

УДК 538.955+538.911

doi: 10.26907/2541-7746.2020.4.455-466

## МАГНИТНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ Fe–Al–Ga: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

*А.Ф. Абдуллин<sup>1</sup>, Е.В. Воронина<sup>1</sup>, Л.В. Добышева<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия*

<sup>2</sup>*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,  
г. Ижевск, 426067, Россия*

### Аннотация

Проведены квантово-механические расчеты тройных систем Fe–Al–Ga различных концентраций. Получены равновесные значения постоянной решетки, магнитных моментов и сверхтонких магнитных полей. Показано, что изменение значений магнитных параметров при замещении алюминия галлием главным образом обусловлено изменением параметра решетки. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** расчеты из первых принципов, тройные сплавы Fe–Al–Ga, магнитные моменты, сверхтонкие магнитные поля

### Введение

Несмотря на долгую, уходящую в первую половину прошлого века историю экспериментальных и теоретических исследований, система Fe–Al до сих пор вызывает интерес как с точки зрения развития ее практических применений, так и в качестве модели для изучения проявлений кооперативного магнетизма.

Алюминиды железа обладают уникальной комбинацией нескольких полезных механических свойств, хорошей стойкостью к коррозии, окислению, сульфидированию и износу, низкой стоимостью и относительной простотой получения [1]. Поэтому они хорошо подходят для применения в агрессивных и коррозионных средах при температурах до 900 °С. В то же время сплавы Fe–Al оказались интересны в качестве кандидатов для устройств, использующих магнитомеханические свойства материалов. Сплавы Fe–Ga и Fe–Al с содержанием галлия и алюминия 19 ат.%, демонстрируют достаточно высокие значения магнитострикции при низких полях и хорошую механическую прочность [1, 2]. Сплавы Fe–Al с добавками Ga или В проявляют большую магнитострикцию. В исследованиях [3, 4] поликристаллических сплавов Fe<sub>80</sub>Al<sub>20</sub>, легированных бором, было показано двукратное увеличение общей магнитострикции при добавлении 2 ат.% бора по сравнению с образцом без легирования. Эти сплавы перспективны для использования в качестве материалов для сенсоров и преобразователей, поскольку в дополнение к высоким значениям магнитострикции они недороги и легко поддаются механической обработке.

Упорядоченные по  $B_2$ - или  $D0_3$ -типу сплавы Fe–Al оказались привлекательными модельными объектами для исследования магнитных нано- неоднородностей в магнетиках с однородной кристаллической структурой, в частности для несоответственных спиральных спиновых структур. К магнитным наноструктурам относятся статические образования, такие как волны спиновой плотности и спиральные спиновые волны, идентификация которых остается сложной экспериментальной проблемой. Умение стабилизировать спиральные спиновые волны и управлять их параметрами важно для использования в технике [5].

В нейтронных исследованиях  $B_2$ -упорядоченных сплавов Fe–Al [6] обнаружены корреляции магнитных моментов с длиной когерентности около 5 нм. Их возникновение обусловлено формированием статических волн спиновой плотности, которые при концентрации  $x_{Al} = 35$  ат.‰ имеют наибольшую длину когерентности. В работах [7, 8] изложены результаты экспериментальных исследований структурного и магнитного состояний упорядоченных тройных сплавов на основе Fe–Al:  $Fe_{65}Al_{35-x}M_x$  ( $M = Ga, V$ ), которые были синтезированы с целью изучения магнитного состояния в зависимости от изменения параметра решетки. В этих сплавах установлено (зафиксировано) магнитно-неоднородное состояние, а также увеличение среднего магнитного момента  $\langle m_{Fe} \rangle$  и среднего сверхтонкого магнитного поля (СТМП) на ядре  $^{57}Fe$   $\langle B_{hf} \rangle$  при замене Al изоэлектронными атомами V или Ga с существенно различающимися (ковалентными) радиусами. Магнитное состояние было проинтерпретировано с помощью модели, предусматривающей существование как минимум двух магнитных подсистем: ферро- или ферримагнитного типа и волны спиновой плотности. По экспериментальным данным сделан вывод о необходимости теоретического изучения выбранной системы, одним из этапов которого является исследование локальных искажений решетки вокруг атомов примеси и их влияния на магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в упорядоченных сплавах  $Fe_{65}Al_{35-x}M_x$  ( $M_x = Ga, V$ ) на основе расчетов из первых принципов.

Исследованию магнитных свойств железосодержащих сплавов с примесями *sp*-элементов различными методами вычислений из первых принципов посвящено множество работ [9–11]. В частности, в работе [10] в 16-атомной ячейке Fe–Al показано линейное уменьшение магнитного момента на атомах железа в зависимости от концентрации алюминия. В статье [11] для аналогичных систем описана возможность существования коллинеарного магнитного состояния с противоположно направленными магнитными моментами, в котором часть атомов железа может иметь отрицательный магнитный момент. В свою очередь, системы Fe–Ga представляют наибольший интерес с точки зрения магнитоотрицательных свойств [12–16]. Так, в работе [12] расчетными методами воспроизведено аномальное немонотонное тепловое поведение магнитоотрицательности. Однако, несмотря на значительное количество экспериментальных исследований [17–19], тройные сплавы Fe–Al–M до сих пор не были в достаточной степени изучены современными методами. Задачей настоящей работы являлось теоретическое изучение магнитных моментов атомов, сверхтонкого магнитного поля на ядрах  $^{57}Fe$  тройных сплавов на основе Fe–Al в зависимости от концентраций алюминия и галлия, а также сравнение с экспериментальными данными.

## 1. Методика расчета

Для модельных соединений Fe–Al проведены квантово-механические расчеты постоянной решетки, магнитных моментов и сверхтонких магнитных полей (СТМП) на основе теории спин-поляризованного функционала плотности. Обменно-корреляционный потенциал брался в обобщенно-градиентном приближении (GGA [20]). Известно, что GGA дает более близкие к экспериментальным значения параметра решетки и магнитного момента для железосодержащих соединений. Методом линеаризованных присоединенных плоских волн FP LAPW (пакет программ WIEN2k [21]) проведены расчеты периодических модельных систем Fe–Al–Ga (суперячейка с 16 атомами). На рис. 1 показана ячейка  $Fe_{12}Al_3Ga$  как один из примеров подобной системы.

При использовании данного метода волновые функции, зарядовая плотность и потенциал разлагались по сферическим гармоникам в неперекрывающихся атом-

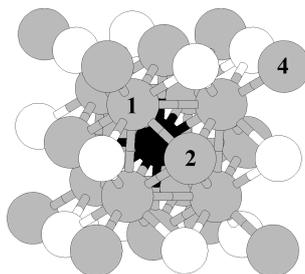


Рис. 1. Суперячейка  $\text{Fe}_{12}\text{Al}_3\text{Ga}$ . Черный шар соответствует атому галлия, серый – атому железа и белый – атому алюминия. Цифрами условно обозначены позиции в ячейке по мере удаления от атома галлия

ных сферах радиуса  $R_{MT}$  и по плоским волнам в остальной области элементарной ячейки.  $R_{MT}$  выбран равным 2 а.е. для всех атомов. Разложение волновых функций для валентных электронов внутри атомных сфер ограничено  $l_{\max} = 10$ , они рассчитывались в потенциале, разложенном по сферическим гармоникам до  $l = 4$ . Волновые функции в междоузлии раскладывались по плоским волнам с вектором обрезания  $K_{\max}$ , определяемым соотношением  $R_{MT} \cdot K_{\max} = 7$ . Зарядовая плотность разложена в ряд Фурье до  $G_{\max} = 12$ . В неприводимой части зоны Бриллюэна для 16-атомной ячейки выбиралась сетка из 35  $k$ -точек. Такой выбор параметров является типичным для подобных систем и обеспечивает необходимую точность вычислений.

Для анализа магнитного состояния тройных сплавов на основе Fe–Al были проведены сравнительные расчеты нескольких периодических систем с последующей заменой одного или нескольких атомов Al на атомы Ga. Параметр решетки выбирался из условия минимума энергии, приходящейся на одну ячейку. При этом предполагалось, что ячейка кубическая. При необходимости также проводилась релаксация межатомных расстояний внутри ячейки до равенства нулю действующих на атомы сил.

## 2. Результаты и обсуждение

Здесь и далее локальным магнитным моментом будем называть магнитный момент в muffin-tin сфере. Средний магнитный момент представляет собой полный магнитный момент ячейки, деленный на число атомов железа в этой ячейке. Для случая замены одного атома алюминия атомом галлия все атомы железа условно пронумеруем по отдаленности от Ga. Таким образом, атом железа под номером (1) имеет по крайней мере один атом замещения – Ga в своей первой координационной сфере, в то время как атом железа (4) наиболее отдален от галлия (рис. 1).

На рис. 2 по оси ординат отложена разность значений сверхтонкого магнитного поля  $B_{hf}$  на атомах железа между исходной, «чистой» Fe–Al-структурой  $B_{hf}^{\text{Fe-Al}}$  и структурой с одним примесным атомом Ga в ячейке  $B_{hf}^{\text{Fe-Al-Ga}}$  для различных позиций Fe; по оси абсцисс – содержание алюминия в идеальной Fe–Al-структуре.

По мере увеличения содержания алюминия разброс по оси ординат уменьшается, что означает уменьшение роли примеси в формировании СТМП: изменение в  $^{57}\text{Fe}$  СТМП для каждой сферы при малых концентрациях Al составляет  $0.4 \div 1.1$  Тл, при высоких –  $0.1 \div 0.2$  Тл. Такая особенность объясняется химической близостью изоэлектронных атомов Al и Ga: чем меньшая доля атомов заменяется, тем меньшими оказываются изменения. Однако следует отметить,

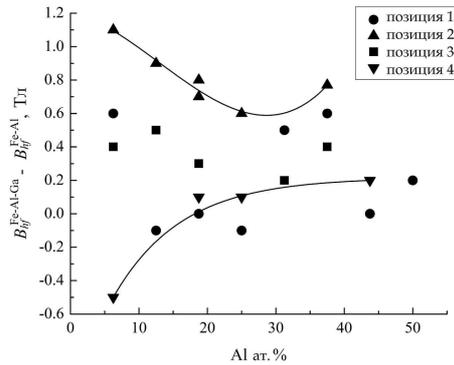


Рис. 2. Разность значений СТМП на атомах железа между исходной Fe–Al-структурой  $B_{hf}^{Fe-Al}$  и структурой с одним примесным атомом Ga в ячейке  $B_{hf}^{Fe-Al-Ga}$  для различных позиций атомов железа в зависимости от концентрации алюминия. Линиями выделены значения для позиций (2) и (4)

Табл. 1  
Вклады в изменение СТМП от валентных и остовных электронов, изменение локального магнитного момента в зависимости от содержания алюминия для позиций железа (2) и (4)

Позиция железа	Содержание Al, ат. %	Вклад в изменение СТМП от электронов, Тл		Изменение локального магнитного момента, $\mu_B$
		валентных	остовных	
2	6.25	+0.6	+0.4	+0.03
	12.5	+0.7	+0.3	+0.02
	18.75	+0.5	+0.2	+0.01
	25	+0.3	+0.3	+0.02
	37.5	+0.2	+0.6	+0.04
4	6.25	-0.2	-0.4	-0.03
	18.75	+0.4	-0.4	-0.03
	25	+0.4	-0.3	-0.03
	43.75	+0.1	-0.2	-0.06

что замена одного атома Al атомом Ga приводит к увеличению среднего СТМП на большинстве атомов железа. Полученный результат согласуется с экспериментально наблюдаемой тенденцией роста СТМП и магнитного момента в тройном  $B_2$ -упорядоченном сплаве  $Fe_{65}Al_{30}Ga_5$  по сравнению с двойным сплавом  $Fe_{65}Al_{35}$ : 0.3 Тл и 0.4  $\mu_B$ /ат.Fe [7, с. 6]

Выделяются позиции железа – (2) и (4) (рис. 2). Видно, что при замене Al на Ga СТМП на атомах железа, которые находятся во второй координационной сфере, растет заметно больше, чем на других атомах Fe. СТМП на наиболее отдаленных, четвертых, позициях растет минимально, а для содержания алюминия 6.25 % даже уменьшается. Для атомов Fe, имеющих примесные атомы в первой координационной сфере, наблюдается немонотонное поведение СТМП по мере изменения концентрации Al. Такую зависимость можно объяснить, если рассмотреть вклады в СТМП от электронов атомного остова и валентных электронов. В табл. 1 приведены два случая для позиций Fe: (2) и (4).

Изменение СТМП на ядрах атомов Fe в первой координационной сфере атома Ga в большей степени определяется взаимным расположением атомов железа в ячейке (конфигурацией, образуемой атомами Fe). Иная ситуация обнаруживается для позиции (2) атома Fe, которой соответствует одно неэквивалентное окружение,

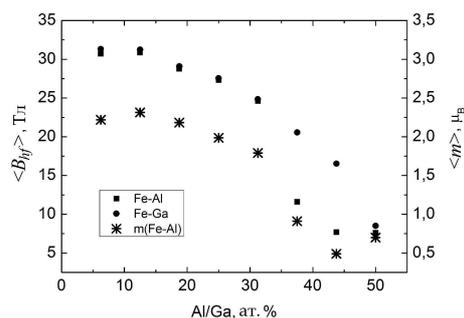


Рис. 3. Зависимость среднего СТМП и магнитного момента от концентрации *sp*-элемента Al/Ga в соединении

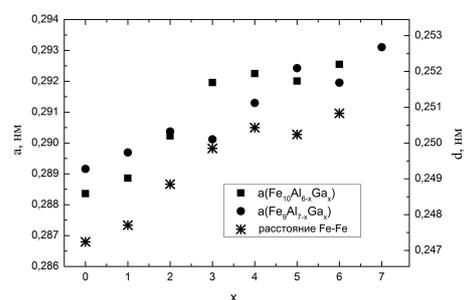


Рис. 4. Зависимость параметра решетки и среднего расстояния между соседними атомами железа от количества атомов галлия в первой координационной сфере

и увеличение СТМП для нее всегда обусловлено ростом вкладов, как от валентных, так и от остовных электронов. Анализируя приведенные в табл. 1 значения, можно заметить, что вклад в изменение СТМП от остовных электронов коррелирует с изменением локального магнитного момента, что является проявлением контактного взаимодействия Ферми [22].

Далее рассмотрим бинарные системы железа с различным содержанием Fe/Ga. На рис. 3 приведены для сравнения значения вычисленных средних СТМП для соединений Fe–Al, Fe–Ga (с различным содержанием *sp*-элементов). Видно, что при концентрации *sp*-элемента до 31.25% разница СТМП соответствующих соединений Fe–Ga и Fe–Al минимальна. В структурах Fe<sub>9</sub>Al<sub>7</sub> (43.75 ат.%) и Fe<sub>10</sub>Al<sub>6</sub> (37.5 ат.%) наблюдается заметное уменьшение СТМП. Вероятно, это связано с изменением типа магнитного порядка в сплавах с концентрацией Al > 30 ат.%. Кроме того, данные, приведенные на рис. 3, с очевидностью подтверждают корреляцию значений среднего магнитного момента  $\langle m \rangle$  и среднего СТМП  $\langle B_{hf} \rangle$  для соединений Fe–Al.

Для изучения особенностей формирования магнитных параметров проведены дополнительные расчеты для двух соединений – Fe<sub>10</sub>Al<sub>6-x</sub>Ga<sub>x</sub> и Fe<sub>9</sub>Al<sub>7-x</sub>Ga<sub>x</sub> с различными концентрациями Ga. На рис. 4 приведена рассчитанная зависимость параметра решетки и среднего расстояния между ближайшими атомами железа в системе Fe<sub>10</sub>Al<sub>6-x</sub>Ga<sub>x</sub> от концентрации Ga.

Увеличение расстояний между атомами железа приводит к росту локального магнитного момента, что в свою очередь вызывает рост вклада в сверхтонкое магнитное поле от остовных электронов за счет спиновой поляризации внутренних *s*-уровней *d*-электронами. И действительно, вследствие смещений ближайших

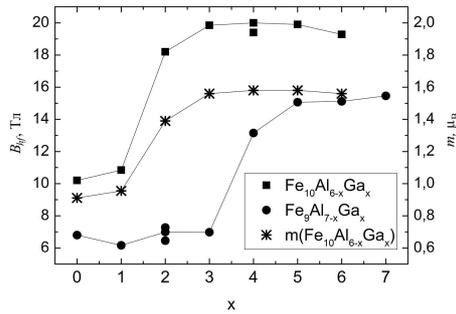


Рис. 5. Зависимость локального СТМП  $B_{hf}$  и локального магнитного момента  $m$  на атомах железа в позиции (1) от количества атомов галлия

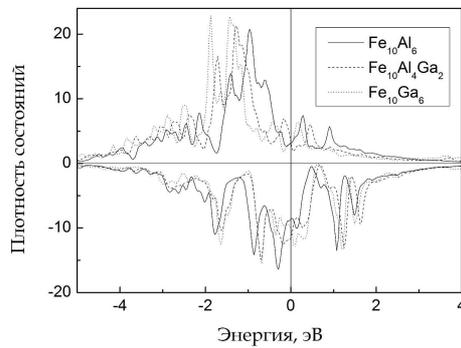


Рис. 6. Плотность электронных состояний для атомов железа в позиции (1) решеток  $\text{Fe}_{10}\text{Al}_6$ ,  $\text{Fe}_{10}\text{Al}_4\text{Ga}_2$  и  $\text{Fe}_{10}\text{Ga}_6$

к галлию атомов можно наблюдать закономерный рост расстояний от атомов железа в позиции (2) до ближайших атомов Fe и уменьшение расстояний для позиции (4). Однако, несмотря на это, вклад от валентных электронов в большинстве случаев также положителен, что и приводит к росту среднего СТМП.

Рассмотрим атомы железа в решетках  $\text{Fe}_{10}\text{Al}_6$  (37.5 ат.% Al) и  $\text{Fe}_9\text{Al}_7$  (43.75 ат.% Al), в окружении которых шесть/семь атомов алюминия и два/один железа соответственно. Рис. 5 демонстрирует зависимость СТМП на этих атомах Fe от количества замещающих атомов галлия в ближайшем окружении (которое для этих систем совпадает с общим количеством атомов замещения). При количестве атомов  $\text{Ga}_x > 1$  (37.5 ат.% Al) и  $x > 3$  (43.75 ат.% Al) имеет место скачкообразное увеличение СТМП с последующим выходом на плато при больших  $x$ . Для некоторых значений  $x$  ( $x = 1, 2, 4$ ) были проведены расчеты при различном размещении атомов Ga по узлам решетки. Полученные значения  $B_{hf}$  различаются несущественно и не влияют на общее поведение зависимости. Локальный магнитный момент в данном случае тоже коррелирует с СТМП. Такое поведение обусловлено расширением элементарной ячейки, содержащей большое количество атомов галлия. Это ведет к увеличению локального магнитного момента, что, в свою очередь, приводит к росту среднего СТМП [23].

Для исследования изменений СТМП были построены плотности электронных состояний трех решеток  $\text{Fe}_{10}\text{Al}_6$ ,  $\text{Fe}_{10}\text{Al}_4\text{Ga}_2$  и  $\text{Fe}_{10}\text{Ga}_6$  (рис. 6). Видно, что добавление галлия приводит к противоположно-направленному сдвигу распределений плотности электронов со спином вниз и вверх в сторону увеличения суммарной

намагниченности системы. При этом форма распределений остается практически неизменной. Такое поведение плотности электронных состояний является обычным для подобных систем [12] и является следствием разбухания решетки из-за атомов большего размера. Резкое увеличение локального магнитного момента связано с перемещением одного из пиков в положительной области распределения вниз, ниже уровня Ферми. Дополнительные вычисления с большим значением параметра решетки демонстрируют перемещение еще одного пика в область энергий ниже уровня Ферми, при этом значение локального магнитного момента становится равным  $m = 1.9 \mu_B$ .

### Заключение

В работе показано, что изменение локальных магнитных моментов и, как следствие, локального СТМП на атомах железа в системе Fe–Al при замене одного атома алюминия на галлий зависит от ближайшего окружения. Несмотря на количественные различия в изменении магнитных параметров для атомов Fe в разных координационных сферах атома Ga, обнаруживается общая тенденция роста средних значений  $\langle m \rangle$  и  $\langle B_{hf} \rangle$ . Кроме того, рост СТМП при замене одного атома алюминия атомом галлия зависит от концентрации алюминия в исходной Fe–Al структуре, причем увеличение тем более выражено, чем меньше концентрация Al.

Проведенные вычисления демонстрируют схожее влияние алюминия и галлия на структурные и магнитные характеристики в системе Fe–Al–Ga. Замена алюминия галлием в большинстве рассмотренных структур Fe–Al является причиной увеличения расстояний между атомами железа, ведущего к росту локального магнитного момента. В свою очередь, это влечет за собой увеличение вклада в сверхтонкое магнитное поле от остовных (внутренних) электронов за счет спиновой поляризации внутренних  $s$ -уровней  $d$ -электронами. Таким образом, небольшое увеличение СТМП, наблюдаемое в эксперименте при добавлении малого количества Ga в систему Fe–Al, подтверждается расчетами в диапазоне концентраций алюминия  $6.25 \div 50\%$  в ячейке из 16 атомов и объясняется увеличением постоянной решетки и расстояний между атомами железа.

Расчеты бинарных систем показывают, что в системе Fe–Al по достижении концентрации 37.5 ат.% Al (ячейка Fe<sub>10</sub>Al<sub>6</sub>) наблюдается резкое уменьшение средних СТМП и магнитного момента, в то время как в системе Fe–Ga  $\langle m \rangle$  и  $\langle B_{hf} \rangle$  зависят от концентрации Ga более плавно.

Кроме того, в тройных системах, обнаружено скачкообразное увеличение СТМП и локального магнитного момента (рис. 5) для атомов Fe в некоторых позициях (элементарной ячейки) по мере увеличения концентрации Ga при почти линейном росте параметра решетки (рис. 4). Такие изменения связаны со сдвигом распределения плотности электронных состояний вследствие «разбухания» решетки.

**Благодарности.** Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (3.7352.2017/8.9), и в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № АААА-А17-117022250038-7).

### Литература

1. Konrad J., Zaeferrer S., Schneider A., Raabe D., Frommeyer G. Hot deformation behavior of a Fe<sub>3</sub>Al-binary alloy in the A2 and B2-order regimes // Intermetallics. –

2005. – V. 13, No 12: Discussion Meeting on the Development of Innovative Iron Aluminium Alloys. – P. 1304–1312.
2. *Liu C.T., George E.P., Maziasz P.J., Schneibel J.H.* Recent advances in B2 iron aluminide alloys: deformation, fracture and alloy design // *Mater. Sci. Eng., A.* – 1998. – V. 258, No 1–2. – P. 84–98.
  3. *Bormio-Nunes C., Hubert O.* Piezomagnetic behavior of Fe–Al–B alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2015. – V. 393, No 3. – P. 404–418. – doi: 10.1016/j.jmmm.2015.05.091.
  4. *Restorff J.B., Wun-Fogle M., Clark A.E., Lograsso T.A., Ross A.R., Schlagel D.L.* Magnetostriction of ternary Fe–Ga–X alloys (X = Ni, Mo, Sn, Al) // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 91, No 10. – P. 8225–8227. – doi: 10.1063/1.1452220.
  5. *Manchon A., Ryzhanova N., Vedyayev A., Dieny B.* Spin-dependent diffraction at ferromagnetic/spin spiral interface // *J. Appl. Phys.* – 2008. – V. 103, No 7. – Art. 07A721, P. 1–3. – doi: 10.1063/1.2837479.
  6. *Noakes D.R., Arrott A.S., Belk M.G., Deevi S.C., Huang Q.Z., Lynn J.W., Shull R.D., Wu D.* Incommensurate spin density waves in iron aluminides // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 91, No 21. – Art. 217201, P. 1–4. – doi: 10.1103/PhysRevLett.91.217201.
  7. *Voronina E.V., Arzhnikov A.K., Chumakov A.I., Chistyakova N.I., Ivanova A.G., Pyataeva A.V., Korolev A.V.* Magnetic phase separation and magnetic moment alignment in ordered alloys  $\text{Fe}_{65}\text{Al}_{35-x}\text{M}-x$  (M–x = Ga, B; x = 0; 5 at.%) // *Adv. Condens. Matter Phys.* – 2018. – V. 2018. – Art. 5781873, P. 1–8. – doi: 10.1155/2018/5781873.
  8. *Voronina E.V., Ivanova A.G., Arzhnikov A.K., Chumakov A.I., Chistyakova N.I., Pyataeva A.V., Korolev A.V.* Magnetic state of quasicrystalline Fe–Al alloys doped with Ga and B: Magnetic phase separation and spin order // *Phys. Solid State.* – 2018. – V. 60, No 4. – P. 730–737. – doi: 10.1134/S1063783418040340.
  9. *Kulikov N.I., Postnikov A.V., Borstel G., Braun J.* Onset of magnetism in B2 transition-metal aluminides // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V. 59, No 10. – P. 6824–6833.
  10. *Das G.P., Rao B.K., Jena P., Deevi S.C.* Electronic structure of substoichiometric Fe–Al intermetallics // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66, No 18. – Art. 184203, P. 1–13. – doi: 10.1103/PhysRevB.66.184203.
  11. *Arzhnikov A.K., Dobysheva L.V., Timirgazin M.A.* Formation and ordering of local magnetic moments in Fe–Al alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2008. – V. 320, No 13. – P. 1904–1908. – doi: 10.1016/j.jmmm.2008.02.114.
  12. *Marchant G.A., Patrick C.E., Staunton J.B.* Ab initio calculations of temperature-dependent magnetostriction of Fe and A2  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$  within the disordered local moment picture // *Phys. Rev. B.* – 2019. – V. 99, No 5. – Art. 054415, P. 1–12. – doi: 10.1103/PhysRevB.99.054415.
  13. *Golovin I.S.* Anelasticity of Fe–Ga based alloys // *Mater. Des.* – 2015. – V. 88. – P. 577–587. – doi: 10.1016/j.matdes.2015.08.160.
  14. *Матюнина М.В., Загребин М.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.* Первопринципные расчеты структур и магнитных свойств сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$  // *Челябинский физ.-матем. журн.* – 2016. – Т. 1, № 4. – С. 112–121.
  15. *Петриж М.В., Горбатов О.И., Горностырев Ю..Н.* Роль магнетизма в формировании ближнего порядка в сплаве Fe–Ga // *Письма в ЖЭТФ.* – 2013. – Т. 98, № 14. – С. 912–915.
  16. *Wu R.* Origin of large magnetostriction in FeGa alloys // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 91, No 10. – P. 7358–7360. – doi: 10.1063/1.1450791.

17. Wang H., Zhang Y.N., Wu R.Q., Sun L.Z., Xu D.S., Zhang Z.D. Understanding strong magnetostriction in Fe<sub>100-x</sub>Ga<sub>x</sub> alloys // Sci. Rep. – 2013. – V. 3. – Art. 3521, P. 1–5. – doi: 10.1038/srep03521.
18. Restorff J.B., 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. – V. 111, No 2. – Art. 023905, P. 1–12. – doi: 10.1063/1.3674318.
19. Cullen J.R., Clark A.E., Wun-Fogle M., Restorff J.B., Lograsso T.A. Magnetoelasticity of Fe–Ga and Fe–Al alloys // J. Magn. Magn. Mater. – 2001. – V. 226–230, Pt. 1. – P. 948–949. – doi: 10.1016/S0304-8853(00)00612-0.
20. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77, No 18. – P. 3865–3868. – doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
21. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J., Laskowski R., Tran F., Marks L.D. WIEN2k: An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. – Wien, Austria: Vienna Univ. Technol, 2018. – 287 p.
22. Arzhnikov A.K., Dobyshcheva L.V. Formation of magnetic characteristics and hyperfine fields in metal–metalloid alloys // Comput. Mater. Sci. – 2002. – V. 24, No 1–2. – P. 203–207. – doi: 10.1016/S0927-0256(02)00188-X.
23. Шпинель В.С. Резонанс гамма-лучей в кристаллах. – М.: Наука, 1969. – 408 с.
24. Аржников А.К., Добышева Л.В., Брауерс Ф. Локальные магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в сплавах Fe–M (M=Si,Sn) при малых концентрациях атомов металлоида // Физика твердого тела. – 2000. – Т. 42, № 1. – С. 86–92.

Поступила в редакцию  
04.02.2020

---

**Абдуллин Аяз Фернатович**, ассистент Института физики

Казанский (Приволжский) федеральный университет  
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия  
E-mail: ayazik@bk.ru

**Воронина Елена Валентиновна**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физики

Казанский (Приволжский) федеральный университет  
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия  
E-mail: Elena.Voronina@kpfu.ru

**Добышева Людмила Викторовна**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики неравновесных металлических систем

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН  
ул. Т. Барамзиной, д. 34, г. Ижевск, 426067, Россия  
E-mail: lyuka17@mail.ru

doi: 10.26907/2541-7746.2020.4.455-466

## Magnetic Parameters of Fe–Al–Ga Ternary System: Ab initio Calculations

*A.F. Abdullin<sup>a\*</sup>, E.V. Voronina<sup>a\*\*</sup>, L.V. Dobysheva<sup>b\*\*\*</sup>*

<sup>a</sup>*Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia*

<sup>b</sup>*Udmurt Federal Research Center, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Izhevsk, 426067 Russia*

E-mail: \**ayazik@bk.ru*, \*\**Elena.Voronina@kpfu.ru*, \*\*\**lyuka17@mail.ru*

Received February 4, 2020

### Abstract

Quantum mechanical calculations of the magnetic parameters in the ternary system Fe–Al–Ga for different contents of Al and Ga were carried out. The equilibrium values of the lattice constant, as well as the average values of magnetic moments and hyperfine magnetic fields were calculated. It was shown that the change in the magnetic parameters during the replacement of aluminum with gallium is mainly due to a change in the lattice parameter. The results obtained were compared with the experimental data.

**Keywords:** ab initio calculations, ternary system Fe–Al–Ga, magnetic moments, hyperfine magnetic fields

**Acknowledgments.** This study was supported by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the state assignment in the area of scientific activities (project no. 3.7352.2017/8.9) and as part of the state assignment no. AAAA-A17-117022250038-7 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

### Figure Captions

Fig. 1. Supercell Fe<sub>12</sub>Al<sub>3</sub>Ga. Black sphere – Ga atom, gray sphere – Fe atom, white sphere – Al atom. Positions in the cell with the distance from the Ga atom are conditionally numbered.

Fig. 2. Difference in the HMF values of the Fe atoms between the initial Fe–Al structure  $B_{hf}^{\text{Fe–Al}}$  and the structure with a single Ga impurity atom in the cell  $B_{hf}^{\text{Fe–Al–Ga}}$  for various positions of the Fe atoms depending on the Al concentration. Values for positions (2) and (4) are shown with lines.

Fig. 3. Dependence of the average HMF and magnetic moment values on the *sp*-element concentration Al/Ga in the compound.

Fig. 4. Dependence of the lattice parameter and the average distance between the neighboring Fe atoms on the number of Ga atoms in the first coordination shell.

Fig. 5. Dependence of the local HMF  $B_{hf}$  and the local magnetic moment  $m$  in the Fe atoms in position (1) on the number of Ga atoms.

Fig. 6. Density of electronic states for the Fe atoms in position (1) of the lattices Fe<sub>10</sub>Al<sub>6</sub>, Fe<sub>10</sub>Al<sub>4</sub>Ga<sub>2</sub>, and Fe<sub>10</sub>Ga<sub>6</sub>.

## References

1. Konrad J., Zaefferer S., Schneider A., Raabe D., Frommeyer G. Hot deformation behavior of a Fe<sub>3</sub>Al-binary alloy in the A2 and B2-order regimes. *Intermetallics*, 2005, vol. 13, no. 12: Discuss. Meet. Dev. Innovative Iron Alum. Alloys, pp. 1304–1312.
2. Liu C.T., George E.P., Maziasz P.J., Schneibel J.H. Recent advances in B2 iron aluminide alloys: Deformation, fracture and alloy design. *Mater. Sci. Eng., A.*, 1998, vol. 258, nos. 1–2, pp. 84–98.
3. Bormio-Nunes C., Hubert O. Piezomagnetic behavior of Fe–Al–B alloys. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2015, vol. 393, no. 3, pp. 404–418. doi: 10.1016/j.jmmm.2015.05.091.
4. Restorff J.B., Wun-Fogle M., Clark A.E., Lograsso T.A., Ross A.R., Schlager D.L. Magnetostriction of ternary Fe–Ga–X alloys (X = Ni, Mo, Sn, Al). *J. Appl. Phys.*, 2002, vol. 91, no. 10, pp. 8225–8227. doi: 10.1063/1.1452220.
5. Manchon A., Ryzhanova N., Vedyayev A., Dieny B. Spin-dependent diffraction at ferromagnetic/spin spiral interface. *J. Appl. Phys.*, 2008, vol. 103, no. 7, art. 07A721, pp. 1–3. doi: 10.1063/1.2837479.
6. Noakes D.R., Arrott A.S., Belk M.G., Deevi S.C., Huang Q.Z., Lynn J.W., Shull R.D., Wu D. Incommensurate spin density waves in iron aluminides. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, vol. 91, no. 21, art. 217201, pp. 1–4. doi: 10.1103/PhysRevLett.91.217201.
7. Voronina E.V., Arzhnikov A.K., Chumakov A.I., Chistyakova N.I., Ivanova A.G., Pyataev A.V., Korolev A.V. Magnetic phase separation and magnetic moment alignment in ordered alloys Fe<sub>65</sub>Al<sub>35-x</sub>M<sub>-x</sub> (M<sub>-x</sub> = Ga, B; x = 0; 5 at.%). *Adv. Condens. Matter Phys.*, 2018, vol. 2018, art. 5781873, pp. 1–8. doi: 10.1155/2018/5781873.
8. Voronina E.V., Ivanova A.G., Arzhnikov A.K., Chumakov A.I., Chistyakova N.I., Pyataev A.V., Korolev A.V. Magnetic state of quasicrystalline Fe–Al alloys doped with Ga and B: Magnetic phase separation and spin order. *Phys. Solid State*, 2018, vol. 60, no. 4, pp. 730–737. doi: 10.1134/S1063783418040340.
9. Kulikov N.I., Postnikov A.V., Borstel G., Braun J. Onset of magnetism in B2 transition-metal aluminides. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, no. 10, pp. 6824–6833.
10. Das G.P., Rao B.K., Jena P., Deevi S.C. Electronic structure of substoichiometric Fe–Al intermetallics. *Phys. Rev. B*, 2002, vol. 66, no. 18, art. 184203, pp. 1–13. doi: 10.1103/PhysRevB.66.184203.
11. Arzhnikov A.K., Dobysheva L.V., Timirgazin M.A. Formation and ordering of local magnetic moments in Fe–Al alloys. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2008, vol. 320, no. 13, pp. 1904–1908. doi: 10.1016/j.jmmm.2008.02.114.
12. Marchant G.A., Patrick C.E., Staunton J.B. Ab initio calculations of temperature-dependent magnetostriction of Fe and A2 Fe<sub>1-x</sub> within the disordered local moment picture *Phys. Rev. B*, 2019, vol. 99, no. 5, art. 054415, pp. 1–12. doi: 10.1103/PhysRevB.99.054415.
13. Golovin I.S. Anelasticity of Fe–Ga based alloys. *Mater. Des.*, 2015, vol. 88, pp. 577–587. doi: 10.1016/j.matdes.2015.08.160.
14. Matyunina M.V., Zagrebin M.A., Sokolovskii V.V., Buchel'nikov V.D. Ab initio calculation of structure and magnetic properties of Fe<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub> alloys. *Chelyab. Fiz.-Mst. Zh.*, 2016, vol. 1, no. 4, pp. 112–121. (In Russian)
15. Petrik M.V., Gorbatov O.I., Gornostyrev Yu.N. Role of magnetism in the formation of a short-range order in an Fe–Ga alloy. *Pis'ma ZhETF*, 2013, vol. 98, no. 14, pp. 912–915. (In Russian)

16. Wu R. Origin of large magnetostriction in FeGa alloys. *J. Appl. Phys.*, 2002, vol. 91, no. 10, pp. 7358–7360. doi: 10.1063/1.1450791
17. Wang H., Zhang Y.N., Wu R.Q., Sun L.Z., Xu D.S., Zhang Z.D. Understanding strong magnetostriction in Fe<sub>100-x</sub>Ga<sub>x</sub> alloys. *Sci. Rep.*, 2013, vol. 3, art. 3521, pp. 1–5. doi: 10.1038/srep03521.
18. Restorff J.B., 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, no. 2, art. 023905, pp. 1–12. doi: 10.1063/1.3674318
19. Cullen J.R., Clark A.E., Wun-Fogle M., Restorff J.B., Lograsso T.A. Magnetoelasticity of Fe–Ga and Fe–Al alloys. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2001, vols. 226–230, pt. 1, pp. 948–949. doi: 10.1016/S0304-8853(00)00612-0.
20. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
21. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J., Laskowski R., Tran F., Marks L.D. *WIEN2k: An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. Wien, Vienna Univ. Technol., 2018. 287 p.
22. Arzhnikov A.K., Dobysheva L.V. Formation of magnetic characteristics and hyperfine fields in metal–metalloid alloys. *Comput. Mater. Sci.*, 2002, vol. 24, nos. 1–2, pp. 203–207. doi: 10.1016/S0927-0256(02)00188-X.
23. Shpinel' V.S. *Rezonans gamma-luchei v kristallakh* [Resonance of Gamma Rays in Crystals]. Moscow, Nauka, 1969. 408 p. (In Russian)
24. Arzhnikov A.K., Dobysheva L.V., Brauers F. Local magnetic moments and hyperfine magnetic fields in Fe–M (M=Si, Sn) alloys at small metalloid concentrations. *Phys. Solid State*, 2000, vol. 42, no. 1, pp. 89–95. doi: 10.1134/1.1131173.

---

⟨ **Для цитирования:** Абдуллин А.Ф., Воронина Е.В., Добышева Л.В. Магнитные параметры тройной системы Fe–Al–Ga: расчеты из первых принципов // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2020. – Т. 162, кн. 4. – С. 455–466. – doi: 10.26907/2541-7746.2020.4.455-466. ⟩

⟨ **For citation:** Abdullin A.F., Voronina E.V., Dobysheva L.V. Magnetic parameters of Fe–Al–Ga ternary system: Ab initio calculations. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2020, vol. 162, no. 4, pp. 455–466. doi: 10.26907/2541-7746.2020.4.455-466. (In Russian) ⟩