейки для ФМ и ФРМ состояний. Вычисления показали, что для всех соединений ФРМ состояние является более выгодным, т.к. это состояние имеет более низкую энергию. Полученные равновесные значения параметра элементарной ячейки и магнитные конфигурации были использованы для дальнейших

расчетов параметров обменного взаимодействия. Обменные интегралы представлены на рисунке 1(в, г).

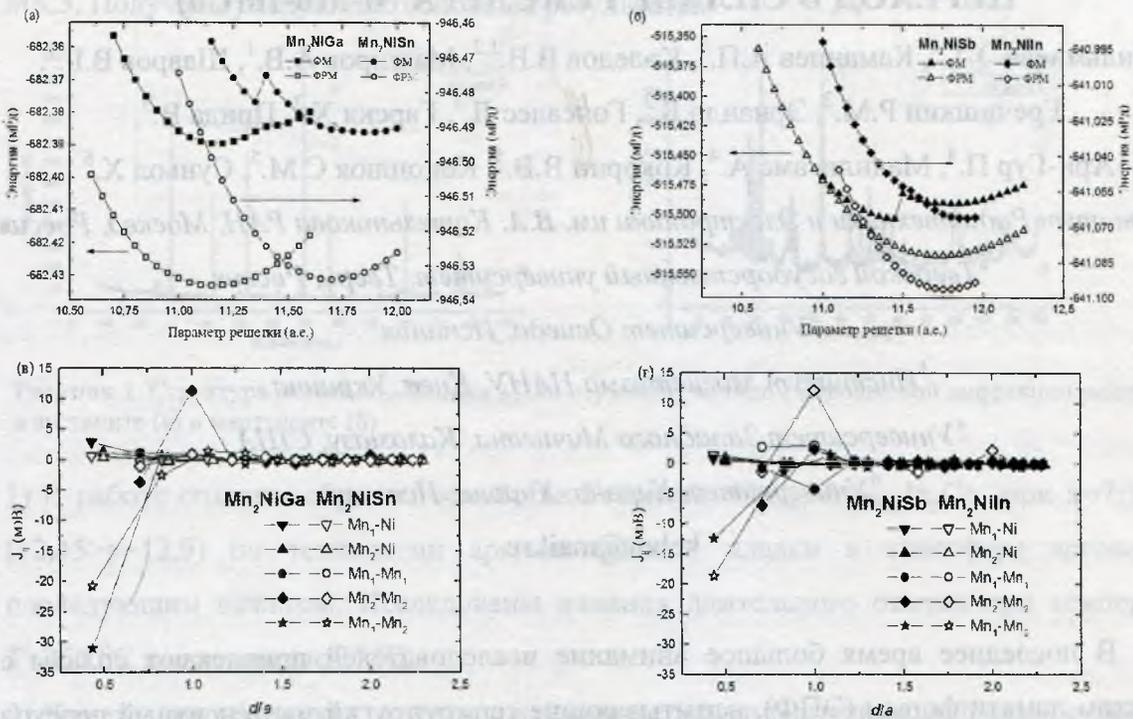


Рисунок 1. Релаксация кристаллической решетки для сплавов Mn₂NiX(а, б). Интегралы обменного взаимодействия как функции расстояния между атомами в сплавах Mn₂NiX (X = Ga, In, Sn, Sb) (в, г). Здесь, *a* – равновесный параметр решетки

Из рисунков 1 (в, г) следует, что во всех исследуемых сплавах взаимодействия между атомами Mn₁ и Mn₂ являются отрицательными, что говорит об антиферромагнитном (АФМ) взаимодействии. Более того, это взаимодействие по величине является самым наибольшим. Расчеты также показали, что для сплавов Mn₂NiGa и Mn₂NiIn, взаимодействия между атомами Mn₂ во второй координационной сфере являются наибольшими по сравнению с Mn₂NiSb и Mn₂NiSn и носят ФМ характер.

Таким образом, первопринципные исследования сплавов Гейслера Mn₂NiX (X = Ga, In, Sn, Sb) показали, что в данных системах реализуется основное ферромагнитное состояние в кубической фазе с большой величиной АФМ взаимодействия между атомами Mn₁ и Mn₂.

1. T. Graf, S.S. P. Parkin, and C. Felser, Progress in Solid State Chemistry 39, 1 (2011).
2. A.N. Vasil'ev, V.D. Buchel'nikov, T. Takagi et al., Phys. Usp. 46, 559 (2003).
3. A. Planes, L. Manosa and M. Acet J. Phys.: Condens. Matter 21, 233201 (2009).
4. G.D. Liu, J.L. Chan, Z.H. Liu et al., Appl. Phys. Lett. 87, 262504 (2005).
5. P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, S.L. Town et al., Philosophical Mag: B. 49, 295-810 (1984).
6. G.D. Liu, X.F. Dai, S.Y. Yu et al., Phys. Rev. B 74, 054435 (2006).
7. H. Luo, G. Liu, Z. Feng et al., JMMM 321, 4063 (2009).
8. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al., J. Phys.: Condens. Matter. 21, 395502 (2009).
9. H. Ebert, D. Kodderitzsch and J. Minar, Reports on Progress in Physics 74, 096501 (2011).