

УДК 538.91,538.95

МЯГКИЕ ФОНОННЫЕ МОДЫ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА Ni_2MnGa И Ni_2MnAl

© 2019 г. В. Д. Бучельников¹, О. Н. Мирошкина^{1, *}, А. Т. Заяк²

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Челябинский государственный университет”, Челябинск, Россия

²Государственный университет Боулинг Грин, Боулинг Грин, США

*E-mail: miroshkina.on@yandex.ru

Поступила в редакцию 07.09.2018 г.

После доработки 31.01.2019 г.

Принята к публикации 27.03.2019 г.

В работе первопринципными методами исследованы фононные спектры сплавов Гейслера Ni_2MnGa и Ni_2MnAl . Изучено влияние удлинения суперячеек рассматриваемых сплавов на особенности фононных дисперсионных кривых. Показано, что удлинение ячеек влияет на поведение мягкой поперечной акустической моды TA_2 как для Ni_2MnGa , так и для Ni_2MnAl .

DOI: 10.1134/S036767651907010X

ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера были открыты в 1903 г. и до сих пор исследование их свойств является актуальным. Это объясняется наличием в данных сплавах ряда уникальных эффектов, таких как эффект памяти формы, гигантские магнитокалорический эффект, магнитосопротивление и др., связанные с мартенситными превращениями [1–6]. Значительное внимание также уделяется исследованию предмартенситного перехода, природа которого объясняется аномальным взаимодействием электронов и фононов [7–9]. Проведенные ранее теоретические исследования дают противоречивую картину поведения дисперсионных кривых фононного спектра. В связи с этим представляет интерес выяснить, какое влияние на фононный спектр сплавов Гейслера Ni_2MnGa и Ni_2MnAl будет оказывать удлинение суперячейки.

ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Вычисления выполнялись для направления $[110]_c$ кубической решетки типа $L2_1$, соответствующего направлению $[010]_l$ в тетрагональной решетке. Как известно из экспериментальных работ, это направление наиболее интересно с точки зрения неустойчивости поперечной акустической моды TA_2 [10]. Рассмотрено несколько типов суперячеек, которые были созданы посредством трансляции n примитивных ($1 \times 1 \times 1$) ячеек: $1 \times n \times 1$, где $n = 2, \dots, 8$.

Основное состояние и силы Гельмана–Фейнмана для определения спектра фононов рассчитывались с помощью первопринципного пакета VASP [11]. Полученные посредством *ab initio* расчетов результаты были использованы для вычисления фононных дисперсионных кривых с помощью программного пакета PHONON [12].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Фононные дисперсионные кривые, вычисленные в направлении $[110]_c$ для случаев удлинения суперячеек $1 \times n \times 1$, где $n = 1, \dots, 8$ для сплава Ni_2MnGa приведены на рис. 1. Здесь и далее все моды, кроме TA_2 , представлены только для одного случая удлинения суперячейки ввиду их мало-го изменения в зависимости от геометрии ячейки. Из рис. 1 видно, что поперечная акустическая мода TA_2 полностью смягчается вплоть до отрицательных частот во всех случаях удлинения суперячейки ($n = 2, \dots, 8$). Наибольшее смягчение наблюдается в случае удлинения суперячейки $1 \times 5 \times 1$ при волновом векторе $\mathbf{q} \approx 0.38$. Для случаев суперячеек $1 \times 5 \times 1$ и $1 \times 6 \times 1$ следует, что неустойчивыми будут волновые искажения только в определенном интервале длин волн (около $\mathbf{q} \approx 1/3$). Данные расчетов согласуются с экспериментальными результатами [13, 14]. При $n = 1$ смягчение TA_2 моды отсутствует. При $n = 2, \dots, 4$ и $n = 7, 8$ при малых волновых числах на малых и больших расстояниях наблюдаются большие “шумы” в силах Гельмана–Фейнмана, что приводит к отрицатель-

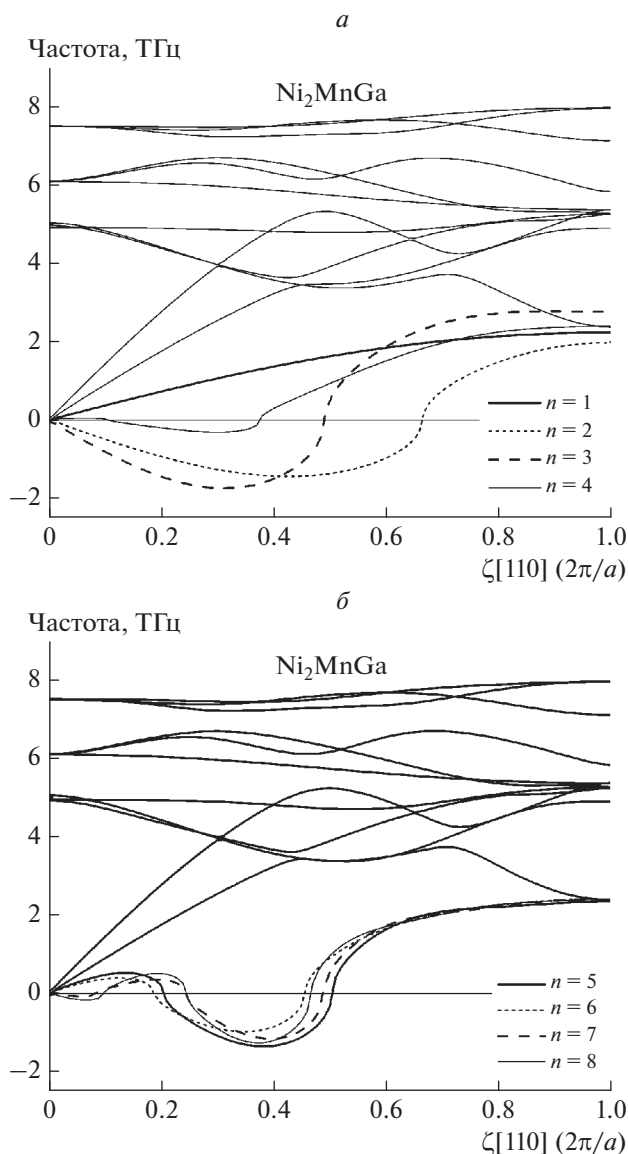


Рис. 1. Фононные дисперсионные кривые сплава Ni_2MnGa для случаев удлинения суперячеек $1 \times n \times 1$, где $a - n = 1, \dots, 4$; $b - n = 5, \dots, 8$.

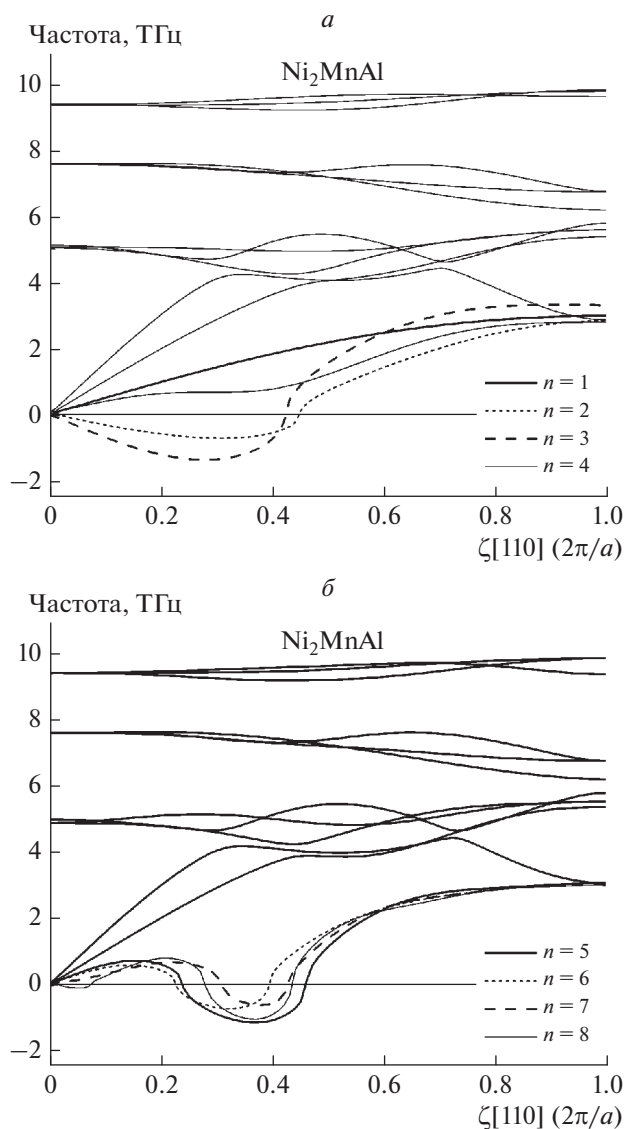


Рис. 2. Фононные дисперсионные кривые сплава Ni_2MnAl для случаев удлинения суперячеек $1 \times n \times 1$, где $a - n = 1, \dots, 4$; $b - n = 5, \dots, 8$.

ным значениям частот, которые не обусловлены предмартенситным переходом.

Фононные дисперсионные кривые, вычисленные в направлении $[110]_c$, для сплава Ni_2MnAl приведены на рис. 2. Поведение фононных кривых при $n = 1, \dots, 3$ и $n = 8$ аналогично случаю для сплава Ni_2MnGa . При $n = 4$ поперечная акустическая ветвь TA_2 не демонстрирует смягчения (рис. 2а). Данный результат согласуется с результатом работы [10], в которой рассмотрена суперячейка $4 \times 4 \times 4$. Однако, как видно из рис. 2б, при $n = 5, \dots, 7$ поперечная акустическая мода TA_2 смягчается вплоть до отрицательных частот с ми-

нимумом при значении волнового вектора $\mathbf{q} \approx 0.37$. Таким образом, видно, что увеличение длины ячейки приводит к нестабильности и уменьшению диапазона отрицательных частот TA_2 моды.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для различных случаев удлинения суперячеек $1 \times n \times 1$, где $n = 1, \dots, 8$ рассчитаны фононные спектры сплавов Гейслера Ni_2MnGa и Ni_2MnAl вдоль направления $[110]_c$, в котором, как известно из эксперимента, происходит смягчение поперечной акустической моды TA_2 . Установлено, что удлинение суперячейки влияет на смягчение ука-

занной моды фононных спектров. Показано, что для ячеек $1 \times n \times 1$ ($n = 1-4$) обоих сплавов в спектре фононов не наблюдаются никакие особенности в области волновых чисел $q \approx 1/3$, которые соответствуют предмартенситному переходу. Полное смягчение TA_2 моды в области волновых чисел $q \approx 1/3$ для обоих сплавов наблюдается для суперячеек при $n = 5-8$. Результаты расчетов для этих суперячеек в сплаве Ni_2MnGa хорошо согласуются с экспериментом [10]. В случае ячеек с $n = 1, \dots, 4, 7, 8$ в области малых волновых чисел также наблюдаются отрицательные частоты, но такое поведение связано с тем, что при малых и больших размерах расчетных ячеек возникают большие шумы, присущие методу, реализованному в программном пакете PHONON. Эти шумы превышают небольшие силы, действующие на малых и больших расстояниях в таких ячейках. Таким образом, при вычислении спектров фононов сплавов Гейслера с помощью пакета PHONON суперячейки $1 \times 5 \times 1$ и $1 \times 6 \times 1$ являются оптимальными.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 17-72-20022 (спектр Ni_2MnAl), РФФИ 18-32-00507-мол_a (спектр Ni_2MnGa) и Фонда поддержки молодых ученых ФГБОУ ВО "ЧелГУ".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Webster P.J. // Contemp. Phys. 1969. V. 10. P. 559.
2. Bozhko A.D., Vasil'ev A.N., Khovailo V.V. et al. // JETP Lett. 1998. V. 67. P. 227.
3. Entel P., Buchelnikov V.D., Khovailo V.V. et al. // J. Phys. D. 2006. V. 39. P. 865.
4. Бучельников В.Д., Васильев А.Н., Коледов В.В. и др. // УФН. 2006. Т. 176. № 8. С. 900; Buchel'nikov V.D., Vasil'ev A.N., Koledov V.V. et al. // Phys. Usp. 2006. V. 49. № 8. P. 871.
5. Entel P., Gruner M.E., Dannenberg A. // Mat. Sci. Forum. 2010. V. 635. P. 3.
6. Webster P.J., Ziebeck K.R.A., Town S.L. et al. // Philos. Mag. B. 1984. V. 49. P. 295.
7. Dugdale S.B. // Phys. Scr. 2016. V. 91. Art. № 053009.
8. Lee Y., Rhee J.Y., Harmon B.N. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. Art. № 054424.
9. Bungaro C., Rabe K.M., Corso A.D. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. Art. № 134104.
10. Zheludev A., Shapiro S.M., Wochner P., Tanner L.E. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. № 15045.
11. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. № 11169.
12. Parlinski K., Li Z.Q., Kawazoe Y. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 4063.
13. Zheludev A., Shapiro S.M., Wochner P. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. Art. № 11310.
14. Zheludev A., Shapiro S.M., Wochner P., Tanner L.E. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. № 15045.