

Электронная структура и неустойчивость соединения Ni_2MnGa

© О.И. Великохатный, И.И. Наумов

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук,
634021 Томск, Россия

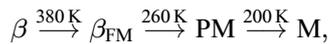
E-mail: ispms@ispms.tomsk.su

(Поступила в Редакцию 9 июля 1998 г.)

На основе численных расчетов электронной структуры, обобщенной восприимчивости и различных сечений поверхности Ферми исследуется природа магнитного и структурных фазовых переходов в сплаве Гейслера Ni_2MnGa .

1. В последние годы значительное внимание привлекает сплав Ni_2MnGa , демонстрирующий поразительное многообразие фазовых превращений при охлаждении и под нагрузкой (магнитное упорядочение, смягчение фононной моды, переходы в несоизмерные длинно-периодические структуры, мартенситные превращения и т.д.) [1–15]. Фазовые превращения и предпереходные состояния обуславливают многие необычные свойства данного сплава, в частности, эффект памяти формы. Существенно, что, в отличие от других сплавов с подобными эффектами в Ni_2MnGa процесс запоминания формы может контролироваться внешним магнитным полем (мартенситные превращения происходят в рамках ферромагнитного состояния) [2,7,12,13,15]. Это и другие обстоятельства дают основания относить Ni_2MnGa к весьма перспективным материалам класса "smart materials" [16].

При охлаждении соединение Ni_2MnGa испытывает следующую цепочку фазовых превращений [1,3,9,11,14]:



где β — высокотемпературная немагнитная фаза с кубической симметрией (структура Гейслера или $L2_1$); β_{FM} — ферромагнитная с той же кристаллической структурой ($L2_1$): PM — предмартенситная, с утроенным периодом вдоль направления [110] и M — мартенситная тетрагональная фаза с несоизмерной модуляцией решетки вдоль того же направления. Переход $\beta_{FM} \rightarrow PM$ фактически заключается в конденсации поперечных акустических фононов $TA_2[\xi\xi 0]$ при $\xi = 1/3$ (переход 1-го рода, очень близкий ко второму) [8,9,11,14]. Подобная конденсация, казалось бы, должна привести к однородной деформации исходной кубической решетки. Однако ни расщепления, ни сдвига исходных брэгговских рефлексов эксперименты [9,11,14] не обнаруживают, так что в среднем PM-фаза остается кубической.

Характерно, что "подготовка" системы к переходу $\beta_{FM} \rightarrow PM$ начинается не в ферромагнитной фазе β_{FM} , а в высокотемпературной немагнитной фазе β . В последней уже при температурах $T \geq 400$ К поперечная фононная ветвь $TA_2[\xi\xi 0]$ демонстрирует аномалию при $\xi \approx 1/3$, которая при понижении температуры трансформируется в провал [9,11]. Ферромагнитное упорядочение (переход $\beta \rightarrow \beta_{FM}$) отнюдь не прерывает

процесс образования провала в TA_2 , и при $T_f = 260$ К, как уже упоминалось, фононы с $\mathbf{q} = \pi/a[1/3, 1/3, 1/3]$ конденсируются, вызывая переход из фазы β_{FM} в утроенную предмартенситную PM. Следует отметить, что наряду с коротковолновыми фононами TA_2 аномальный температурный ход показывает и упругий модуль $C' = (C_{11} - C_{12})/2$, генетически связанный с длинноволновым поведением этой же моды TA_2 в пределе длинных волн. Более того, смягчение с понижением температуры испытывают и модули C_{44} и C_{11} [2].

Мартенситный переход $PM \rightarrow M$ ($T_m \approx 200$ К) заключается как в значительной тетрагональной деформации решетки ($a = 5.920 \text{ \AA}$ и $c = 5.566 \text{ \AA}$, $c/a \approx 0.94$ [1]), так и в периодическом смещении плоскостей (110) в направлении $[1\bar{1}0]$. Первоначально считалось, что период модуляции по системе (110) $[1\bar{1}0]$ является соразмерным и равняется пяти расстояниям между плоскостями (110) (каждая пятая плоскость не испытывает смещений) [2–7,10]. Однако более точные измерения показали, что в действительности период несоизмерен и характеризуется волновым вектором $\pi/a[0.43, 0.43, 0]$ [11]. Далее авторы будут ссылаться на данную мартенситную структуру как на M (5), имея в виду, что период ее решеточной модуляции приблизительно равен пяти межплоскостным расстояниям.

Температура мартенситного превращения T_m и структура мартенситной фазы очень чувствительна к отклонению состава сплава от стехиометрического. Так, в сплаве $Ni_{47.6}Mn_{25.7}Ga_{26.7}$, где "излишний" Ga вводился в основном вместо Ni, температура T_m вообще не была достигнута при охлаждении вплоть до 4.2 К [14]. С другой стороны, сплав $Ni_{52}Mn_{25}Ga_{23}$, где, напротив, излишний Ni вводится вместо Ga, испытывает превращение не в структуру M(5), а в объемноцентрированную моноклинную с параметрами $a = 6.14$, $b = 5.78$, $c = 5.51 \text{ \AA}$ и $\gamma = 90.5^\circ$ [10]. Как и фазы PM и M(5), она характеризуется поперечной волной статических смещений атомов с волновым вектором нормальным плоскостям (110). Поскольку ее длина волны равна семи расстояниям между этими плоскостями, данную структуру далее будем обозначать как M(7).

Мартенситные превращения в рассматриваемом сплаве могут быть вызваны не только изменением температуры, но и приложением нагрузки выше T_m . Так, сжатие по $[100]$ индуцирует переход $PM \rightarrow M(5)$, причем в

мартенситной структуре M(5) ось c оказывается параллельной направлению сжатия, а вектор модуляции — перпендикулярным ему [3,6,10]. Сжатие по [110] вызывает цепочку переходов: PM \rightarrow M(5) \rightarrow M(7) \rightarrow T, где T — тетрагональная структура с $a = b = 5.22 \text{ \AA}$ и $c = 6.44 \text{ \AA}$ [4–7,10]. В отличие от M(5) она обладает тетрагональным отношением c/a большим 1 ($c/a = 1.234$) и не является модулированной. Растяжение по [100] ведет к той же цепочке превращений PM \rightarrow M(5) \rightarrow M(7) \rightarrow T, причем в структуре M(5) ось c оказывается перпендикулярной направлению растяжения (в отличие от сжатия по [001]), а вектор модуляции имеет проекцию на это направление [4,10]. В структуре M(7) наибольший параметр a ориентирован вдоль оси растяжения, а направление решеточной модуляции, как и в случае M(5), имеет проекцию на эту ось. В "нестехиометрических" сплавах последовательность stress-induced фазовых переходов может быть иной [10].

Поскольку понижение температуры и внешние нагрузки ведут ко все более сложным структурам, логично прежде всего разобраться в источниках неустойчивостей наиболее симметричных, высокотемпературных фаз β и β_{FM} . Нам не известны какие-либо подобные попытки, основанные на расчетах электронной структуры из первых принципов. Между тем а priori очевидно, что, например переходы в длиннопериодические мартенситные структуры M(5) и M(7) не могут быть объяснены, исходя из простой модели близкодействующих сил, а должны связываться с дальнедействием, существенным образом зависящим от локальной геометрии поверхности Ферми. Именно такая ситуация имеет место в случае немагнитных β -сплавов с эффектом памяти формы TiNi, CuZn, Ni–Al и т.п., к которых возникновение длиннопериодических решеток однозначно связывается с нестинговыми (совпадающими по своей форме) участками поверхности Ферми [17–21]. Логично ожидать, что подобная ситуация имеет место и в случае сплава Ni₂MnGa.

В этой связи цель настоящей работы — выяснение движущих сил ферромагнитного упорядочения (перехода $\beta \rightarrow \beta_{FM}$) и детальный анализ геометрии поверхности Ферми в β - и β_{FM} -фазах, поиск ее нестинговых участков, способных инициировать переходы в трехслойную (PM), пятислойную (M(5)) и семислойную (M(7)) структуры. Для достижения поставленной цели были проведены самосогласованные расчеты электронно-энергетического спектра $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$, кривой плотности электронных состояний $n(\varepsilon_F)$, обобщенной электронной восприимчивости

$$\chi(\mathbf{q}) = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) [1 - f(\varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))]}{\varepsilon_{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})} \quad (1)$$

и различных сечений поверхности Ферми в β - и β_{FM} -фазах. Использовался "полнопотенциальный" спин-поляризованный метод ЛМТО [22] в рамках локального приближения спиновой плотности. Форма обменно-корреляционного потенциала бралась по Барту–Хедину [23]. В базисном наборе учитывались 4s-, 4p- и

4d-орбитали Ga; сильно локализованные 3d-орбитали данного элемента были отнесены к состояниям кора. Параметр решетки брался равным 5.825 \AA [1], интегрирование по занятым состояниям велось тетраэдронным методом [24], причем при самосогласованном расчете спектра $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ использовались 72 опорные точки в неприводимой части зоны Бриллюэна, а при расчете $\chi(\mathbf{q})$ — 490 точек. При вычислении $\chi(\mathbf{q})$ учитывались лишь энергетические зоны, пересекающие уровень Ферми и определяющие поведение этой величины (зоны 15 и 16 в немагнитной фазе β ; 13, 14 для спина "вверх" (+); 17, 18, 19 для спина "вниз" (-) — в фазе β_{FM}). Следует отметить, что в случае ферромагнитной фазы β_{FM} восприимчивость вычислялась $\chi = \chi^{++} + \chi^{-}$, определяемую меж- и внутрizonными электронными переходами без изменения спина. Именно ее особенности могут служить указанием на возможность образования волн зарядовой плотности и длиннопериодических структур, появления аномалий в дисперсионных кривых фононных частот [25,26] (в рамках ферромагнитной матрицы). Что касается восприимчивости χ^{+-} , обусловленной переходами с изменением спина, то она не представляет интереса, поскольку связана с возбуждением спиновых волн (магнонов) с относительно большими длинами волн [25,26].

2. На рис. 1 приведены электронно-энергетический спектр $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ и плотность состояний $n(\varepsilon)$ парамагнитной β -фазы Ni₂MnGa. Обращает на себя внимание разделение d -зоны сплава на две подзоны, низкоэнергетическая из которых (на $\sim 0.6 \text{ Ry}$ ниже ε_F) генетически связана с Ni, а высокоэнергетическая (в районе ε_F) — с Mn. Как показывает анализ, отвечающие нижней подзоне волновые функции весьма размыты, т.е. носят связующий характер. Напротив, для верхней подзоны характерны сильно локализованные волновые функции антисвязующего типа. Отвечающий им резкий пик в $n(\varepsilon)$ точно выходит на уровень ε_F , и $n(\varepsilon_F)$ принимает очень высокое значение $175 \text{ state/Ry} \cdot \text{cell}$ ($44 \text{ state/Ry} \cdot \text{atom}$).

Валентная зона распространяется на $\sim 0.45 \text{ Ry}$ (6.0 eV) ниже уровня Ферми. Это значение хорошо коррелирует с измеренными ширинами валентной зоны в других сплавах Гейслера на основе марганца: Co₂MnSn (5 eV), Cu₂MnAl (6 eV) и Pd₂MnSn (7 eV) [27].

Изменение зонной структуры Ni₂MnGa при ферромагнитном упорядочении заключается в следующем (ср. рис. 1 и 2). Во-первых, исчезает четкая граница, разделяющая d -зону на две подзоны — это свидетельствует об усилении гибридизации между 3d-волновыми функциями Ni и Mn. Во-вторых, резко понижается (\sim в пять раз!) плотность состояний на уровне Ферми $n(\varepsilon_F)$. Данный эффект обусловлен существенной раздвижкой d -состояний Mn с противоположными спинами в окрестности уровня Ферми.

Последнее обстоятельство приводит также к возникновению сильного магнитного момента на атомах Mn $\sim 3.49 \mu_B$. Магнитный же момент на атомах Ni и Ga оказывается небольшим: $0.33 \mu_B$ и $-0.05 \mu_B$ соответственно. В результате момент, приходящийся на

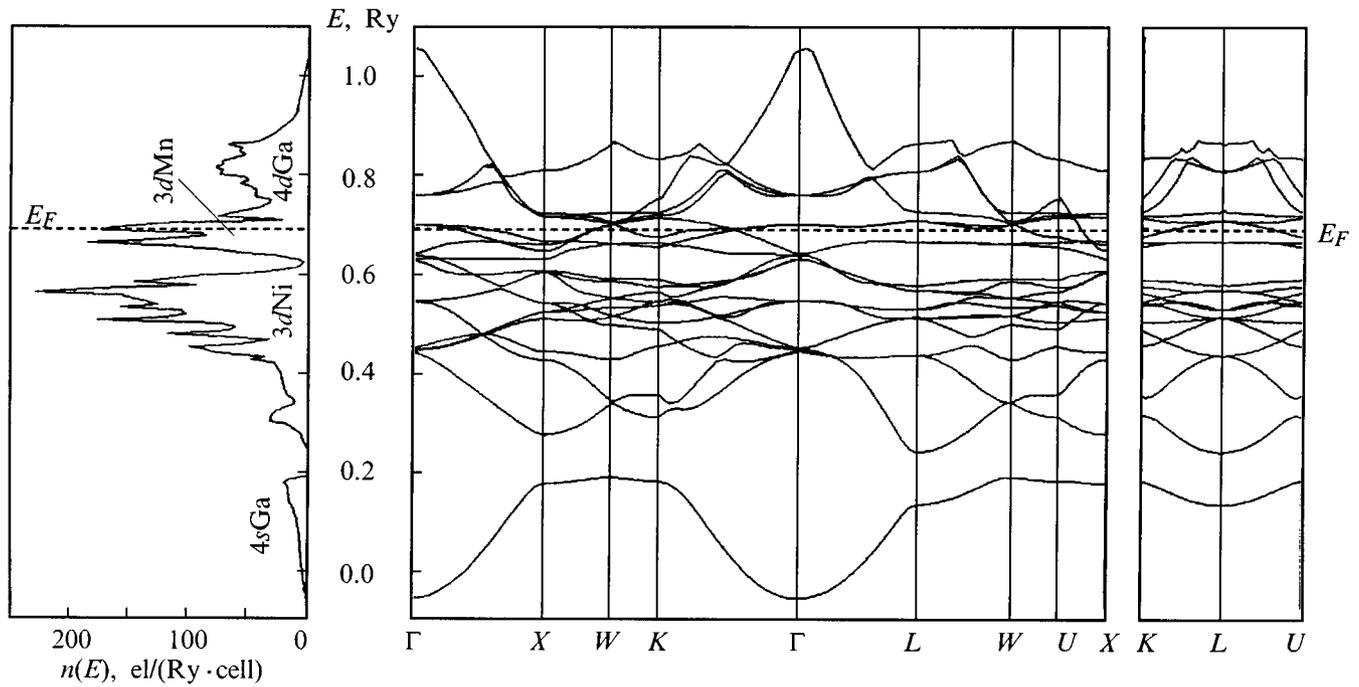


Рис. 1. Электронно-энергетический спектр $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ и плотность состояний $n(\varepsilon)$ парамагнитной β -фазы Ni_2MnGa . Указаны электронные состояния, вносящие преобладающий вклад в $n(\varepsilon)$.

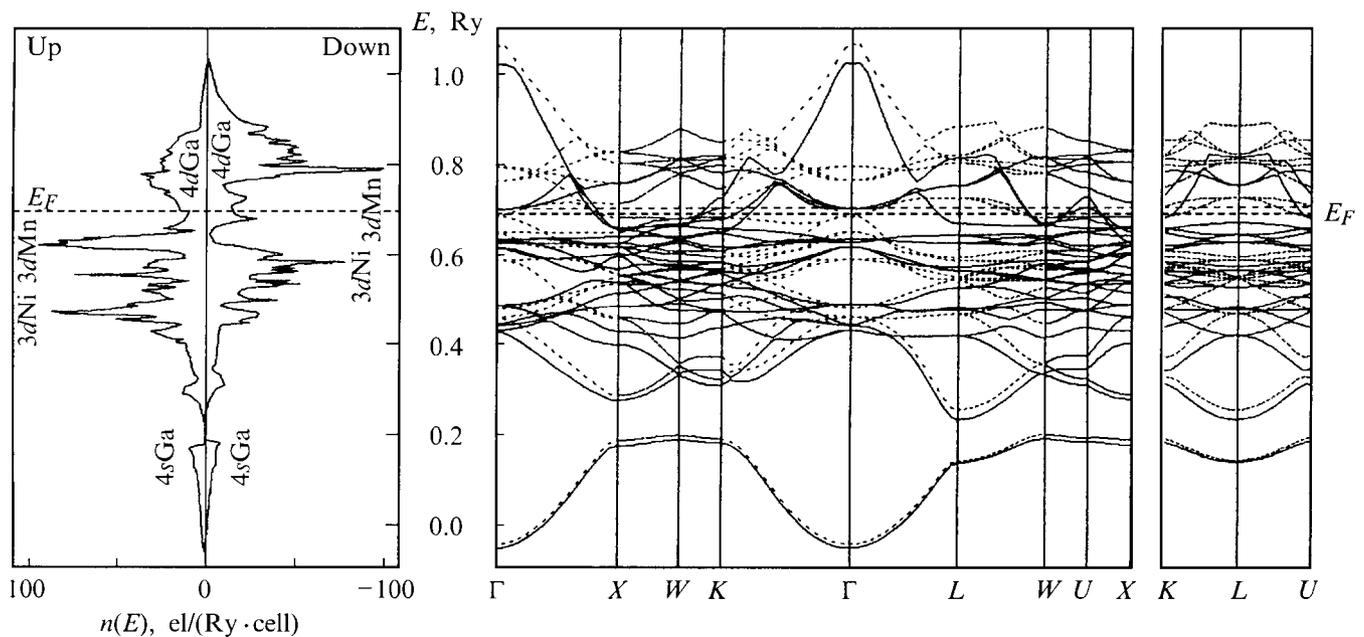


Рис. 2. Электронно-энергетический спектр $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ и плотность состояний $n(\varepsilon)$ ферромагнитной β -фазы Ni_2MnGa . Указаны электронные состояния, вносящие преобладающий вклад в $n(\varepsilon)$ для обеих ориентаций спинов.

всю ячейку, равен $4.10 \mu_B$, что прекрасно согласуется с экспериментальным значением $4.17 \mu_B$ [1]. Сделанное в [1] заключение о том, что магнитный момент на атомах Ni не превышает, по-видимому, величину $0.3 \mu_B$ также

согласуется с нашими расчетами (у нас момент на Ni, как упоминалось, равен $0.33 \mu_B$).

Изменение электронной структуры Ni_2MnGa при возникновении ферромагнитного порядка такое же, как в чистых Fe, Co и Ni [28]. Можно, следовательно, утвер-

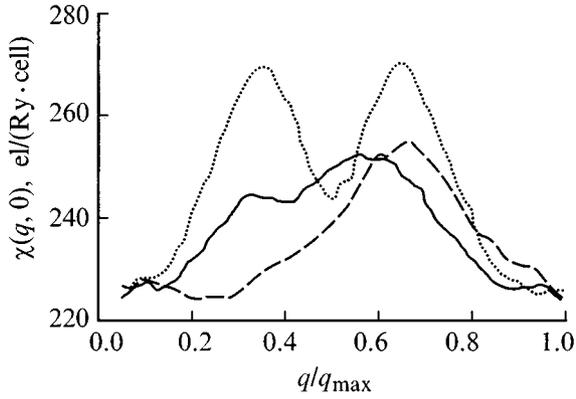


Рис. 3. Статическая обобщенная восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ парамагнитной β -фазы, вычисленная вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна $B2$ -структуры. Сплошная кривая — вдоль направления $\langle 110 \rangle$, штриховая — вдоль $\langle 100 \rangle$, пунктирная — $\langle 111 \rangle$.

ждать, что ферромагнетизм Ni_2MnGa имеет стонеровскую природу, т. е. обусловлен обменным взаимодействием между зонными электронами [25,26]. Действительно, в немагнитном Ni_2MnGa , как отмечалось, уровень Ферми попадает в резкий и высокий пик плотности электронных состояний, и стонеровский параметр $In(\epsilon_F)$ (I — константа обменного взаимодействия) должен принимать высокое значение. Полагаем, что этот параметр достаточно велик, чтобы выполнялся критерий Stonera для ферромагнетизма $In(\epsilon_F) \geq 1$ [25].

В соответствии со схемой зонного ферромагнетизма в рассматриваемом сплаве магнитное взаимодействие ведет к расщеплению d -зон по спину такому, что в зонах со спином "вниз" уровень Ферми попадает в область относительно малых $n(\epsilon)$, разделяя связующие и разрых-

ляющие состояния. В то же самое время d -орбитали со спином "вверх" оказываются почти полностью заполненными. При этом хотя кинетическая энергия электронов и возрастает, выигрыш в обменной энергии полностью компенсирует этот эффект и ферромагнитное состояние оказывается более выгодным по сравнению с парамагнитным.

Согласно нашим расчетам полная энергия ферромагнитного состояния ниже парамагнитного на 0.025 Ry/at . Используя оценку $k_B T_C \approx (E_{FM} - E_{AFM})$, получаем для температуры Кюри $T_C = 394 \text{ K}$, которая примерно в десять раз превышает истинную температуру перехода ($T_C \sim 380 \text{ K}$). Сильное завышение T_C в рамках теории Stonera является вполне типичным [26]: оно не является следствием грубости теоретического расчета, а просто указывает на неприменимость данной теории к описанию высокотемпературных магнитных свойств. Действительно, в теории Stonera выше температуры Кюри T_C исчезают всякие магнитные моменты. В действительности же выше T_C обращается в нуль лишь средняя намагниченность системы, но вполне возможно существование локализованных спиновых моментов и элементарных возбуждений в виде спиновых волн [25,26]. Учет последних и может кардинально изменить рассмотренную выше оценку.

3. Статическая обобщенная восприимчивость парамагнитной фазы β , вычисленная вдоль направлений высокой симметрии $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, приведена на рис. 3 для зоны Бриллюэна $B2$ -структуры, которая вдвое превышает таковую для $L2_1$ -структуры; это сделано для удобства сравнения с экспериментом: измерения фоновых частот ω^2 сплава Ni_2MnGa проведены для волновых векторов ограниченной первой зоной Бриллюэна именно $B2$ -структуры [9,11]. Из рис. 3 видно, что вдоль всех указанных направлений $\chi(\mathbf{q})$ показывает максимумы при

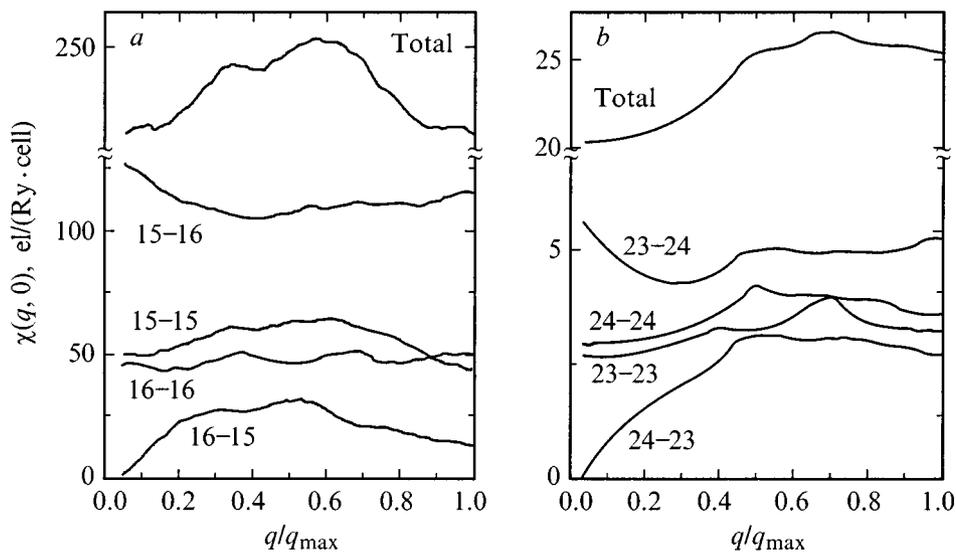


Рис. 4. Обобщенная восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ и основные парциальные вклады, вычисленные вдоль направления $\langle 110 \rangle$ зоны Бриллюэна $B2$ -структуры для парамагнитной β -фазы Ni_2MnGa (a) и высокотемпературной β -фазы $AuCuZn_2$ (b).

волновых векторах $\sim 2/3q_{\max}$, где q_{\max} — граничная точка зоны Бриллюэна. Симметричная относительно середины двугорбая кривая $\langle 111 \rangle$ возникает как результат упомянутого выше искусственного удвоения зоны Бриллюэна. Всем векторам $2/3q_{\max}$, как показал анализ, можно сопоставить соответствующие совмещающиеся участки поверхности Ферми.

Представляется важным, что локальный максимум $\chi(\mathbf{q})$ в направлении $\langle 110 \rangle$ совпадает с положением аномалии в ветви $TA_2[\xi\xi 0]$. Этот максимум обусловлен внутризонными электронными переходами $15 \rightarrow 15$ и $16 \rightarrow 16$ между нестинговыми участками поверхности Ферми. Отсюда можно заключить, что наблюдаемая в парамагнитной β -фазе аномалия в $TA_2[\xi\xi 0]$ может иметь, по крайней мере частично, коновскую природу.

Интересно сравнить рассматриваемый сплав Ni_2MnGa со сплавом $AuCuZn_2$, также имеющим структуру Гейслера и также демонстрирующим аномалию в $TA_2[\xi\xi 0]$, и испытывающим переход в "утроенную" (9R) структуру [28,29]. Как видно из рис. 4, *a, b*, в этих двух системах вдоль направления $\langle 110 \rangle$ сами кривые $\chi(\mathbf{q})$ и их парциальные составляющие обнаруживают весьма схожее поведение. Так, глобальный максимум в $\chi(\mathbf{q})$ в обоих случаях отвечает $\xi = 2/3$ (в случае $AuCuZn_2$ этот максимум вообще единственный). Важно, что в Ni_2MnGa , в отличие от $AuCuZn_2$, $\chi(\mathbf{q})$ демонстрирует еще и локальный максимум при $\xi = 1/3$. Именно при этом волновом, как уже упоминалось, в нем и наблюдается фоновая аномалия [9,11]. В сплаве же $AuCuZn_2$ фоновая аномалия наблюдается не при $\xi = 1/3$, а при $\xi = 2/3$ [29], т.е. при волновом векторе, отвечающем единственному максимуму в $\chi(\mathbf{q})$ — это указывает на ее коновский характер.

То обстоятельство, что в Ni_2MnGa , фоновая аномалия реализуется не в точке глобального, а локального максимума $\chi(\mathbf{q})$ позволяет предположить следующее: в ее формировании "электронный" фактор играет хотя и существенную, но вспомогательную роль (в отличие от $AuCuZn_2$, где он является доминирующим). Согласно теории Гудина и Крумхансла [30], за формирование провалов в кривых $TA_2[\xi\xi 0]$ в β -фазах ответственны ангармонические эффекты. Такие провалы формируются не при всяком волновом векторе, а при $\mathbf{q} = 2\pi/an[1, 1, 1]$, где n -целое (сплав Ni_2MnGa отвечает $n = 6$). Таким образом, а Ni_2MnGa "ангармонический" и "электронный" факторы могут действовать в одном направлении и быть причиной наблюдаемой аномалии при $\xi = 1/3$.

4. В ферромагнитной фазе восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ ($\mathbf{q} \parallel [110]$) демонстрирует два достаточно резких пика при несоизмеримых векторах $\mathbf{q}_1 \approx \pi/a[0.42, 0.42, 0]$ и $\mathbf{q}_2 \approx \pi/a[0.59, 0.59, 0]$, ближайшими соизмеримыми к которым являются векторы $\mathbf{k}_1 = \pi/a[2/5, 2/5, 0]$ и $\mathbf{k}_2 = \pi/a[4/7, 4/7, 0]$ соответственно (рис. 5). Как видно из рисунка, максимум $\chi(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1$ формируется электронными переходами между состояниями со спином "вниз" $13 \rightarrow 14$, $14 \rightarrow 13$ и $14 \rightarrow 14$. Максимум же $\chi(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_2$ формируется только переходами

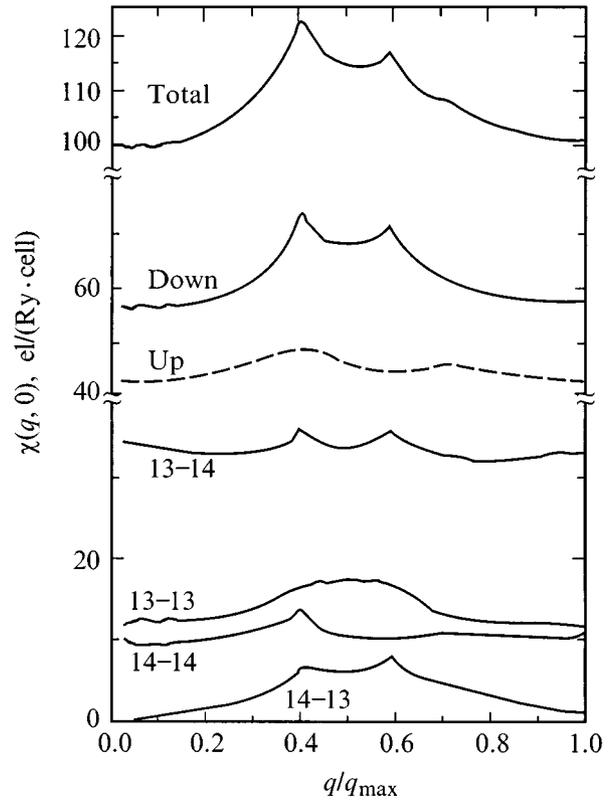


Рис. 5. Обобщенная восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ в ферромагнитной β -фазе Ni_2MnGa вдоль направления $\langle 100 \rangle$ (верхняя кривая). Приведены полные вклады в $\chi(\mathbf{q})$ от переходов со спином "вверх" (штриховая кривая) и со спином "вниз" (сплошная кривая). Цифрами обозначены парциальные вклады от переходов между состояниями со спином "вниз".

$13 \rightarrow 14$ и $14 \rightarrow 13$. Особенности вкладов $13 \rightarrow 14$ и $14 \rightarrow 13$ при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q} = \mathbf{q}_2$ обусловлены совпадающими по своей форме дырочными ($13h$) и электронными ($14e$) участками поверхности Ферми, разделенными указанными векторами рис. 6, *a, c*. Представляется замечательным, что вклад в $\chi(\mathbf{q})$ от внутризонных переходов $14 \rightarrow 14$ максимален также при $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}_1$, в результате чего суммарная восприимчивость при этом волновом векторе имеет более высокое значение, чем при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_2$. Особенность вклада $14 \rightarrow 14$ при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1$ обусловлена уплощенными участками поверхности Ферми в четырнадцатой зоне, что хорошо видно из сечений поверхности Ферми, представленных на рис. 6, *b, c*. Представляется замечательным, что вектор \mathbf{q}_1 практически совпадает с волновым вектором $\pi/a[0.43, 0.43, 0]$, характеризующим модуляцию решетки в структуре $M(5)$. Следовательно, можно утверждать, что переход $\beta_{FM} \rightarrow M(5)$ является переходом типа Пайерлса, хотя, возможно, и не сопровождается полным смягчением фононных частот (в Ni_2MnGa низка вся ветвь $TA_2[\xi\xi 0]$). С этой позиции результат тетрагонального искажения фазы $M(5)$ можно рассматривать как эффект аккомодации решетки (вторичный параметр порядка) к возникновению волн

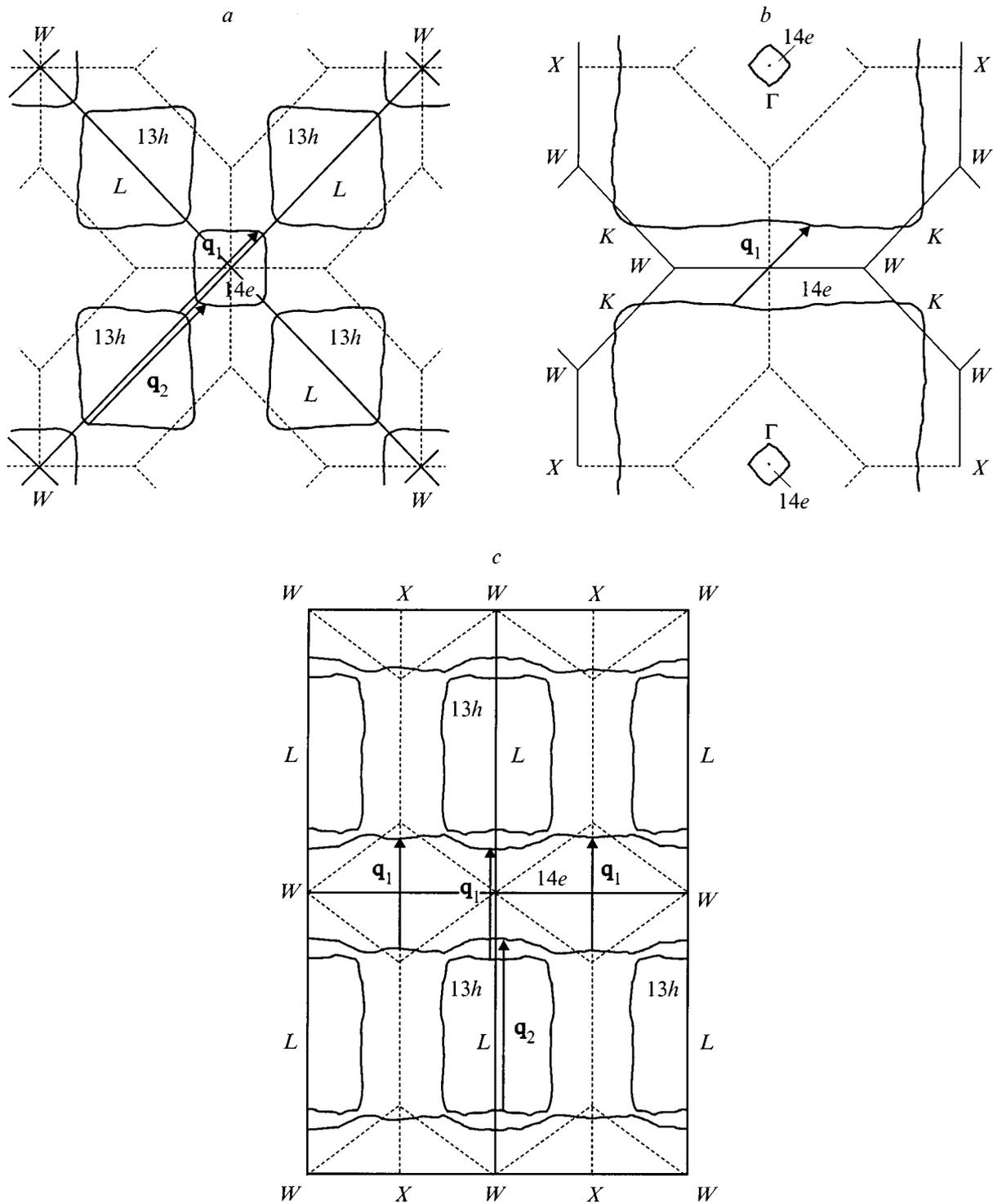


Рис. 6. Фрагменты сечений поверхности Ферми в схеме повторяющихся зон ферромагнитной β -фазы Ni_2MnGa для состояний со спином "вниз". a — сечение в плоскости $k_z = 0.5$; b — $k_z = 0$; c — $k_x + k_y = 1$. q_1, q_2 — "нестинговые" векторы.

атомных смещений по системе $[110] [1\bar{1}1]$ (первичный, истинный параметр порядка).

Далее пик в $\chi(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_2$ указывает на тенденцию к образованию в недрах фазы β_{FM} такой структуры, период

которой по $[110]$ в семь раз превосходит бы исходный. Эту структуру логично сопоставить с экспериментально наблюдаемой $M(7)$. Здесь, однако, полной симметрии со случаем $M(5)$ нет и проблема заключается в следующем.

В работах [4,10] смещения атомов в $M(5)$ и $M(7)$ фазах аппроксимировались суперпозицией соразмерных синусоидальных волн, амплитуды которых выбирались из условия наилучшего согласия экспериментально измеренной интенсивности рентгеновских лучей с рассчитанной. Оказалось, что в случае фазы $M(5)$ смещение каждой j -й плоскости типа (110) структуре хорошо аппроксимируется выражением $A \sin(k_1 j) + B \sin(2k_1 j) + C \sin(3k_1 j)$ с $A = -0.06$, $B = 0.002$ и $C = -0.007$ и $\mathbf{k}_1 = \pi/a[2/5, 2/5, 0]$. Поскольку $|A|$ существенно больше B и $|C|$, то смещения в пятислойной структуре определяются волной с вектором, близким к \mathbf{q}_1 , приводящим к максимуму функции $\chi(\mathbf{q})$. В случае семислойной фазы $M(7)$ ситуация иная. В этой структуре смещение j -й плоскости хорошо описывается суммой $A \sin((k_2/2)j) + B \sin(k_2 j)$ с $A = 0.083$ и $B = -0.027$ и $\mathbf{k}_2 = \pi/a[4/7, 4/7, 0]$. Здесь также $A > |B|$, и ведущий вклад отвечает не вектору \mathbf{k}_2 , а $\mathbf{k}_2/2$, т.е. вектору примерно вдвое меньшему нестинговому \mathbf{q}_2 . Это указывает на то, что в случае структуры $M(7)$ (в отличие от $M(5)$) связь между нестинговыми свойствами поверхности Ферми и решеточной модуляцией носит более сложный характер.

С позиций особенностей $\chi(\mathbf{q})$ структура $M(7)$, как и $M(5)$, также должна быть несоизмерной. Экспериментальные работы, однако, трактуют ее как соразмерную [4,10]. В этой связи уместо повторить, что долгое время соразмерной фазой считалась и $M(5)$, и лишь более прецизионные измерения выявили ее несоизмерный характер. Полагаем, что вопрос о том, является ли решеточные модуляции в мартенситной структуре $M(7)$ соразмерными, требует специального экспериментального исследования.

При ферромагнитном упорядочении исходная особенность в $\chi(\mathbf{q})$ при $\xi = 1/3$, очевидно, исчезает (рис. 5). Таким образом, нестинговых причин размягчения $\text{TA}_2[\xi\xi 0]$ при этом волновом векторе в фазе β_{FM} уже нет. Поскольку в реальности, как уже упоминалось, процесс размягчения не прекращается, то его движущие силы никак не связаны с совпадающими по своей форме и (или) уплотненными участками поверхности Ферми. Выше уже предполагалось, что они имеют, по-видимому, ангармоническую природу [30].

5. Итак, переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние в Ni_2MnGa имеет, скорее всего, стонеровскую природу и обусловлен очень высокой плотностью состояний на уровне Ферми в парамагнитной фазе. В этой же фазе существуют нестинговые участки поверхности Ферми, разделенные вектором $\mathbf{q} = \pi/a[1/3, 1/3, 1/3]$. Наряду с другими факторами эти участки могут служить дополнительной причиной смягчения поперечной акустической ветви колебаний $\text{TA}_2[\xi\xi 0]$ при указанном векторе (приводя к аномалии коновского типа). Для ферромагнитной фазы характерны два резких пика в $\chi(\mathbf{q})$ ($\mathbf{q} \parallel [110]$) при $\mathbf{q}_1 \approx \pi/a[0.42, 0.42, 0]$ и $\mathbf{q}_2 \approx \pi/a[0.56, 0.56, 0]$, отражающие нестинг на поверхности Ферми. Если нестинг первого типа может

вести к образованию экспериментально наблюдаемой пятислойной мартенситной структуры $M(5)$, то второй (с меньшей долей уверенности) — семислойной мартенситной структуры $M(7)$.

Список литературы

- [1] P.J. Webster, K.R. Ziebeck, S.L. Town, M.S. Peak. *Phil. Mag.* **49**, 3, 295 (1984).
- [2] А.Н. Васильев, В.В. Кокорин, Ю.И. Савченко, В.А. Черненко. *ЖЭТФ* **98**, 4, 1437 (1990).
- [3] И.К. Засимчук, В.В. Кокорин, В.В. Мартынов, А.В. Ткаченко, В.А. Черненко. *ФММ* **6**, 110 (1990).
- [4] В.В. Кокорин, В.В. Мартынов. *ФММ* **9**, 106 (1991).
- [5] В.В. Кокорин, В.В. Мартынов, В.А. Черненко. *ФТТ* **33**, 4, 1250 (1991).
- [6] V.V. Martynov, V.V. Kokorin. *J. Phys. Sec.* **B2**, 5, 739 (1992).
- [7] А.Н. Васильев, А. Кайпер, В.В. Кокорин, В.А. Черненко, Т. Такаги, Дж. Тани. *Письма в ЖЭТФ* **58**, 4, 297 (1993).
- [8] G. Fritsh, V.V. Kokorin, A. Kempf. *J. Phys.: Condens. Matter.* **6**, L107 (1994).
- [9] A. Zheludev, S.M. Shapiro, P. Woche, A. Schwartz, M. Wall, L.E. Tanner. *Phys. Rev.* **B51**, 17, 11310 (1995).
- [10] V.V. Martynov. *J. Phys. III (France)* **5**, C8-91 (1995).
- [11] A. Zheludev, S.M. Shapiro, P. Woche, A. Schwartz, M. Wall, L.E. Tanner. *J. Phys. III (France)* **5**, C8-1139 (1995).
- [12] В.В. Кокорин, В.А. Черненко, А.Н. Васильев, С.М. Коноплюк, Е.А. Хапалок. *ФТТ* **37**, 12, 3718 (1995).
- [13] А.Н. Васильев, С.А. Клецов, В.В. Кокорин, С.В. Левитин, В.В. Снегирев, В.А. Черненко. *ЖЭТФ* **109**, 3, 973 (1996).
- [14] В.В. Кокорин, В.А. Черненко, Д. Понс, Э. Цезари. *ФТТ* **39**, 3, 557 (1997).
- [15] С.М. Коноплюк, Ю.П. Стецкив. *Металлофизика и новейшие технологии.* **19**, 1, 54 (1997).
- [16] R.E. Newnham. *MRS Bulletin* **18**, 4, 24 (1993).
- [17] G.L. Zhao, T.C. Leung, B.N. Harmon, M. Keil, M. Mullner, W. Weber. *Phys. Rev.* **B40**, 11, 7999 (1989).
- [18] И.И. Наумов, О.И. Великохатный, В.З. Баширов. *Письма в ЖЭТФ* **54**, 10, 571 (1991).
- [19] И.И. Наумов, О.И. Великохатный, В.З. Баширов. *ФММ* **12**, 30 (1992).
- [20] G.L. Zhao, B.N. Harmon. *Phys. Rev.* **B42**, 2818 (1992).
- [21] I.I. Naumov, O.I. Velikokhatnyi. *J. Phys.: Condens. Matter.* **9**, 10339 (1997).
- [22] S.Yu. Savrasov, D.Yu. Savrasov. *Phys. Rev.* **B46**, 19, 12181 (1992).
- [23] U. Barth, L. Hedin. *J. Phys.* **C5**, 13, 1629 (1972).
- [24] J. Rath, A.J. Freeman. *Phys. Rev.* **B11**, 2109 (1975).
- [25] Т. Moriya. *УФН* **135**, 1, 117 (1981).
- [26] Р. Уайт. *Квантовая теория магнетизма.* М. (1985). 303 с.
- [27] P. Mohn, P. Blaha, K. Schwartz. *J. Magn. Mat.* **140-144**, 183 (1995).
- [28] D.A. Papaconstantopoulos. *Handbook of the band structure of elemental solids.* N. Y. — London (1986). 410 p.
- [29] M. Mori, Y. Yamada, G. Shirane. *Solid State Commun.* **17**, 127 (1975).
- [30] R.J. Gooding, J.A. Krumhansl. *Phys. Rev.* **B39**, 3, 1535 (1989).