

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВОЙНИКОВЫХ СТРУКТУР НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА НА ОСНОВЕ Ni–Mn–In

Ерагер К.Р., Байгутлин Д.Р., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет,
г. Челябинск, Россия
eragerk@rambler.ru

В последние годы магнитные сплавы с эффектом памяти формы привлекают все большее внимание из-за значительных деформаций, индуцированных магнитным полем, и гигантского магнитокалорического эффекта, используемого в современных технологиях. Наличие больших обратимых магнитодеформаций связано с возникновением модулированных низкосимметричных структур в мартенситной фазе вследствие бездиффузионного мартенситного перехода из высокотемпературной аустенитной фазы с кубической структурой. Помимо модулированных структур, двойниковые образования представляют собой «зеркальное» отражение атомной структуры (матрицы) в определенной плоскости, либо образуются поворотом структуры (матрицы) вокруг кристаллографической оси на некоторый угол, постоянный для данного вещества. Двойникование значительно влияет на механические свойства конечных сплавов: [прочность](#), [пластичность](#), [хрупкость](#), а также на электрические, магнитные и оптические свойства. Несмотря на то, что многие стехиометрические сплавы Гейслера Ni_2MnX , обладающие модулированной мартенситной структурой, имеют серьезные ограничения в их полноценном применении, связанные с рабочим температурным интервалом, поскольку температура Кюри достаточно велика, то управление температурами мартенситного и магнитного перехода можно реализовать посредством введения нестехиометрии.

В данной работе первопринципные вычисления модулированных структур сплава $Ni_2Mn_{1.75}In_{0.25}$ были выполнены с помощью теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [1], в приближении GGA-PBE [2]. Расположение избыточных атомов Mn рассчитывалось в программном пакете АТАТ. Плотность к сетки составляла ~ 15000 точек на атом обратной решетки. Энергия обрезки плоских волн составляла 460 эВ, а параметр сходимости по энергии равнялся 10^{-8} эВ/атом.

По данным проведенных исследований структуры, сгенерированные с помощью программного пакета АТАТ обладают большей по модулю энергией основного состояния, чем структуры с упорядоченным расположением избыточного Mn, что указывает на фазовую стабильность композиций и устойчивость к сегрегации. Распределение избыточных атомов Mn в подрешетке In не влияет на структурные характеристики сплавов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания № 075-01391-22-00.

1. Kresse G., Furthmüller J. // Physical Review B. 1996. V. 54. P. 11169.
2. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Physical Review Letters. 1996. V. 77. P. 3865.