

ПАРАМЕТРЫ МАГНИТНОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ТЕМПЕРАТУРА КЮРИ В СПЛАВЕ $\text{Fe}_{75}\text{Ga}_{25}$

М.В. Матюнина, М.А. Загребин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: matunins.fam@mail.ru

Аннотация. Для кристаллических структур D0_3 и L1_2 сплава $\text{Fe}_{75}\text{Ga}_{25}$ в рамках теории функционала плотности рассчитаны параметры магнитного обменного взаимодействия J_{ij} с помощью гамильтониана, построенного на основе базиса функций Ванье. Наибольшее ферромагнитное взаимодействие в первой координационной сфере в фазе L1_2 составляет 18 мэВ, что на 3 мэВ меньше по сравнению с результатами, полученными с помощью метода функций Грина Корринга–Кона–Ростокера. В фазе D0_3 наибольшее ферромагнитное взаимодействие в первой координационной сфере наблюдается между атомами разных подрешеток Fe. Разница с результатами, полученными ранее с помощью метода Корринга–Кона–Ростокера составляет ≈ 10 мэВ. В результате моделирования Монте-Карло с использованием полученных значений параметров магнитного обмена оценены температуры Кюри. Для структуры L1_2 температура Кюри составляет 1007 К, что сопоставимо с экспериментальными данными. Температура Кюри для структуры D0_3 составляет 517 К, что ниже экспериментального значения на 200 К.

Ключевые слова: сплавы на основе Fe; первопринципные расчеты; функции Ванье; параметры обменного взаимодействия; температура Кюри.

Введение

В настоящее время интенсивно возрастающий интерес научного сообщества обращен на исследование и развитие высокопроизводительных материалов нового поколения. Таковыми являются магнитомягкие сплавы на основе железа Fe-Al, Fe-Ga и Fe-Ge, привлекающие внимание своими необычными механическими, электрическими и магнитными свойствами [1]. Высокие значения магнитострикции насыщения в низких магнитных полях, высокий предел прочности, хорошая пластичность и ударопрочность, слабая зависимость магнитомеханических свойств в широком диапазоне температур [2] позволяют рассматривать сплавы Fe-Ga в качестве альтернативы сплавам с редкоземельными элементами, например, $\text{Dy}_{0.7}\text{Tb}_{0.3}\text{Fe}_2$ [1–4]. Указанные сплавы сохраняют ферромагнитные (ФМ) свойства в широком концентрационном диапазоне, так, например, температура Кюри T_C при содержании немагнитных атомов 25 ат. % достигает значений $T_C = 758$ К, 730 К и 710 К в Fe-Al, Fe-Ga и Fe-Ge соответственно [5, 6]. В области твердого раствора A2 наблюдается плавное снижение T_C по мере растворения немагнитных атомов в железе. При повышенном содержании легирующего элемента до 20–30 ат. % концентрационная зависимость температуры T_C качественно изменяется и определяется особенностями состояния формирующихся упорядоченных фаз [5, 6]. Так, в сплаве Fe-Ga в этой области концентраций наибольшую температуру Кюри (около 900 К) имеет фаза L1_2 (221-я группа симметрии, $Pm\bar{3}m$), а температура T_C фазы D0_3 существенно ниже [6] ($T_C \approx 600$ К).

С теоретической точки зрения концентрационные зависимости T_C могут быть определены в рамках приближения молекулярного поля (ПМП) и в рамках микроскопического подхода, сочетающего в себе моделирование методом Монте-Карло (МК) трехмерной модели Гейзенберга $H = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j$ с *ab initio* расчетами при $T = 0$ К параметров обменного взаимодействия J_{ij} . Описанный выше микроскопический подход позволяет получить температурные зависимости намагниченностей, из которых и определяется T_C . Исследование концентрационной зависимости T_C для сплавов Fe-Al, Fe-Ga и Fe-Ge в кристаллических структурах A2 и D0_3 в приближении среднего поля с учетом влияния выбора широко известных и апробированных функционалов приближения обобщенного градиента (*general gradient approximation*, GGA) и приближения локальной плотности (*local density approximation*, LDA) было проведено в работе [7]. Поведение зависимости $T_C(x)$ качественно соответствует экспериментальному, однако полученные значения превы-

шают экспериментальные данные на величину порядка 400 К и 250 К в приближении GGA и LDA соответственно. Исследование зависимости $T_C(x)$ при помощи микроскопического подхода, сочетающего в себе *ab initio* расчеты и моделирование методом МК, выполненное для сплавов Fe-Ga, представлено в работах [8–10]. Как и в случае ПМП, теоретические расчеты методом МК дают завышенные значения. Возможное объяснение этого факта может быть связано с первопринципными параметрами для расчета констант магнитного обменного взаимодействия, полученными при помощи программного пакета SPRKKR [11] в рамках метода Коринги–Кона–Ростокера и теории многократного рассеяния в формулировке, предложенной Лихтенштейном [12]. Для создания нестехиометрических композиций в данном пакете используется приближение когерентного потенциала (*coherent potential approximation*, CPA), что предполагает использование некоторой эффективной среды, в которой один из компонентов внедрен таким образом, чтобы воспроизвести усредненную концентрацию всех компонентов среды. Применение такой усредненной среды может давать завышенные значения параметров магнитного обменного взаимодействия, что в конечном итоге сказывается на величине T_C .

Расчет параметров магнитного обменного взаимодействия вне приближения когерентного потенциала может быть выполнен в рамках теории функционала плотности (*density functional theory*, DFT) с использованием подхода суперячеек при создании нестехиометрических композиций при помощи Гамильтониана для расчета J_{ij} , построенного в базе функций Ванье [13]. Такой подход к расчету параметров магнитного обменного взаимодействия позволяет оценить влияние окружения немагнитных атомов на элементы основного твердого раствора и, соответственно, оценить роль ближнего порядка в распределении легирующего элемента на магнитные свойства исследуемой кристаллической структуры.

Целью данной работы является расчет в рамках теории функционала плотности параметров магнитного обменного взаимодействия с применением базиса максимально локализованных функций Ванье, а также оценка температуры Кюри, полученной в рамках микроскопического подхода моделированием методом Монте-Карло с учетом J_{ij} , полученных с помощью функций Ванье.

Детали вычислений

В качестве объектов были выбраны кристаллические структуры $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$, расчет структурных и магнитных характеристик которых ранее выполнялся коллективом авторов и представлен в ряде работ [7–10]. Все расчеты выполнены при помощи метода проекционных присоединенных волн (*projector augmented wave*, PAW), реализованного в программном пакете VASP [14, 15]. Учет обменно-корреляционных эффектов был проведен для функционала – GGA по схеме Пердю, Бурке и Эрнцерхофа (Perdew, Burke, Ernzerhof – PBE) [16]. В рамках PAW-потенциалов использовались следующие электронные конфигурации: $Fe(3p^6 3d^7 4s^1)$ и $Ga(3d^{10} 4s^2 4p^1)$. Энергия обрезания плоских волн составила 440 эВ. Для расчетов учитывалась плотность k -сетки ≈ 5000 k -точек на обратную решетку. Критерий сходимости при проведении геометрической оптимизации составил 10^{-8} эВ/ячейку, сходимость по силам составляла менее 10^{-3} эВ/Å. На рис. 1 представлены примитивные ячейки исследуемых кристаллических структур $L1_2$ и $D0_3$ в стехиометрической композиции.

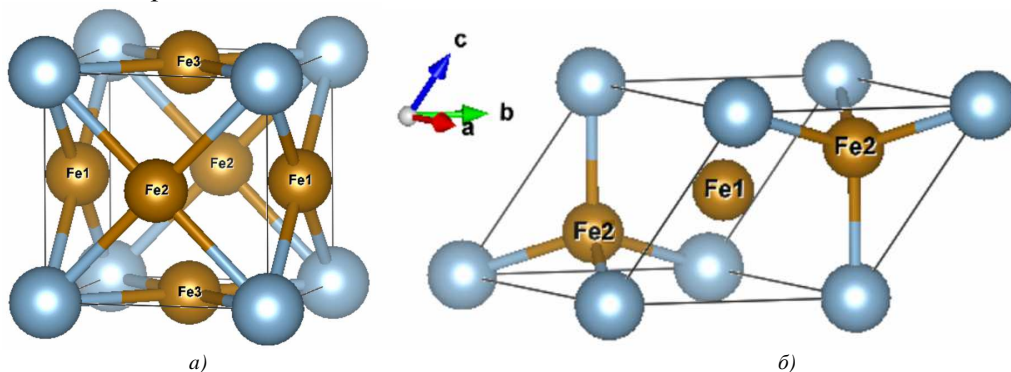


Рис. 1. Модельные примитивные кристаллические решетки исследуемых структур сплавов $Fe_{75}Ga_{25}$: а) $L1_2$ ($Pm-3m$, №221), атомы $Fe_{1,2,3}$ локализованы на позиции Уайкова $3c$ (0; 0,5; 0,5), (0,5; 0; 0,5), (0,5; 0,5; 0); б) $D0_3$ ($Fm-3m$, №225), атомы Fe_1, F_2 расположены на позициях $4b$ (0,5; 0,5; 0,5) и $8c$ (0,25; 0,25; 0,25), (0,75; 0,75; 0,75) соответственно. Серебристые сферы соответствуют расположению немагнитных атомов Ga

В гранецентрированной решетке $L1_2$ три атома железа занимают позиции Уайкова $3c$ (0; 0,5; 0,5), (0,5; 0; 0,5) и (0,5; 0,5; 0), немагнитные атомы располагаются в позиции $1a$ (0; 0; 0). В решетке $D0_3$ атом Fe_1 занимает позицию $4b$ (0,5; 0,5; 0,5), атом $Fe_2 - 8c$ (0,25; 0,25; 0,25) и (0,75; 0,75; 0,75), атом $Ga - 4a$ (0; 0; 0).

После проведения геометрической оптимизации для каждой из исследуемых структур были рассчитаны максимально-локализованные функции Ванье по методу Марзари и Вандербилята в рамках программного пакета Wannier90 [17]. В первопринципных программных пакетах кристаллы представляют собой регулярную периодическую структуру, и, согласно теореме Блоха, потенциал, действующий на электрон в кристалле, имеет размерность кристалла, что позволяет свести задачу к решению уравнений Кона–Шэма для электронов в рамках элементарной ячейки, находящихся в бесконечном периодическом твердом теле. Локализованный набор обобщенных функций Ванье, представляющий множество локализованных ортонормированных орбиталей, строился из волновых функций Блоха и охватывал то же пространство, что и указанный набор функций Блоха. Альтернативное представление может быть дано в терминах пространственно-локализованных функций Ванье. Непосредственно константы обменного взаимодействия рассчитывались при помощи пакета TB2J python [18] в рамках метода функций Грина с локальным жестким вращением спина, рассматриваемым как возмущение [13]. Полученная зависимость множественности J_{ij} от расстояния между взаимодействующими атомами использовалась в качестве входных параметров в моделировании МК с использованием кода Vampire 5.0 [19].

Оценка температуры Кюри по кривым $M(T)$ проводилась при помощи построения функции $M^{1/\beta}(T)$, линейно убывающей с ростом температуры, и определялась на пересечении кривой $M^{1/\beta}$ с осью T , где $\beta = 0,3646$ – критический индекс трехмерной модели Гейзенберга.

Результаты расчетов и обсуждение

Геометрическая оптимизация. Результаты геометрической оптимизации исследуемых кристаллических структур $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$, выполненных при помощи программного пакета VASP в приближении GGA, представлены в табл. 1.

В табл. 1 приведены экспериментальные и теоретические литературные данные с указанием программного пакета и функционала для случая, если он не рассматривался в настоящей работе. Как можно видеть из табл. 1, полученные результаты и литературные данные для равновесных параметров решетки практически не отличаются друг от друга и их значения меньше экспериментальных. Разница теоретических значений с экспериментальными данными не превышает 1 %. Значения $a_{теор.}$ также хорошо согласуются с теоретическими расчетами, полученными в рамках подхода, основанного на применении теории многократного рассеяния, называемого формализмом Корринги–Кона–Ростокера (SPRKKR) [19, 20].

Таблица 1

Равновесные расчетные $a_{теор.}$ (Å) и экспериментальные $a_{эксп.}$ (Å) параметры решеток, полные расчетный $\mu_{теор.}$ (мБ/ат.) и экспериментальный $\mu_{эксп.}$ (мБ/ат.) магнитные моменты исследуемых кристаллических структур $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$, полученные в настоящей работе и взятые из литературных данных. В квадратных скобках приведена информация о программном пакете, при помощи которого выполнены расчеты и функционале

Фаза	$a_{теор.}$	$a_{эксп.}$	$\mu_{теор.}$	$\mu_{эксп.}$
$D0_3$	5,75	5,81 [6]	1,54	1,54 [6]
	5,82 [10, SPRKKR]			
$L1_2$	3,65	3,68 [6]	1,74	1,80 [6]
	3,69 [10, SPRKKR]		1,74 [7, SPRKKR]	
	3,59* [10, SPRKKR]		1,74* [7, SPRKKR]	

* расчеты выполнены с учетом функционала LDA

Постоянные обменного взаимодействия. На втором этапе расчетов для исследуемых фаз был получен локализованный набор обобщенных функций Ванье, представляющий множество локализованных ортонормированных орбиталей, построенный на базе волновых функций Блоха и охватывающий то же пространство, что и указанный набор функций Блоха (далее по тексту и на рисунках сокращенно будем обозначен как VASP). Для получения базиса волновых функций задавались орбитали s -, p -, d - для атомов Fe и s -, p - для немагнитных атомов Ga. На рис. 2 представлена зависимость параметров магнитного обменного взаимодействия J_{ij} от расстояния $d/a \leq 1$ между атомами i и j в кристаллических структурах $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$.

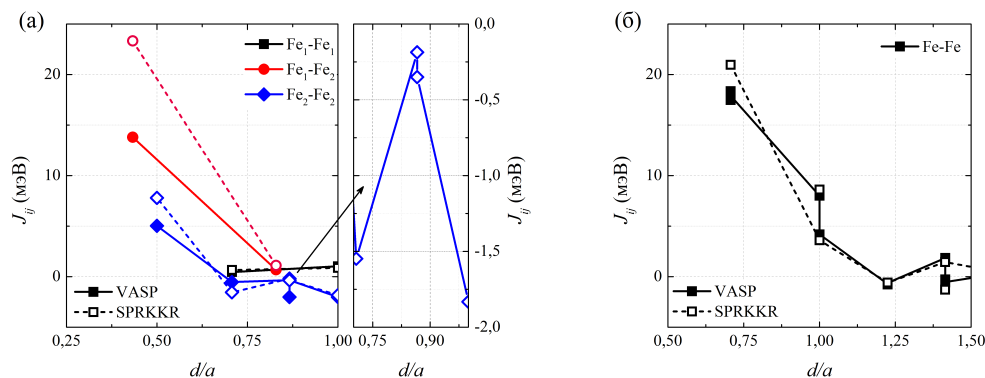


Рис. 2. Зависимость параметров магнитного обменного взаимодействия J_{ij} от расстояния d/a между атомами i и j кристаллической структуры $D0_3$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$, полученные в приближениях: а) в программном пакете SPRKKR [21] (полые символы); в программном пакете VASP (сплошные символы) и б) J_{ij} в структуре $L1_2$

На рис. 2, а представлены результаты, ранее полученные в программном пакете SPRKKR [8] в приближении GGA (далее по тексту и на рисунках сокращенно будут обозначены как SPRKKR). Как можно видеть, наибольшее ФМ ($J_{ij} > 0$) взаимодействие наблюдается в первой координационной сфере для атомов Fe_1 - Fe_2 , расположенных на позициях $4b$ (0,5; 0,5; 0,5) и $8c$ (0,25; 0,25; 0,25), (0,75; 0,75; 0,75) соответственно (см. рис. 1 расположения атомов в решетке). Величина обменного взаимодействия составляет $J_{ij} \approx 23$ мЭВ в программном пакете SPRKKR, и ≈ 13 мЭВ при расчете J_{ij} с применением базиса максимально локализованных функций Ванье.

Можно отметить, что для атомов Fe_2 в третьей координационной сфере наблюдается расщепление взаимодействия на слабое ФМ и антиферромагнитное (АФМ, $J_{ij} < 0$). Расчеты J_{ij} в программном пакете SPRKKR предсказывают расщепление на АФМ-АФМ взаимодействие величиной $-0,19$ мЭВ и $-0,35$ мЭВ (см. вставку на рис. 2, а)). В структуре $L1_2$ (см. рис. 2, б) наибольшее ФМ взаимодействие также наблюдается в первой координационной сфере. Значения, рассчитанные при помощи программного пакета SPRKKR [8], составляют ≈ 21 мЭВ, для программного пакета VASP – 18 мЭВ.

Температура Кюри. Набор параметров J_{ij} в зависимости от расстояния между взаимодействующими атомами в кристаллических структурах $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$, полученный в программном пакете SPRKKR с учетом приближения когерентного потенциала и приближения среднего поля, а также с применением базиса максимально локализованных функций Ванье в пакете VASP, использовался в качестве входных параметров в моделировании методом МК. В табл. 2 представлены результаты расчета температуры Кюри в сравнении с экспериментальными данными [6]. Расчетные значения T_C в кристаллических структурах $L1_2$ и $D0_3$, полученные в ПМП, существенно превышают экспериментальные. В фазе $L1_2$ температура Кюри, рассчитанная на основании J_{ij} как при помощи программного пакета SPRKKR, так и VASP, хорошо согласуются с экспериментом. Дополнительно стоит отметить, что указанные экспериментальные значения T_C в структуре $L1_2$ получены методом экстраполяции [6] кривых намагниченности. Также из табл. 2 можно отметить, что в фазе $D0_3$ расчетные значения практически равноудалены от экспериментального: SPRKKR – завышенные значения, VASP – заниженные. Такая ситуация непосредственно объясняется значениями обменных взаимодействий, полученных разными пакетами. Как видно из рис. 2, для структуры $L1_2$ разница значений в первой координационной сфере составляет не многим более 3 мЭВ, в то время как для $D0_3$ $J_{ij}^{SPRKKR} - J_{ij}^{VASP} \approx 10$ мЭВ и 2,5 мЭВ – для взаимодействий Fe_1 - Fe_2 и Fe_2 - Fe_2 соответственно.

Таблица 2

Температура Кюри T_C (в К), вычисленная с помощью рассчитанных параметров обменного взаимодействия. Для сравнения приведено теоретическое значение T_C , полученное с помощью МК моделирования обменных интегралов в программном пакете SPRKKR, в ПМП и экспериментальные данные

Фаза	T_C	T_C (SPRKKR)	T_C (ПМП)	T_C (эксперимент)
$D0_3$	517	987	1278	730 [6]
$L1_2$	1007	1060	1463	1040*[6]

* данные, полученные экстраполяцией

Заключение

В работе апробирован подход получения параметров магнитного обменного взаимодействия через гамильтониан функций Ванье, что позволяет получить значения J_{ij} для каждого из атомов в суперячейке без создания эффективной среды как в случае программного пакета SPRKKR. Данный подход позволяет проанализировать влияние ближайшего окружения немагнитных атомов на обменные параметры J_{ij} магнитных элементов, а также учесть влияние локальных деформаций, вносимых немагнитными атомами. В качестве объекта выбраны хорошо исследованные структуры $D0_3$ и $L1_2$ сплава $Fe_{75}Ga_{25}$.

Величина обменных взаимодействий, рассчитанная в структуре $L1_2$ при помощи программных пакетов SPRKKR и VASP, различается слабо. Разница значений J_{ij} в первой координационной сфере составляет ≈ 3 мэВ. В случае фазы $D0_3$ при расчетах пакетом VASP различие более существенно, оно наблюдается для двух типов взаимодействий – Fe_1-Fe_2 и Fe_2-Fe_2 . Разница с ранее полученными значениями при помощи пакета SPRKKR составляет ≈ 10 мэВ и 2,5 мэВ соответственно для взаимодействий Fe_1-Fe_2 и Fe_2-Fe_2 . Для атомов Fe_2 в третьей координационной сфере наблюдается расщепление взаимодействия на слабое ферромагнитное и антиферромагнитное, что не предсказывается в программном пакете SPRKKR.

Расчёт температуры Кюри методом моделирования Монте-Карло с использованием параметров магнитного обменного взаимодействия, полученных двумя способами (пакетами SPRKKR и VASP), приводит к следующим результатам. В фазе $L1_2$ температуры Кюри, рассчитанные на основании J_{ij} , полученных при помощи программного пакета SPRKKR и с помощью функций Ванье в программном пакете VASP, хорошо согласуются с экспериментом. Для фазы $D0_3$ оба подхода дают значение T_C , отличное от экспериментальной на величину ≈ 200 К. Использование параметров магнитного взаимодействия, полученных с помощью функций Ванье в пакете VASP, дает заниженный результат, в то время как параметры магнитного взаимодействия, полученные с помощью функций Грина Корринга–Кона–Ростокера в пакете SPRKKR – завышенный результат.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20086, <https://rscf.ru/project/24-22-20086/>.

Литература

1. Structure and Properties of Fe–Ga Alloys as Promising Materials for Electronics / I.S. Golovin, V.V. Palacheva, A.K. Mohamed, A.M. Balagurov // *Physics of Metals and Metallography*. – 2020. – Vol. 121. – P. 851–893.
2. Extraordinary Magnetoelasticity and Lattice Softening in BCC Fe-Ga Alloys / A.E. Clark, K.B. Hathaway, M. Wun-Fogle *et al.* // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 93, Iss. 109. – P. 8621–8623.
3. Балагуров, А.М. Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe–Ga, Fe–Al) / А.М. Балагуров, И.С. Головин // *УФН*. – 2021. – Т. 191, Вып. 7. – С. 738–759.
4. Гигантская магнитострикция / К.П. Белов, Г.И. Катаев, Р.З. Левитин // *УФН*. – 1983. – Т. 140, Вып. 6. – С. 271–313.
5. Okamoto, H. The Fe-Ga (Iron-Gallium) System / H. Okamoto // *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*. – 1990. – Vol. 11. – P. 576–581.
6. Kawamiya, N. Magnetic Properties and Mössbauer Investigations of Fe-Ga Alloys / N. Kawamiya, K. Adachi, Y. Nakamura // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1972. – Vol. 33, no. 5. – P. 1318–1327.
7. The Effect of Exchange-Correlation Potentials on Magnetic Properties of Fe-(Ga, Ge, Al) Alloys / M.A. Zagrebina, M.V. Matyunina, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2019. – Vol. 1389. – P. 012087.
8. *Ab initio* Study of Magnetic and Structural Properties of Fe-Ga Alloys / M. Matyunina, M. Zagrebina, V. Sokolovskiy, V. Buchelnikov // *EPJ Web of Conferences*. – 2018. – Vol. 185. – P. 04013.
9. Magnetic Properties of $Fe_{100-x}Ga_x$: *Ab initio* and Monte Carlo study / M.V. Matyunina, M.A. Zagrebina, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2019. – Vol. 470. – P. 118–122.

10. Исследование свойств сплавов Fe-Ga из *ab initio* вычислений / М.В. Матюнина, М.А. Загребин, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников // Челябинский физико-математический журнал. – 2017. – Т. 2, № 2. – С. 231–240.
11. Ebert, H. Calculating Condensed Matter Properties using the KKR-Green's Function Method – Recent Developments and Applications / H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár // Reports on Progress in Physics. – 2011. – Vol. 74, no. 9. – P. 096501.
12. Local Spin Density Functional Approach to the Theory of Exchange Interactions in Ferromagnetic Metals and Alloys / A.I. Liechtenstein, M. Katsnelson, V. Antropov, V.A. Gubanov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1987. – Vol. 67, Iss. 1. – P. 65–74.
13. Wannier, G.H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals / G.H. Wannier // Physical Review. – 1937. – Vol. 52, Iss. 3. – P. 191–197.
14. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, and J. Furthmüller // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169.
15. Kresse, G. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method / G. Kresse, D. Joubert // Physical Review B. – 1999. – Vol. 59, Iss. 3. – P. 1758.
16. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1996. – Vol. 77, Iss. 18. – P. 3865.
17. Wannier90 as a Community Code: New Features and Applications / G. Pizzi, V. Vitale, R. Arita *et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2020. – Vol. 32, Iss. 16. – P. 165902.
18. TB2J: A Python Package for Computing Magnetic Interaction Parameters / X. He, N. Helbig, M.J. Verstraete, E. Bousquet // Computer Physics Communications. – 2021. – Vol. 264. – P. 107938.
19. Constrained Monte Carlo Method and Calculation of the Temperature Dependence of Magnetic Anisotropy / P. Asselin, R.F.L. Evans, J. Barker *et al.* // Physical Review B. – 2010. – Vol. 82, Iss. 5. – P. 054415.
20. Tetragonal Magnetostriction and Magnetoelastic Coupling in Fe-Al, Fe-Ga, Fe-Ge, Fe-Si, Fe-Ga-Al, and Fe-Ga-Ge Alloys / J.B. Restorff, M. Wun-Fogle, K.B. Hathaway *et al.* // Journal of Applied Physics. – 2012. – Vol. 111, Iss. 2. – P. 023905.
21. Kubaschewski, O. Iron-Binary Phase Diagrams / O. Kubaschewski. – Berlin: Springer Berlin, Heidelberg, 1982. – 185 p.

Поступила в редакцию 12 июля 2024 г.

Сведения об авторах

Матюнина Мария Викторовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: matunins.fam@mail.ru.

Загребин Михаил Александрович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: miczag@mail.ru.

Соколовский Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Бучельников Василий Дмитриевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики конденсированного состояния, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: buche@csu.ru

**MAGNETIC EXCHANGE PARAMETERS AND THE CURIE TEMPERATURE
OF Fe₇₅Ga₂₅ ALLOY**

M.V. Matyunina, M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: matunins.fam@mail.ru

Abstract. This paper studies the parameters of the magnetic exchange interaction J_{ij} for the crystal structures of D0₃ and L1₂ Fe₇₅Ga₂₅ alloys using the Hamiltonian based on Wannier functions and the density functional theory. The largest ferromagnetic interaction in the first coordination sphere for the L1₂ phase was 18 meV, which is 3 meV less than the results obtained using Green's function method. In the D0₃ phase the largest ferromagnetic interaction in the first coordination sphere is observed between atoms of different iron sublattices. The difference from the results obtained previously using the Korringa-Kohn-Rostoker method is approximately 10 meV. Using the values of the magnetic exchange parameters, the Curie temperature was calculated in a Monte Carlo simulation. For the L1₂ structure, the Curie temperature was estimated to be 1007 K, which is in good agreement with experimental data. However, for the D0₃ structure, the estimated Curie temperature of 517 K is lower than the experimental value by about 200 K.

Keywords: Fe-based alloys; first principles calculations; Wannier functions; magnetic exchange parameters; Curie temperature.

References

1. Golovin I.S., Palacheva V.V., Mohamed A.K., Balagurov A.M. Structure and Properties of Fe–Ga Alloys as Promising Materials for Electronics. *Phys. Metals Metallogr.*, 2020, Vol. 121, pp. 851–893. DOI: 10.1134/S0031918X20090057
2. Clark A.E., Hathaway K.B., Wun-Fogle M., Restorff J.B., Lograsso T.A., Keppens V.M., Petculescu G., Taylor R.A. Extraordinary Magnetoelasticity and Lattice Softening in BCC Fe–Ga Alloys. *J. Appl. Phys.*, 2003, Vol. 93, pp. 8621–8623. DOI: 10.1063/1.1540130
3. Balagurov A.M., Golovin I.S. Neutron Scattering in Studies of Fe-Based Functional Alloys (Fe–Ga, Fe–Al). *Phys.-Usp.*, 2021, Vol. 64, pp. 702–721. DOI: 10.3367/UFNe.2020.11.038886
4. Belov K.P., Kataev G.I., Levitin R.Z., Nikitin S.A., Sokolov V.I. Giant Magnetostriction. *Sov. Phys. Usp.*, 1983, Vol. 26, pp. 518–542. DOI: 10.1070/PU1983v026n06ABEH004435
5. Okamoto H. The Fe–Ga (Iron–Gallium) System. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1990, Vol. 11, pp. 576–581. DOI: 10.1007/BF02841721
6. Kawamiya N., Adachi K., Nakamura Y. Magnetic Properties and Mössbauer Investigations of Fe–Ga Alloys. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1972, Vol. 33, no. 5, pp. 1318–1327. DOI: 10.1143/JPSJ.33.1318
7. Zagrebin M.A., Matyunina M.V., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. The Effect of Exchange-Correlation Potentials on Magnetic Properties of Fe–(Ga, Ge, Al) Alloys. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, Vol. 1389, pp. 012087. DOI: 10.1088/1742-6596/1389/1/012087
8. Matyunina M., Zagrebin M., Sokolovskiy V., Buchelnikov V. *Ab Initio* Study of Magnetic and Structural Properties of Fe–Ga Alloys. *EPJ Web of Conferences*, 2018, Vol. 185, p. 04013. DOI: 10.1051/epjconf/201818504013
9. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Magnetic Properties of Fe_{100–x}Ga_x: *Ab initio* and Monte Carlo Study. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2019, Vol. 470, pp. 118–122. DOI: 10.1016/j.jmmm.2017.11.011
10. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskiy V.V., Buchelnikov V.D. Investigations of Properties of Fe–Ga Alloys from *Ab Initio* Calculations. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2017, Vol. 2, Iss. 2, pp. 231–240. (in Russ.).

11. Ebert H., Ködderitzsch D., Minár J. Calculating Condensed Matter Properties using the KKR-Green's Function Method – Recent Developments and Applications. *Rep. Prog. Phys.*, 2011, Vol. 74, pp. 096501. DOI: 10.1088/0034-4885/74/9/096501
12. Liechtenstein A.I., Katsnelson M., Antropov V., Gubanov V.A. Local Spin Density Functional Approach to the Theory of Exchange Interactions in Ferromagnetic Metals and Alloys. *J. Magn. Magn. Mater.*, 1987, Vol. 67, Iss. 1, pp. 65–74. DOI: 10.1016/0304-8853(87)90721-9
13. Wannier G.H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Phys. Rev.*, 1937, Vol. 52, Iss. 3, pp. 191–197. DOI: 10.1103/PhysRev.52.191
14. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B.*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, p. 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
15. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B.*, 1999, Vol. 59, Iss. 3, p. 1758. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758
16. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, Vol. 77, Iss. 18, p. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
17. Pizzi G., Vitale V., Arita R., Blügel S., Freimuth F., Géranton G., Gibertini M., Gresch D., Johnson C., Koretsune J., Ibañez-Azpiroz, H. Lee, J.-M. Lihm, D. Marchand, A. Marrazzo, Mokrousov Yu., Mustafa J.I., Nohara Y., Nomura Y., Paulatto L., Poncé S., Ponweiser T., Qiao J., Thöle F., Tsirkin S.S., Wierzbowska M., Marzari N., Vanderbilt D., Souza I., Mostofi A.A., Yates J.R. Wannier90 as a Community Code: New Features and Applications. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2020, Vol. 32, p. 165902. DOI: 10.1088/1361-648X/ab51ff
18. He X., Helbig N., Verstraete M.J., Bousquet E. TB2J: A Python Package for Computing Magnetic Interaction Parameters. *Comput. Phys. Commun.*, 2021, Vol. 264, p. 107938. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.107938
19. Asselin P., Evans R.F.L., Barker J., Chantrell R.W., Yanes R., Chubykalo-Fesenko O., Hinzke D., Nowak U. Constrained Monte Carlo Method and Calculation of the Temperature Dependence of Magnetic Anisotropy. *Phys. Rev. B*, 2010, Vol. 82, Iss. 5, p. 054415. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.054415
20. Restorff J., Wun-Fogle M., Hathaway K.B., Clark A.E., Lograsso T.A., Petculescu G. Tetragonal Magnetostriction and Magnetoelastic Coupling in Fe-Al, Fe-Ga, Fe-Ge, Fe-Si, Fe-Ga-Al, and Fe-Ga-Ge Alloys. *J. Appl. Phys.*, 2012, Vol. 111, Iss. 2, p. 023905. DOI: 10.1063/1.3674318
21. Kubaschewski O. *Iron-Binary Phase Diagrams*. Springer Berlin, Heidelberg, 1982, 185 p. DOI: 10.1007/978-3-662-08024-5

Received July 12, 2024

Information about the authors

Matyunina Mariya Viktorovna, is Candidate of Science (Physics and Mathematics), Assistance Professor, Department of Condensed Matter Physics, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: matunins.fam@mail.ru.

Zagrebina Mikhail Aleksandrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, Department of Radiophysics and Electronics, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: miczag@mail.ru.

Sokolovskiy Vladimir Vladimirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, Department of Condensed Matter Physics, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Buchelnikov Vasily Dmitrievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of Condensed Matter Physics, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: buche@csu.ru.