

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ FePd, FePt, CoPt И MnAl

*В. И. Анисимов, М. А. Коротин*

Методом ЛМТО функций Грина в приближении атомных сфер выполнен самосогласованный спин-поляризованный расчет электронной структуры эквиатомных сплавов FePd, FePt, CoPt и MnAl. Приводится угловое распределение спиновой плотности атома Fe в FePd. Определены спиновые магнитные моменты компонент сплавов. Для FePd, FePt, CoPt оценены наведенные орбитальные моменты, возникающие на атомах вследствие спин-орбитального взаимодействия. Получено, что в сплаве MnAl с небольшим избытком Mn энергетически предпочтительнее состояние примесного атома Mn в узле Al с магнитным моментом, направленным антипараллельно моментам окружающих атомов. Величина этого момента значительно больше, чем момент атома Mn в эквиатомном сплаве. Рассмотрено влияние углерода как примеси замещения на электронную структуру сплава MnAl.