

ӘӨЖ538.93

Fe₃Ga ҚОСЫЛЫСЫНЫҢ МАГНИТТІ АНИЗОТРОПИЯСЫ ЖӘНЕ ТҰРАҚТЫЛЫҒЫ

Елтізарова Маржан Жанатқызы

meltizarova@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Ядролық физика және жаңа материалдар кафедрасының -Наноматериалдар мен нанотехнологиялар мамандығының 2-курс магистранты, Нұр-Сұлтан,Қазақстан
Ғылыми жетекшісі-Абуова Ф.У.

Ұзақ диапазондағы тәртіп пен фазалық араласудан басқа, қысқа диапазондағы реттілік материалдың қасиеттеріне де әсер етеді. Ga-Ga атом жұптары бар «B2-тәрізді» құрылым <100 > бағыты бойынша түзілетіні көрсетілді. Бұл жұптар A2 құрылымы бар Fe_{1-x}Ga_x қорытпасындағы магнитострикцияның байқалған ұлғаюына жауап береді [1]. Дифференциалды рентгендік абсорбциялық спектроскопия арқылы талдау мұндай жұптардың бар екенін растады. Макроскопиялық түрде байқалатын магнитострикция Ga ортасынан орын алады. Ga-Ga жұптарының өзі магнитострикцияның күшеюіне ықпал етпейді. Ga-Ga жұптарының жанындағы магнитострикциялық деформация, бірақ ақаулардың өзі емес, магнитострикцияның ұлғаюының көзі болып табылады [2].

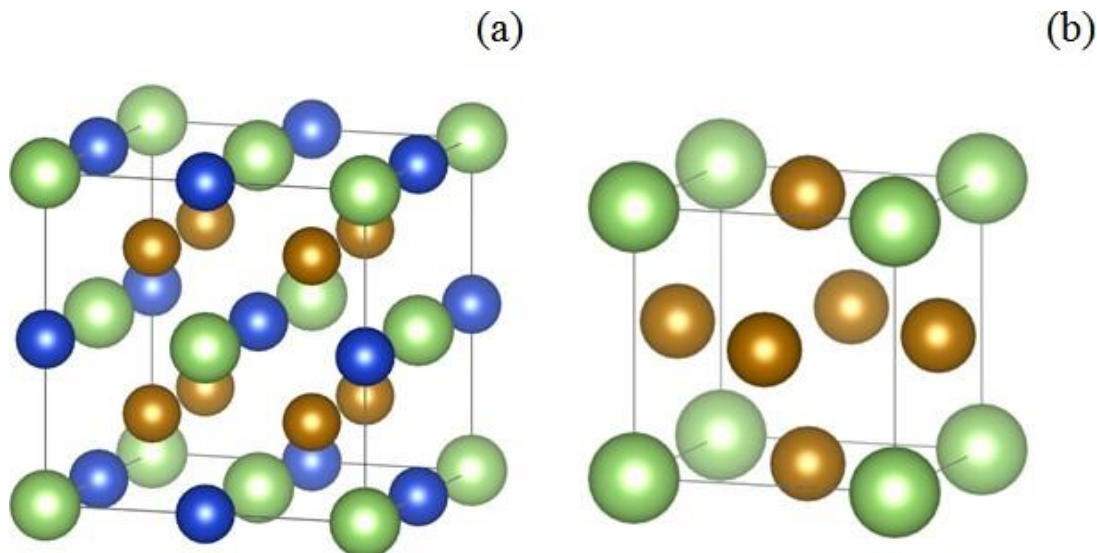
Ga жоғары концентрациясы бар қатайтылған үлгілер үшін B2 типті корреляциялар жоғарылайды. 13 және 20,3 ат арасында D0₃ типті нанокластар байқалады, олардың мөлшері баяу салқындатылған және қатайтылған үлгілер үшін Ga концентрациясының жоғарылауымен жоғарылайды. A2 матрицасындағы D0₃ кристалды құрылымы немесе D0₃ (L6₀ құрылымы) модификацияланған нановключения локализацияланған тетрагональды немесе одан төмен симметрияға ие кубтық симметрияға қатысты қатты бұрмаланған. Ga алыс химиялық тәртіпті бастамас бұрын жақын тәртіптің тез өсуіне байланысты болуы мүмкін. [3] бойынша бұл тұжырым компьютерлік модельдеумен расталады. Теориялық зерттеулер көрсеткендей, B2-03 нанокұрылымдары магнитострикцияны жоғарылату үшін жақын тәртіптің маңызды емес екенін көрсететін қарама-қарсы белгілермен магнитострикцияны тудырады.

Бұл мақалада біз Fe₃Ga полиморфтарының серпінді қасиеттері мен магниттік анизотропия (MAE) энергиясын теориялық салыстыруды жүргіземіз. D0₃ және L2₁ торларының түрлері эксперименталды түрде макроскопиялық фазалар ретінде байқалады. Серпінді қасиеттері мен MAE материалдардың магнитострикциялық қасиеттерін анықтайтын негізгі параметрлер болып табылады [4].

Зерттеу әдістері

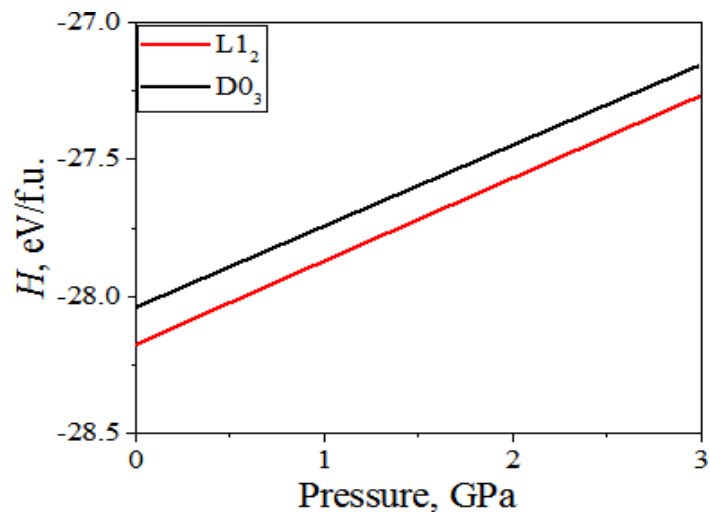
Fe-Ga қорытпалар жүйесінің құрылымдық және магниттік қасиеттерінің бірінші принципін есептеу VASP (ab-initio Вена модельдеу пакеті) [4] көмегімен жүргізілді. Алмасу корреляциясының потенциалы Пердю-Берк-Эрнцерхоф (PBE) түрінде жалпыланған градиенттік жуықтауды (GGA) қолдану арқылы қарастырылды. К нүктелерінің торы G нүктесінде центрі бар тордың негізінде D0₃ құрылымы үшін 6 × 6 × 6 нүкте және L1 2 торы үшін 8 × 8 × 8 нүкте бөлінді. Fe (3s² 3p⁶ 3d⁷ 4s¹), Ga (3d¹⁰ s² 4p¹) валентті электронды конфигурациясы бар PAW [4] псевдопотенциалдары электронды-иондық өзара әрекеттесуді сипаттау үшін қолданылды. Есептеулер үшін деректерді дайындау және кейіннен өңдеу VASP KIT пакетін қолдану арқылы жүзеге асырылды.

Зерттелетін құрылымдардың модельдік ұяшықтары 1-суретте көрсетілген. $D0_3$ тор ұяшығында (FM 3 m тобы, № 225) 16 Атом бар, ал $L2_1$ торында (Pm 3 m тобы, № 221) 4 Атом бар. $D0_3$ құрылымында жергілікті ортаға байланысты Fe атомдарының екі түрі бар. Атап айтқанда, басқа Fe атомдары және 4 Fe1 атомымен және 4 Ga атомымен қоршалған Fe2 типті атомдар жақын орналасқан Fe1 типті атомдар.

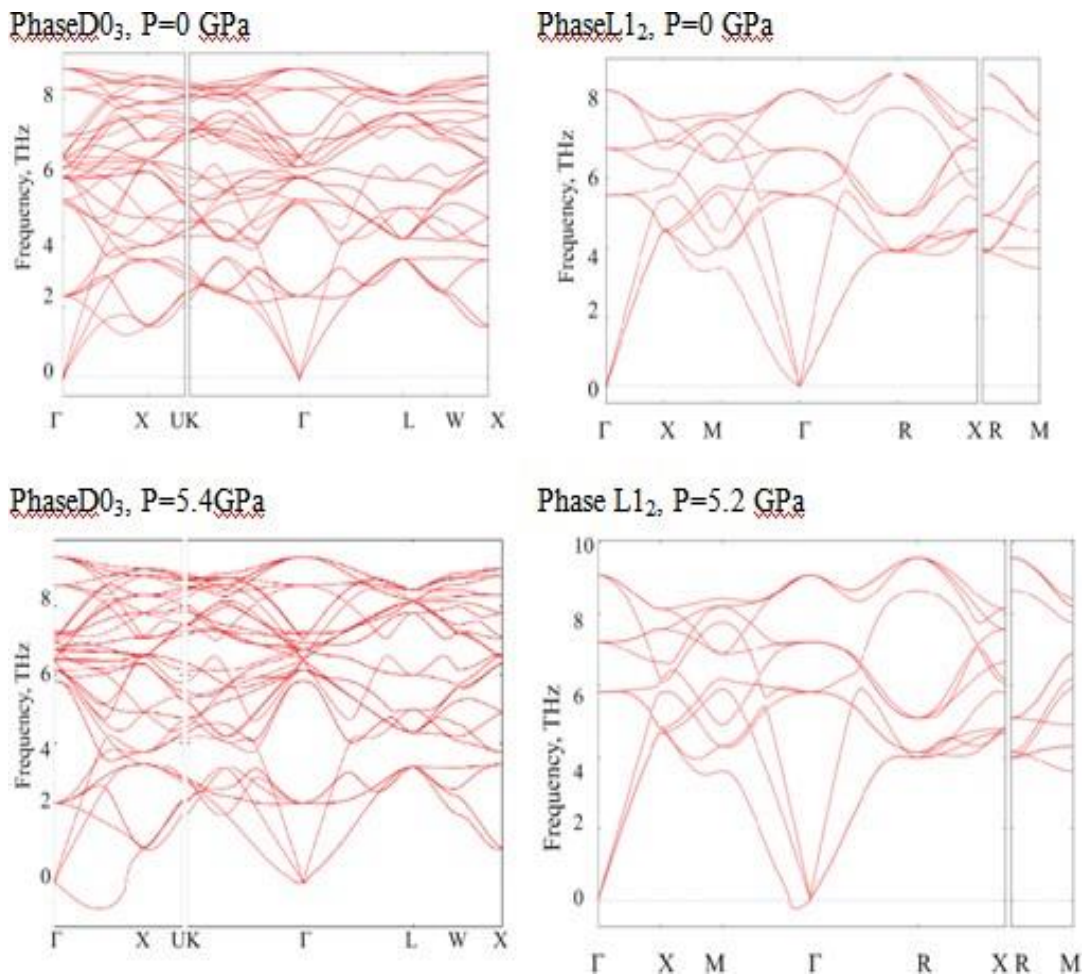


1-сурет (a) $D0_3$ және (b) $L2_1$ құрылымдарының модельдік ұяшықтары. Ga атомдары жасыл сфералар түрінде көрсетілген, Fe атомдары сары түсті. $D0_3$ құрылымы үшін Fe1 және Fe2 типті атомдар сәйкесінше көк және сары түстермен көрсетілген

Жолақ құрылымының ең қызықты бағыттары - бос және бос деңгейлер арасындағы қашықтық аз болатын аймақтар. $D0_3$ құрылымында бұл Бриллюэн аймағының x нүктесіне жақын күйлерге сәйкес келеді. d_{xy} (төмен айналу) және d_{z2} (жоғары айналу) күйлері арасындағы матрицалық элементтер E^{SOC} -ге айтарлықтай үлес қосады. $\epsilon_u - \epsilon_o$ айырмашылығы шамамен 0,1 эВ құрайды. $L1_2$ құрылымы жағдайында X нүктесіне жақын энергия деңгейлері арасындағы қашықтық да осы қосылыс үшін ең аз болып табылады. Алайда, бір жағынан, $\epsilon_u - \epsilon_o$ мәні $D0_3$ құрылымына қарағанда үлкен, сонымен қатар 2-тендеуде нөлдік емес матрицалық элементтер бермейтін d_{z2} және d_{x2-y2} күйлері арқылы тиісті энергия деңгейлері қалыптасады. Осылайша, E^{SOC} $\epsilon_u - \epsilon_o$ айырмашылығы $D0_3$ құрылымы үшін сәйкес мәннен әлдеқайда үлкен болатын күйлермен қалыптасады, бұл $D0_3$ -пен салыстырғанда $L1_2$ -ге қосылу үшін E^{MCA} -ның аз мәнінің әсерін түсіндіреді. d_{z2} , $\diamond -d_{x2-y2}$. Таңбалардың мөлшері деңгейдегі халық санына пропорционалды. Қара сызықтар мен символдар электронды күйлерді жоғары, қызыл - төмен айналдыру арқылы көрсетеді.



2-сурет - D0₃ және L1₂ фазаларының энтальпиясы



3-сурет - Әр түрлі қысымдағы D0₃ және L1₂ фазаларының фонндық спектрлері

Қорытынды

L1₂ құрылымында спин-орбиталық өзара әрекеттесуге қосқан үлесі бір-бірінен алыс орналасқан электрондық деңгейлермен анықталады. Зерттелетін фазалардың термодинамикалық қасиеттерін модельдеу L1₂ құрылымы қарастырылған қысымның барлық диапазонында тұрақты болатындығын көрсетті. Қарастырылған Fe₃Ga кристалды

модификациялары өздерінің фонондық спектрлерінде қиял жиіліктерінің пайда болуына байланысты тұрақтылығын жоғалтады.

Қолданылған әдебиеттер

1. Engdahl G. Handbook of giant magnetostrictive materials: A volume in Electromagnetism.- Academic.: San Diego, 2000, 320 б.
2. Verhoeven J. D., Ostenson J. E., Gibson E. D., McMasters O. D. The effect of composition and magnetic heat treatment on the magnetostriction of $\text{Fe}_2\text{V}_2\text{Si}$ twinned single crystals //Journal of Applied Physics, T.66, №2, 1989, 772–779б.
3. Summers E. M., Lograsso T. A., Wun-Fogle M. Magnetostriction of binary and ternary Fe–Ga alloys //Journal of Materials Science, T. 42 №23, 2007, 9582–9594б.
4. 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 //Journal of Applied Physics, 93,№10, 2003, 8621–8623б.