

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 669.1'24: 537.621

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГЦК-ЖЕЛЕЗОНИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

© 2025 г. Н. Б. Мельников^{a,*}, Б. И. Резер^b

^aМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, 119991 Россия

^bИнститут физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: melnikov@cs.msu.ru

Поступила в редакцию 07.09.2024 г.

После доработки 08.11.2024 г.

Принята к публикации 12.11.2024

Для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ исследуется зависимость температуры Кюри, спиновых флуктуаций, среднего и локального магнитных моментов от концентрации x . Показано, как зависимость среднего и локального магнитных моментов от концентрации меняется с температурой. Проблема рассматривается в перенормированной гауссовой аппроксимации динамической теории спиновых флуктуаций. Численные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Ключевые слова: электронная структура, магнитные свойства, кривая Слэтера–Полинга, спиновые флуктуации, ферромагнитные сплавы

DOI: 10.31857/S0015323025010044, **EDN:** BZYHOG

1. ВВЕДЕНИЕ

Анализ взаимосвязи электронной структуры и магнитных свойств железоникелевых сплавов остается важной проблемой в теории и приложениях [1, 2]. Значительная часть теоретических работ посвящена исследованию фазовой диаграммы (см., напр., [3, 4]).

В расчетах магнитных характеристик ГЦК-железоникелевых сплавов при конечных температурах нелокальными спиновыми корреляциями либо пренебрегают, используя приближение ко-герентного потенциала и динамическую теорию среднего поля (ПКП+ДТСП; см., напр., [5, 6]), либо описывают их с помощью различных приближений для эффективных гамильтонианов с классическими спинами (см., напр., [7–11]).

Одновременный учет квантового характера и нелокальности спиновых флуктуаций реализован пока лишь в динамической теории спиновых флуктуаций (ДТСФ) [12]. Использование ДТСФ позволило рассчитать температурную зависимость магнитных характеристик инвариантного сплава $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$ [13, 14] и получить зависимость температуры Кюри разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ от концентрации x [15].

В настоящей работе для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ детально изучается

зависимость различных магнитных характеристик: спиновых флуктуаций, среднего и локального магнитных моментов — от температуры и концентрации x . Мы исследуем, как меняется зависимость среднего и локального магнитных моментов от x с ростом температуры (качественный характер этих кривых в сплавах был исследован в [16]), и анализируем сходство зависимости магнитных моментов и температуры Кюри от x . Проблема рассматривается в перенормированной гауссовой аппроксимации динамической теории спиновых флуктуаций (ДТСФ-ПГА) [12, 14] с использованием спин-поляризованных плотностей электронных состояний, рассчитанных в ККР-ПКП [15]. Результаты ДТСФ-ПГА сравниваются с другими расчетами и экспериментом.

Изложение построено следующим образом. В разделе 2 кратко описана расчетная схема. В разделе 3 дан обзор теории и эксперимента, связанных с кривой Слэтера–Полинга. В разделе 4 приведены результаты при конечных температурах. В разделе 5 сформулированы выводы.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В основе ДТСФ лежит квадратичная аппроксимация свободной энергии $F(V)$ во флуктуирующем обменном поле V , которая позволяет

выполнить самосогласованное усреднение по всем конфигурациям поля. При конечной температуре T (в энергетических единицах) решается система нелинейных уравнений для средних квадратов флуктуаций обменного поля на узле:

$$\langle \Delta V_{\alpha}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{UT}{2N_d \lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha}} \frac{2}{\pi} \arctan \frac{U\Phi_{\mathbf{q}}^{\alpha} \pi^2 T}{6N_d \lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha}}, \quad (1)$$

где N — число узлов кристаллической решетки, $N_d = 5$ — число d -полос на атом и спин,

$$\lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha} = 1 - U\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(0), \quad \Phi_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \left. \frac{d \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0}, \quad \alpha = x, z,$$

для среднего обменного поля:

$$\langle V_z \rangle = -Us_z, \quad s_z = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) / 2 \quad (2)$$

и химического потенциала μ :

$$n_e = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \quad n_{\sigma} = \frac{1}{\pi} \int \operatorname{Im} g_{\sigma}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (3)$$

где n_{σ} — число электронов с проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$ или ± 1 , n_e — полное число электронов (на атом и полосу). В приведенных соотношениях $\chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\epsilon)$ — динамическая восприимчивость, $f(\epsilon) = [\exp((\epsilon - \mu) / T) + 1]^{-1}$ — функция Ферми,

$$g_{\sigma}(\epsilon) = \int \frac{v(\epsilon')}{\epsilon - \sigma \langle V_z \rangle - \Delta \Sigma_{\sigma}(\epsilon) - \epsilon'} d\epsilon'$$

— средняя одноузельная функция Грина, где $v(\epsilon)$ — немагнитная плотность электронных состояний (ПЭС) на атом, полосу и спин, $\Delta \Sigma_{\sigma}(\epsilon)$ — флуктуационный вклад в собственно-энергетическую часть, вычисляемый по формуле:

$$\Delta \Sigma_{\sigma}(\epsilon) = \frac{g_{\sigma}(\epsilon) \langle \Delta V_z^2 \rangle}{1 + 2\sigma \langle V_z \rangle g_{\sigma}(\epsilon)} + 2g_{\bar{\sigma}}(\epsilon) \langle \Delta V_x^2 \rangle, \quad \bar{\sigma} = -\sigma.$$

В ДТСФ-ПГА делается перенормировка квадратичной аппроксимации свободной энергии во флуктуирующем поле $F(V)$ за счет членов высокого порядка по V . В окончательных уравнениях это приводит к перенормировке среднего спина и восприимчивости:

$$\tilde{s}_z = (1 + \eta) s_z, \quad \tilde{\chi}_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\epsilon) = (1 + 3\eta) \chi_{\mathbf{q}}^{\alpha}(\epsilon). \quad (4)$$

Поправочный коэффициент η имеет вид:

$$\eta = -\frac{\pi}{W} (2\chi_L^x(0) \langle \Delta V_x^2 \rangle + \chi_L^z(0) \langle \Delta V_z^2 \rangle), \quad (5)$$

где W — ширина d -полосы, $\chi_L^{\alpha}(0)$ — локальная статическая восприимчивость.

При $T = 0$ средние квадраты флюктуаций $\langle \Delta V_{\alpha}^2 \rangle$ обращаются в нуль и система переходит в систему уравнений теории среднего поля Стонера (2) и (3). Это дает возможность найти эффективную константу U по известному магнитному

моменту $m_z(T = 0)$, после чего при $T \neq 0$ исходная система решается методом продолжения по параметру относительно переменных $\langle \Delta V_x^2 \rangle$, $\langle \Delta V_z^2 \rangle$, μ и $\Delta \Sigma_{\sigma}(\epsilon)$ [17]. Вычисление температурной зависимости магнитных характеристик от параметров выполняется с помощью программы MAGPROP [18].

Квадраты среднего $s_z^2 \equiv \langle \mathbf{s} \rangle^2$ и локально-го $s_L^2 \equiv \langle \mathbf{s}^2 \rangle$ спинов отличаются на величину среднеквадратичной спиновой флюктуации $\Delta s^2 \equiv \langle (\mathbf{s} - \langle \mathbf{s} \rangle)^2 \rangle$:

$$s_L^2 = s_z^2 + \Delta s^2.$$

(Здесь $\langle \dots \rangle$ — квантовостатистическое среднее при температуре T .) Спиновые флюктуации складываются из флюктуаций при $T = 0$ ("нулевых") и температурных флюктуаций:

$$\Delta s^2 = \Delta s_{zp}^2 + \Delta s_{temp}^2.$$

В ДТСФ мы рассматриваем только температурные флюктуации, полагая $\Delta s_{zp}^2 = 0$. Считаем, что "нулевые" флюктуации уже учтены за счет перенормировки константы U . При $T = 0$ температурная флюктуация тоже обращается в нуль: $\Delta s_{temp}^2 = 0$. Тогда средний $m_z(T) = gN_d s_z(T) [\mu_B]$ и локальный $m_L(T) = gN_d s_L(T) [\mu_B]$ магнитные моменты при $T = 0$ совпадают: $m_z(0) = m_L(0)$. При конечной температуре, решая систему уравнений ДТСФ-ПГА (1)–(5), находим локальный магнитный момент по формуле:

$$m_L(T) / m_L(0) = [(\langle V_z(T) \rangle^2 + \langle (\Delta V)^2 \rangle) / \langle V_z(0) \rangle^2]^{1/2}.$$

3. МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ ПРИ $T = 0$

Магнитный момент ферромагнитных металлов и сплавов при $T = 0$ довольно хорошо описывается правилом Слэтера, которое обобщает правило Хунда для атома на случай металлов. По правилу Слэтера магнитный момент (в единицах μ_B) равен числу нескомпенсированных по спину d -электронов на атом (см. [21]). Для ферромагнитных металлов и сплавов получаем:

$$m_z(N_e) = 2N_d - N_e, \quad (6)$$

где среднее число d -электронов на атом в металле $N_e = N_d n_e$ может быть дробным.¹ Обоснование (6) вытекает из теории Стонера. Из (2) и (3) следует

$$m_z = N_d(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = 2N_d n_{\uparrow} - N_e.$$

Если полоса d -состояний со спином вверх целиком заполнена (как в Co и Ni), а значит

¹ Обобщения правила Слэтера были предложены в работе [22] (см. также [12, Глава 13]).

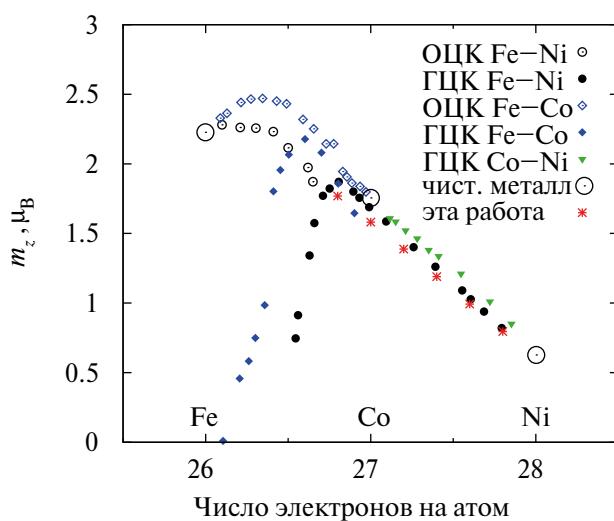


Рис. 1. Кривая Слэтера–Полинга для сплавов Fe, Co и Ni. Экспериментальные значения взяты из [19], кроме ГЦК-сплавов Fe–Co [20] и Fe–Ni [4]. Значения m_z при $T=0$, использованные в расчетах ДТСФ-ПГА, обозначены звездочками.

дальнейшая поляризация не приводит к росту магнитного момента, получаем линейную зависимость, убывающую под углом 45 градусов с ростом N_e . Максимальный магнитный момент находится между Fe и Co и отвечает почти целиком заполненной d -полосе. Зависимость магнитного момента от среднего числа электронов на атом, известная как кривая Слэтера–Полинга [19], дает хорошее приближение для сплавов металлов с близкими атомными номерами, в частности Fe–Co, Co–Ni и Fe–Ni (рис. 1)².

Изложенные выше факты были подтверждены нашими расчетами m_z при $T=0$ в теории Стонера [16]. В рамках теории Стонера можно считать, что сплавление приводит лишь к смещению уровня Ферми [23]. Поэтому расчеты [16] были выполнены с помощью варьирования N_e для ПЭС железа, кобальта и никеля. Однако расчеты, выполненные при *конечных* температурах, показали, что поведение кривой Слэтера–Полинга в теории Стонера и в ДТСФ имеет даже качественно различный характер, из-за того, что теория Стонера полностью игнорирует спиновые флуктуации.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Мы исследуем разупорядоченный ГЦК-сплав $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при концентрациях железа x от 0.1 до

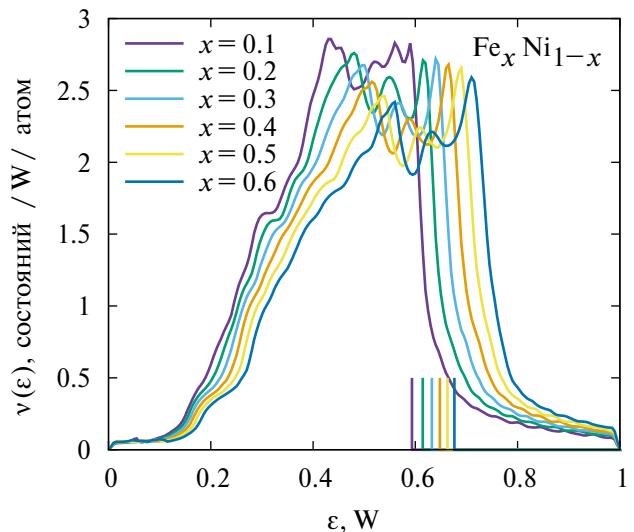


Рис. 2. ПЭС d -электронов разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при $0.1 \leq x \leq 0.6$, сглаженная с помощью свертки с функцией Лоренца полуширины $\Gamma = 0.001\text{W}$. Вертикальной чертой обозначен уровень Ферми ε_F .

0.6³, используя те же исходные немагнитные ПЭС при $T=0$, что и в работе [15]. Спин-поляризованные ПЭС, рассчитанные в ККР-ПКП для ГЦК $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при x от 0.1 до 0.6 [15], находятся в хорошем согласии со спин-поляризованными ПЭС для $x = 0.4$ и 0.6, вычисленными в [24]. Немагнитная ПЭС сплава вычислена по схеме, описанной в работе [13]. Полученные ПЭС слажены с помощью свертки с функцией Лоренца полуширины $\Gamma = 0.001\text{W}$ для удаления нефизических пиков в зонном расчете, который полностью игнорирует затухание одноэлектронных состояний. ПЭС сплавов $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$, нормированные на одно d -состояние (на атом, полосу и спин), изображены на рис. 2. Зависимость магнитного момента при $T=0$ от числа электронов лежит на правой ветви кривой Слэтера–Полинга, отвечающей сплавам с ГЦК-решеткой (рис. 1).

Результаты расчетов магнитных характеристик в ДТСФ-ПГА приведены на рис. 3. Температурная зависимость магнитного момента находится в хорошем согласии с экспериментом [25]. Температурная зависимость остальных характеристик хорошо согласуется с результатами расчетов, приведенными в [12] для чистых Fe, Co и Ni. Так, продольные спиновые флуктуации $\langle \Delta V_z^2 \rangle$ преобладают в ГЦК $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при концентрациях $x = 0.1–0.3$, как в чистом Ni. Продольные $\langle \Delta V_z^2 \rangle$ и поперечные $\langle \Delta V_x^2 \rangle$ спиновые флуктуации примерно совпадают при концентрациях

² Как видно из рис. 1, для ГЦК-сплавов Fe–Co и Fe–Ni при больших концентрациях железа наблюдаются ответвления от кривой Слэтера–Полинга.

³ При концентрациях железа $x > 0.7$ ГЦК-сплав $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ становится антиферромагнитным.

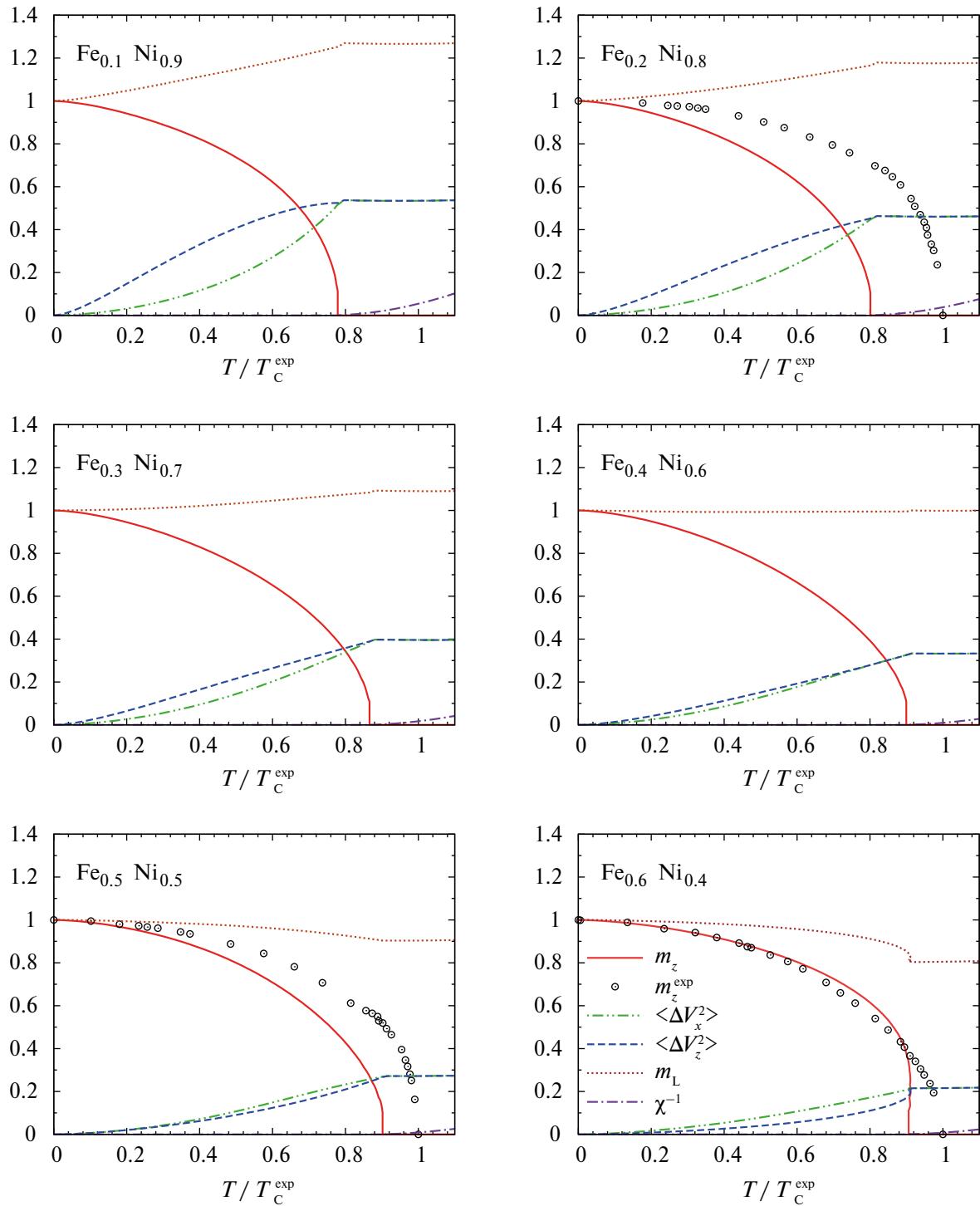


Рис. 3. Магнитный момент m_z / m_z^0 (расчет —, эксперимент $\circ \circ \circ$ [25]), среднеквадратичные флуктуации $\langle \Delta V_x^2 \rangle$ ($- \cdots -$) и $\langle \Delta V_z^2 \rangle$ ($- - -$) в единицах квадрата среднего поля \bar{V}_z^2 при $T = 0$, локальный магнитный момент m_L / m_z^0 ($\cdots \cdots$) и обратная парамагнитная восприимчивость χ^{-1} ($- \cdot -$) в единицах $k_B T_C^{\text{exp}} / \mu_B^2$ разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при концентрациях железа $0.1 \leq x \leq 0.6$, рассчитанные в ДТСФ-ПГА как функции относительной температуры T / T_C^{exp} .

$x = 0.4\text{--}0.5$, как в чистом Co. Наконец, попечевые спиновые флуктуации $\langle \Delta V_x^2 \rangle$ преобладают при концентрациях $x = 0.6$, как в чистом Fe. Аналогично, локальный момент m_L растет с

температурой при $x = 0.1\text{--}0.3$, как в Ni, практически постоянен при $x = 0.4$, как в Co, и убывает с температурой при $x = 0.5\text{--}0.6$, как в Fe. Однородная парамагнитная восприимчивость $\chi^0(0)$

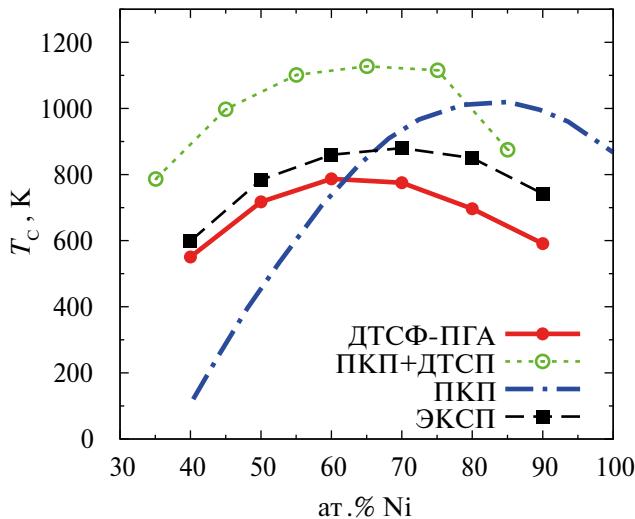


Рис. 4. Зависимость температуры Кюри T_C для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ от концентрации никеля $1 - x$ при $0.1 \leq x \leq 0.6$, рассчитанная в динамической нелокальной теории ДТСФ-ПГА, в одноузельных теориях: статическом приближении ПКП [27] и динамическом приближении ПКП+ДТСП [6] — и в эксперименте [3, 26].

удовлетворяет закону Кюри–Вейса при всех x , как и для чистых металлов.

Зависимость температуры Кюри от концентрации никеля приведена на рис. 4. Экспериментальная кривая имеет максимум вблизи 70 ат.% Ni. Кривая в ДТСФ-ПГА находится в хорошем согласии с экспериментальной кривой [3, 26]. Для сравнения приведены результаты локальных приближений: статического приближения ПКП [27] и динамического приближения ПКП+ДТСП [6]. Как видно, в статике [27] максимум T_C заметно смещен в сторону больших концентраций Ni⁴. Расчет в одноузельном динамическом приближении ПКП+ДТСП [6] приводит к существенным отличиям от результатов статики [27].

Результаты, полученные с помощью различных приближений для эффективных гамильтонианов с классическими спинами [9, 10, 15], дают хорошее количественное согласие с экспериментом при некоторых концентрациях, но не дают правильного хода температурной зависимости T_C от концентрации в целом. В частности, максимум T_C в расчетах [9, 10, 15] заметно смещен в сторону малых концентраций Ni, вопреки эксперименту (рис. 4).

Зависимость температуры Кюри T_C от среднего числа электронов на атом для сплавов Fe, Co и Ni приведена на рис. 5. У этой зависимости есть некоторое сходство с кривой Слэтера–

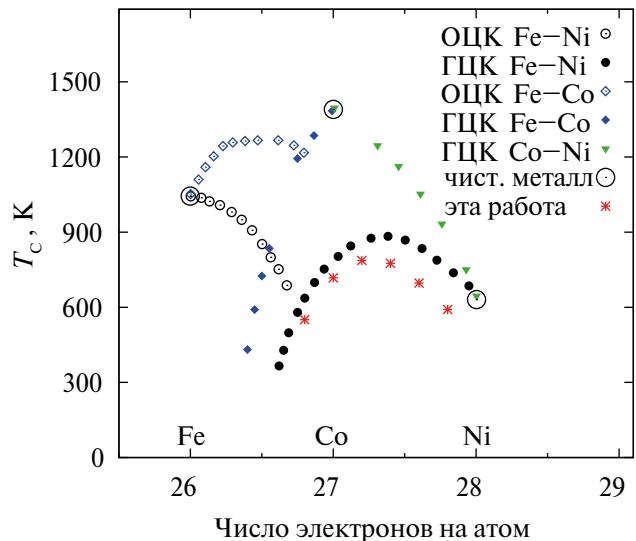


Рис. 5. Зависимость температуры Кюри T_C от среднего числа электронов на атом для сплавов Fe, Co и Ni. Экспериментальные значения взяты из [26], кроме ГЦК-сплавов Fe–Co [29] и Fe–Ni [4]. Значения T_C , рассчитанные в ДТСФ-ПГА, обозначены звездочками.

Полинга (рис. 1). Однако различия в поведении T_C для ГЦК-сплавов Fe–Ni и Co–Ni (как и для ОЦК-сплавов Fe–Ni и Co–Ni) значительно более заметные, чем в поведении m_z при $T = 0$. Кроме того, для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ максимум температуры Кюри T_C достигается при больших концентрациях никеля, чем максимум зависимости m_z при $T = 0$ на кривой Слэтера–Полинга.

Кривые среднего магнитного момента m_z как функции концентрации никеля при конечных температурах, приведены на рис. 6. Как видно, с ростом температуры кривая Слэтера–Полинга смещается к нулю. Зависимость m_z от концентрации Ni при комнатных температурах остается практически прямой линией, параллельной кривой Слэтера–Полинга, в полном согласии с экспериментом [30]. При дальнейшем росте температуры зависимость магнитного момента m_z от концентрации искривляется и становится похожей на зависимость температуры Кюри T_C от концентрации (рис. 4). Максимум m_z постепенно смещается в сторону больших концентраций Ni и при высоких температурах находится между 50 ат.% и 60 ат.% Ni. Эти результаты находятся в качественном согласии с результатами расчетов в ДТСФ, которые были получены с помощью варьирования числа d -электронов для ПЭС железа, кобальта и никеля в нашей работе [16].

Зависимости локального магнитного момента как функции концентрации никеля при различных температурах представлены на рис. 7 (температуры те же, что на рис. 6). Как видно,

⁴ В работе [28] была сделана попытка выйти за пределы одноузельного приближения в статике [27], но заметных отличий для сплавов Fe–Ni она не принесла.

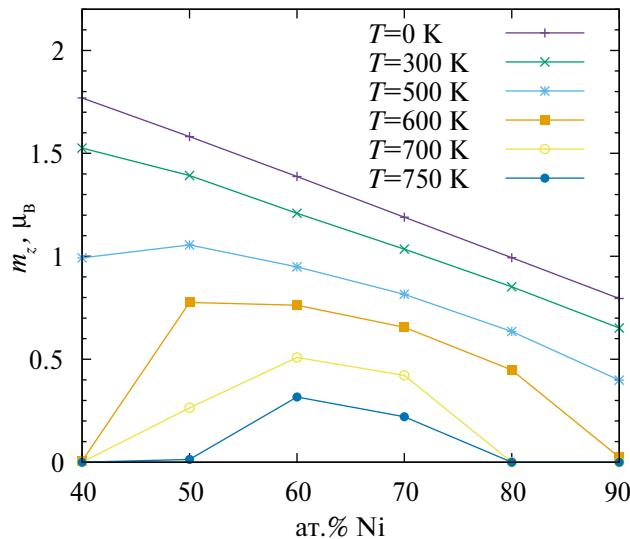


Рис. 6. Зависимость среднего магнитного момента m_z для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ от концентрации никеля $1 - x$ при $0.1 \leq x \leq 0.6$, рассчитанная в ДТСФ-ПГА при различных температурах.

линейная зависимость локального магнитного момента от концентрации слабо меняется с ростом температуры вплоть до комнатных температур. При дальнейшем росте температуры убывающая зависимость остается, но разброс значений локального момента постепенно уменьшается. Экстраполяция наших результатов при T_c находится в разумном согласии с экспериментальными значениями m_L , полученными в нейтронном рассеянии: 1.55–1.7 для Fe и 0.6–0.9 для Ni (подробнее см. [12, 31] и ссылки там). Вид зависимости локального момента от концентрации принципиально отличается от зависимостей температуры Кюри и среднего магнитного момента от концентрации (рис. 4 и 6). В частности, максимум m_L достигается при концентрации никеля $1 - x = 0.4$ при всех температурах, кроме температур вблизи $T = 600$ К, где он немного смещается в сторону больших концентраций никеля: $1 - x = 0.5$.

Качественный ход зависимости локального момента от концентрации при высоких температурах был верно предсказан в наших ДТСФ-расчетах [16]. Однако для реального сплава кривые при высоких температурах оказались более выпуклыми кверху (рис. 7), чем предсказывал наш предварительный анализ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Одновременный учет квантового и нелокального характера спиновых флуктуаций в ДТСФ-ПГА позволил рассчитать зависимости среднего и локального магнитных моментов, спиновых

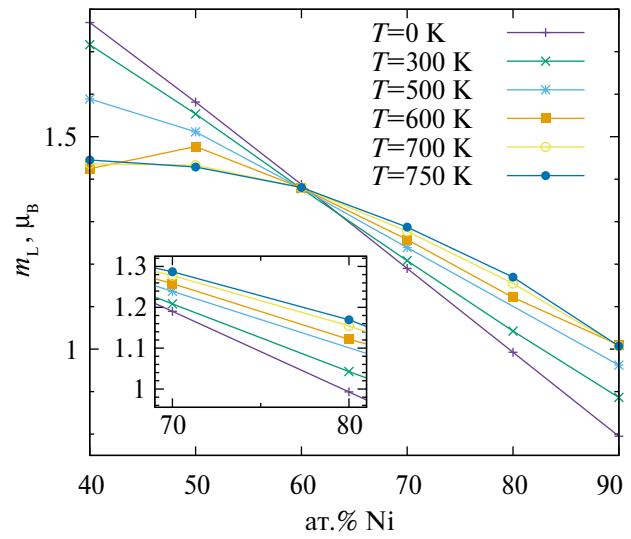


Рис. 7. Зависимость локального магнитного момента m_L для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ от концентрации никеля $1 - x$ при $0.1 \leq x \leq 0.6$, рассчитанная в ДТСФ-ПГА при различных температурах. На врезке более крупно показаны значения при концентрациях никеля $1 - x = 0.7$ и $1 - x = 0.8$.

флуктуаций и парамагнитной восприимчивости от температуры для разупорядоченного ГЦК-сплава $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ при $0.1 \leq x \leq 0.6$.

Температурная зависимость магнитного момента находится в хорошем согласии с экспериментом. Продольные спиновые флуктуации преобладают при концентрациях $x = 0.1$ – 0.3 (как в чистом Ni), продольные и поперечные флуктуации примерно совпадают при концентрациях $x = 0.4$ – 0.5 (как в Co) и, наконец, поперечные флуктуации преобладают при концентрациях $x = 0.6$ (как в Fe).

Зависимость среднего магнитного момента от концентрации остается практически прямой линией, параллельной кривой Слэтера–Полинга вплоть до комнатных температур, в полном согласии с экспериментом. При дальнейшем росте температуры зависимость магнитного момента от концентрации искривляется и становится похожей на зависимость температуры Кюри от концентрации: имеет ярко выраженный максимум между 50 ат.% и 60 ат.%Ni.

Зависимость локального магнитного момента от концентрации тоже остается практически линейной вплоть до комнатных температур. Однако эта прямая не параллельна кривой Слэтера–Полинга, и ее наклон уменьшается с ростом температуры. При дальнейшем росте температуры зависимость локального магнитного момента от концентрации остается убывающей, но становится нелинейной. Максимум локального момента достигается при концентрациях 40 ат.% и 50 ат.%Ni.

Детальное изучение *парамагнитных* свойств ГЦК-железоникелевых сплавов в ДТСФ-ПГА является задачей нашего дальнейшего исследования.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы признательны Г.В. Парадеженко за предоставление исходных немагнитных ПЭС, использованных в ДТСФ-расчетах [15], и рецензентам за полезные замечания. Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема “Квант” № 122021000038-7).

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ebert H., Mankovsky S., Wimmer S.* “Electronic structure: Metals and insulators” in Handbook of Magnetism and Magnetic Materials (Coey M. and Parkin S., eds.) Berlin: Springer, 2021. P. 1–73.
2. *Sharma M.K., Kumar A., Kumari K., Yadav N., Vij A., Koo B.H.* Coexisting magnetic interaction, critical behavior and magnetocaloric effect at high temperature in $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{50}$ soft ferromagnetic alloy // J. Magn. Magn. Mater. 2024. V. 596. P. 171928.
3. *Swartzendruber L.J., Itkin V.P., Alcock C.B.* The Fe-Ni (Iron-Nickel) System // J. Phase Equilibria, 1991. V. 12. P. 288–312.
4. *Xiong W., Zhang H., Vitos L., Selleby M.* Magnetic phase diagram of the Fe–Ni system // Acta Mater. 2011. V. 59. P. 521–530.
5. *Kakehashi Y.* Modern theory of magnetism in metals and alloys. Berlin: Springer, 2012.
6. *Poteryaev A.I., Skorikov N.A., Anisimov V.I., Korotin M.A.* Magnetic properties of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$ alloy from CPA+DMFT perspectives // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. P. 205135.
7. *Crisan V., Entel P., Ebert H., Akai H., Johnson D.D., Staunton J.B.* Magnetochemical origin for Invar anomalies in iron-nickel alloys // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 014416.
8. *Ruban A.V., Khmelevskyi S., Mohn P., Johansson B.* Magnetic state, magnetovolume effects, and atomic order in $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ Invar alloy: A first principles study // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 014420.
9. *Takahashi C., Ogura M., Akai H.* First-principles calculation of the Curie temperature Slater–Pauling curve // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. V. 19. N 36. P. 365233.
10. *Kudrnovský J., Drchal V., Bruno P.* Magnetic properties of fcc Ni-based transition metal alloys // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 224422.
11. *Ruban A.V.* First-principles modeling of the Invar effect in $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ by the spin-wave method // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. P. 174432.
12. *Melnikov N., Reser B.* Dynamic Spin Fluctuation Theory of Metallic Magnetism. Berlin: Springer, 2018.
13. *Reser B.I.* Temperature dependence of magnetic properties of a disordered $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$ // Phys. Met. Metallogr. 2007. V. 103. P. 373–379.
14. *Melnikov N.B., Reser B.I., Grebennikov V.I.* Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. V. 23. P. 276003.
15. *Paradezhenko G.V., Yudin D., Pervishko A.A.* Random iron-nickel alloys: From first principles to dynamic spin fluctuation theory // Phys. Rev. B. 2021. V. 104. P. 245102.
16. *Melnikov N.B., Gulenko A.S., Reser B.I.* Relation between magnetism and electronic structure of 3d-metal alloys in the Stoner theory and in the DSFT // Phys. Met. Metallogr. 2024. V. 125. N 1. P. 49–55.
17. *Paradezhenko G.V., Melnikov N.B., Reser B.I.* Numerical continuation method for nonlinear system of scalar and functional equations // Comp. Math. Math. Phys. 2020. V. 60. P. 404–410.
18. *Reser B.I., Paradezhenko G.V., Melnikov N.B.* Program suite MAGPROP 2.0. / Russian Federal Service for Intellectual Property (ROSPATENT), 2018.
19. *Bozorth R.M.* Ferromagnetism. New York/Piscataway, NJ: Wiley-IEEE, 2nd ed. 1993.
20. *Ayuela A., March N.H.* The magnetic moments and their long-range ordering for Fe atoms in a wide variety of metallic environments // Int. J. Quantum Chem. 2010. V. 110. P. 2725–2733.
21. *Slater J.C.* Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 4: The Self-Consistent Field for Molecules and Solids. New York: McGraw-Hill, 1974.
22. *Reser B.I., Rosenfeld E.V., Shipitsyn E.V.* Spin correlators in the one-electron approximation applied to bcc iron // Phys. Met. Metallogr. 1990. V. 69. N 6. P. 48–57.
23. *White R.M.* Quantum Theory of Magnetism. Berlin: Springer, 3rd ed. 2007.
24. *Minár J., Mankovsky S., Sipr O., Benea D., Ebert H.* Correlation effects in fcc- $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ alloys investigated by means of the KKR-CPA // J. Phys.: Condens. Matter. 2014. V. 26. P. 274206.
25. *Crangle J., Hallam G.C.* The magnetism of face-centered cubic and body-centered cubic iron-nickel alloys // Proc. R. Soc. Lond. A. 1963. V. 272. P. 119–132.
26. *Wijn H.P.J., ed.* Magnetic Properties of Metals. 3d, 4d and 5d Elements, Alloys and Compounds. Landolt-Börnstein New Series. V. III/19a. Berlin: Springer, 1986.
27. *Kakehashi Y.* Theory of the Invar effect in FeNi alloy // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. V. 50. N 7. P. 2236–2245.
28. *Kakehashi Y.* Systematic variations of magnetic properties in 3d transition metal alloys // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1990. V. 101. P. 105–117.
29. *Shiga M., Yamamoto M.* Magnetism and phase stability of fcc Fe-Co alloys precipitated in a Cu matrix // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13. N 29. P. 6359.

30. Glaubitz B., Buschhorn S., Brüssing F., Abrudan R., Zabel H. Development of magnetic moments in $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$ alloys // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. V. 23. N 25. P. 254210.
31. Melnikov N.B., Reser B.I., Paradezhenko G.V. Short-range order in metals above the Curie temperature // AIP Advances. 2018. V. 8. P. 101402.

MAGNETIC PROPERTIES OF FCC IRON-NICKEL ALLOYS AT FINITE TEMPERATURES

N. B. Melnikov^{1,*} and B. I. Reser²

¹*Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

²*Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia*

*e-mail: melnikov@cs.msu.ru

For the disordered fcc alloy $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$, we study the dependence of the Curie temperature, average and local magnetic moments on the concentration x . We show how the dependence of the average and local magnetic moments on the concentration changes with temperature. The problem is considered in the renormalized Gaussian approximation of the dynamic spin-fluctuation theory. The numerical results are in good agreement with the experiment.

Keywords: electronic structure, magnetic properties, Slater–Pauling curve, spin fluctuations, ferromagnetic alloys