

FeCo ötvözetek Heisenberg-modelljének szimulációja

TDK Dolgozat

Kovács Péter
Kutatófizikus MSc szakirány
2. évfolyam

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Természettudományi Kar



Témavezető: Dr. Udvardi László (BME Elméleti Fizika Tanszék)

BME 2016

Tartalomjegyzék

| | |
|---|-----------|
| 1. Bevezető | 2 |
| 2. Elméleti összefoglaló | 4 |
| 2.1. Elektronszerkezetszámítás | 4 |
| 2.1.1. Sűrűségfunkcionál elmélet | 4 |
| 2.1.2. KKR | 5 |
| 2.2. Számítások ötvözetekre | 6 |
| 2.2.1. Virtuális kristály közelítés (VCA) | 6 |
| 2.2.2. Átlagos T-mátrix közelítés (ATA) | 6 |
| 2.2.3. Single site koherens potenciál közelítés (CPA) | 7 |
| 2.3. Heisenberg-modell és csatolások | 7 |
| 2.4. Infinitesimalis forgatások módszere | 8 |
| 2.5. Monte Carlo szimuláció | 11 |
| 2.5.1. Metropolis algoritmus | 11 |
| 2.5.2. Heat-Bath algoritmus | 11 |
| 3. Szimulációs kód | 12 |
| 3.1. A program szerkezete | 12 |
| 3.2. A rács elkészítése | 12 |
| 3.3. A szimuláció | 12 |
| 3.4. Validáció | 13 |
| 3.4.1. Egykomponensű ferromágneses | 13 |
| 3.4.2. Egykomponensű antiferromágneses | 14 |
| 3.4.3. Kétkomponensű rendszer | 15 |
| 4. Eredmények | 16 |
| 4.1. Rácsszerkezet | 16 |
| 4.2. KKR eredmények | 17 |
| 4.3. Szimulációs eredmények | 19 |
| 4.3.1. Szimulációs eredmények Fe_{100} -ra | 19 |
| 4.3.2. Szimulációs eredmények $Fe_{93}Co_7$ -re | 20 |
| 4.3.3. A T_c koncentrációfüggése | 21 |
| 5. Összefoglalás | 23 |

1. Bevezető

Az anyagokat mágneses tulajdonságaik alapján általában három nagy csoportra osztjuk: diamágnesek, paramágnesek és ferromágnesek. A diamágneses anyagoknak nincs atomi momentumuk, a paramágnesek esetében csak külső tér hatására alakul ki mágneses rend, míg ferromágneses anyagok esetében az átalakulási hőmérséklet alatt rendezettek az atomi momentumok. A mágnesesen rendezett anyagokat is több csoportra oszthatjuk: lehetnek antiferromágnesek, mint pl. az IrMn_3 rendezett ötvözet, ahol a különböző alrácson más a mágneses momentumok iránya, lehetnek ferrimágnesek különböző alrácson különböző nagyságú momentummal. De a legkülönbözőbb mágneses mintázatok alakulhatnak ki megfelelően megválasztott körülmények között. Az egyik napjainkban sokat vizsgált mágneses szerkezet a skyrmion rács, amely általában inverziós centrumot nem tartalmazó szerkezetekben alakulhat ki a Dzyaloshinsky-Moriya kölcsönhatás[1] következtében. Egy tipikus tömbi anyag, amelyben kialakulhatnak skyrmionok a MnSi [2], de spin polarizált pásztázó alagút mikroszkópiával (STM) sikerült vékonyrétegekben is kimutatni jelenlétüket[3].

Technológiai szempontból a legfontosabbak a ferromágneses anyagok, melyekkel napjainkban számos területen találkozhatunk. Széleskörű felhasználásukat mutatja, hogy adattárolásban, villanymotorok gyártása során és villamos hálózatok kiépítésekor is használják őket. Ilyen különböző felhasználások mellett várható, hogy ezen anyagokkal szemben támasztott követelmények is sokszínűek lesznek. Például a mágneses olvasófejekben szükség van ferromágneses és antiferromágneses anyagokra is, transzformátorokban nagy szaturációs mágnesezettséggel rendelkező anyagok kellenek, míg az adattárolás területén a mágnesezettség anizotrópiája a kritikus követelmény. A mágneses elemek önmagukban nem felelnek meg minden elvárásnak, ezért a tulajdonságaik javítása érdekében mágneses ötvözeteket használunk. Különböző elemek ötvözésével az anyagok tulajdonságai az egyes felhasználásokhoz hangolhatóak. A ferromágnesek két legfontosabb jellemzője a Curie hőmérséklet, amely fölött paramágnesessé válik és a koercitív tér, amely mellett a telítésbe vitt anyag mágnesezettsége eltűnik.

Dolgozatomban ferromágneses ötvözetek Curie hőmérsékletének a komponensek koncentrációjától való függését tanulmányozom Monte Carlo szimulációk segítségével. Az általam vizsgált ötvözet az a $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$ ötvözet vasban gazdag tartománya ($0 \leq x \leq 0.15$). Erre a feladatra kifejlesztettem egy Heisenberg-modellen alapuló szimulációs programot, mellyel ezen anyagok termodinamikai tulajdonságait tudom meghatározni. A program bemeneteként használt Heisenberg-csatolásokat az Elméleti Fizika Tanszék Korringa-Kohn-Rostoker módszerrel[4] alapuló elektronszerkezet számító kódjával határoztam meg. Munkám eredményeként meghatároztam a Curie-hőmérséklet és a szaturációs mágnesezettség koncentrációfüggését, valamint fejlesztettem egy szimulációs kódot, amellyel bármilyen rácsra, akárhány komponens esetén szimulálhatóak ezen ötvözetek termodinamikai tulajdonságai. A későbbiekben ezt a kódot szeretném továbbfejleszteni, hogy anizotrop rend-

szereket is tudjon kezelni, valamint a metadinamika implementálása után anizotrópia energia számítására fogom használni.

A továbbiakban röviden összefoglalom a felhasznált módszereket a második fejezetben, majd bemutatom az általam kidolgozott programot, a negyedik fejezetben ismertetem a szimulációk eredményeit. A dolgozatot az irodalomjegyzék előtt egy rövid összefoglaló zárja.

2. Elméleti összefoglaló

Ebben a fejezetben a dolgozatban használt modelleket és számítási módszereket ismertetem.

2.1. Elektronszerkezetszámítás

Az anyagok mágneses tulajdonságainak vizsgálatához elengedhetetlen az elektronszerkezetük ismerete. A többszörös szóráselmélet (Multiple Scattering Theory, MST) segítségével a szilárd testek sáv szerkezete numerikusan kiszámítható. Az általam használt módszer a Korringa-Kohn-Rostoker módszer[5] a sűrűségfunkcionál elmélet keretei között, mely az eredeti 1947-ben Korringa által bevezetett módszer többszörös szóráson alapuló változata.

2.1.1. Sűrűségfunkcionál elmélet

A sűrűségfunkcionál elméletben az elektronok közös, sokváltozós hullámfüggvénye helyett csak az elektronok sűrűségét használjuk az elektronrendszer alapállapot energiájának kiszámításához. A Hohenberg-Kohn tételek alapján az elektronok sűrűsége és a külső potenciál között egy-egyértelmű megfeleltetés van. Valamint az energiafunkcionált minimalizáló sűrűség valójában a rendszer alapállapotához tartozik. Az energiafunkcionált Born-Oppenheimer közelítésben a következő képpen partícionálhatjuk:

$$E[\rho(r)] = T[\rho] + \frac{1}{2} \int V_H(r)\rho(r)dr + E_{xc}[\rho] + \int V_{ext}\rho(r)dr \quad (2.1)$$

ahol a T a kinetikus energia-, E_{xc} pedig a kicserélődési-korrelációs funkcionál. A $V_H(r)$ az elektronoktól származó Hartree-potenciál, a V_{ext} pedig az atommagok potenciáljának és a külső potenciálnak az összege. A Hartree-potenciál tag kifejeztető az elektronok sűrűségével:

$$V_H(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} d^3r' \quad (2.2)$$

A Kohn - Sham elméletben a sűrűséget egy effektív potenciálban mozgó független részecskék sűrűségeként állítjuk elő:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i \in occ.} |\varphi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (2.3)$$

ahol φ_i kielégíti a 2.1 egyenlet variálásával adódó Kohn-Sham egyenleteket:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{eff} \right) \varphi_n = \epsilon_n \varphi_n \quad (2.4)$$

ahol \hat{p} az impulzus operátor, φ_n az elektron hullámfüggvény, ϵ_n az adott hullámfüggvényhez tartozó sajátenergia és V_{eff} az effektív potenciál. Az effektív potenciál pedig a

következő módon számítható:

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} d^3r' + V_{xc}(r) \quad (2.5)$$

Ezen tagok közül az első ismert, a második a sűrűség függvényében számítható, a harmadik tagot pedig a kicserélődési-korrelációs energia sűrűség szerinti funkcionál deriváltjaként kaphatjuk meg. Az $E_{xc}[\rho]$ funkcionált nem ismerjük pontosan, ezért különböző közelítésekkel kell élnünk. Számításaink során a lokális sűrűség közelítést (LDA) alkalmazunk, mely szerint ez az energia jól közelíthető egy megegyező sűrűségű szabad elektrongáz kicserélődési-korrelációs energiájával, ami pedig már kiszámítható. Tehát,

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}(\rho(r))}{\delta \rho} \quad (2.6)$$

Így a φ_n egyrészecske hullámfüggvények kiszámíthatóak, melyből a sűrűség a következő módon származik:

$$\rho(r) = \sum_i |\varphi_i(r)|^2 \quad (2.7)$$

ahol az összegzést a betöltött elektronokra végezzük. Ezen sűrűséget visszahelyettesítve a potenciálok számolásába, majd a Kohn-Sham egyenletet újra megoldva egy új sűrűséget lehet kiszámítani. Ezen lépések iterálásával az alapállapotú elektronsűrűség megkapható.

2.1.2. KKR

A többszörös szóráson alapuló KKR módszerben [5] a hullámfüggvények helyett a Green-függvény játssza a kulcs szerepet:

$$(H - z)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z) = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (2.8)$$

A Green-függvény ismeretében az elektronrendszerre vonatkozó várható értékek kiszámíthatóak. Vezessük be a $\mathcal{G}^\pm(\epsilon)$ függvényeket a következő módon:

$$\mathcal{G}^\pm(\epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \mathcal{G}(\epsilon \pm i\delta) \quad (2.9)$$

Egy \mathcal{A} -operátorral jellemezhető mennyiség várható értékét, nagykanonikus sokaságban a következő módon számolhatjuk:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon) \text{Tr}(\mathcal{A} \mathcal{G}^+(\epsilon)) d\epsilon \quad (2.10)$$

ahol $f(\epsilon)$ a Fermi-eloszlás. Amennyiben ez az operátor az egységoperátor, akkor a várható értéke az elektronszám.

$$\langle N \rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon) \text{Tr}(\mathcal{G}^+(\epsilon)) d\epsilon \quad (2.11)$$

Ebből látható, hogy az elektronok állapotsűrűsége(DOS):

$$n(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{Tr}(\mathcal{G}^+(\epsilon)))d\epsilon \quad (2.12)$$

A KKR módszerben a potenciál előállításához az u.n *muffin-tin* konstrukciót alkalmazzuk: A teret egymást érintő gömbökre osztjuk, melyek középpontjai a rácspontok. Feltételezzük, hogy a potenciál a gömbökön belül gömbszimmetrikus, a gömbök között pedig állandó. Ebben az esetben a Green-függvény a következő módon adható meg[4]:

$$\mathcal{G}(\epsilon, \vec{r}_n + \vec{R}_n, \vec{r}'_m + \vec{R}_m) = \sum_{LL'} Z_L^n(\epsilon, \vec{r}_n) \tau_{LL'}^{nm} Z_L^m(\epsilon, \vec{r}'_m)^\times - \delta_{nm} \sum_L Z_L^n(\epsilon, \vec{r}_n) J_L^n(\epsilon, \vec{r}'_n)^\times \quad (2.13)$$

ahol Z^n és J^n az n. rácshelyen a Dirac-egyenlet reguláris és irreguláris szórási megoldásai, a τ pedig az egyes rácshelyek közötti szórásokat leíró szórási út operátor (SPO). A szórási út operátort a szabad elektron G_0 propagátorával, amelyet gyakran KKR struktúra állandónak nevezünk, és a i -ik rácspont körüli muffin-tin potenciál szórási tulajdonságait leíró[4] t_i mátrix segítségével állíthatjuk elő:

$$\tau = (\mathbf{t}^{-1} - G_0)^{-1}. \quad (2.14)$$

A τ mátrixnak rács és impulzuszórási indexei vannak, míg a \mathbf{t} a rács indexekben blokk-diagonális.

2.2. Számítások ötvözetekre

Ötvözetek esetén a potenciálok kezelése nem triviális, mivel nagyon sok különböző konfiguráció lehetséges már akár két féle atom esetén is. A számítások megkönnyítése érdekében több különböző közelítő módszert fejlesztettek ki.

2.2.1. Virtuális kristály közelítés (VCA)

A virtuális kristály közelítés abból áll, hogy többkomponensű rendszer esetén minden rácspontra egy "átlagos atomot" helyezünk, melynek a rendszáma és elektronszáma a komponensek koncentrációval súlyozott átlaga. Könnyen belátható, hogy ez a közelítés nem felel meg az elvárásoknak, mivel például egy $Fe_{0.5}Ni_{0.5}$ ötvözetre elvégzett számítás eredménye megegyezne egy tiszta Co-ra elvégzett számítással.

2.2.2. Átlagos T-mátrix közelítés (ATA)

Ebben a közelítésben nem az atomok jellemzőire végezzük el az átlagolást, hanem a szórási tulajdonságaira, úgy, hogy bevezetünk egy új átlagos szórási mátrixot a következő módon:

$$t^{ATA} = \sum_i c_i t^i \quad (2.15)$$

ahol a c_i az i . komponens koncentrációja, míg t^i az adott komponens szórási tulajdonságait leíró mátrix. Ennek a közelítésnek a hátránya, hogy bizonyos esetekben olyan Green-függvényre vezet, amely nem garantál pozitív DOS-t valós energiákra. Ezen probléma kiküszöbölésére vezették be a koherens potenciál közelítést, amit a mi számításaink is használnak.

2.2.3. Single site koherens potenciál közelítés (CPA)

A koherens potenciál közelítés[6] során az ötvözetet egy koherens mediával helyettesítjük, amelyet t_c szórási mátrix jellemez. A koherens szórási út mátrixot ennek segítségével állíthatjuk elő:

$$\tau_c = \left(t_c^{-1} - G_0 \right)^{-1} \quad (2.16)$$

Ha az egyik rácsponton az i -ik komponens potenciálját helyezzük el, akkor a szórási út mátrixot a következő képpen adhatjuk meg[4]:

$$\tau_{imp}^i = \left(t_i^{-1} - t_c^{-1} + \tau_c^{-1} \right) \quad (2.17)$$

A közelítés során feltételezzük, hogy a koherens szórási út mátrix az egyes τ_{imp}^i mátrixok koncentrációval súlyozott átlagaként áll elő:

$$\tau_c = \sum_i c_i \tau_{imp}^i \quad (2.18)$$

Az 2.16-2.18 egyenletek iterálásával előállíthatjuk a t_c koherens szórási és τ_c szórási út mátrixokat. A 2.17 és 2.13 egyenletek segítségével előállíthatjuk a Green-függvényt és a sűrűséget minden komponensre, amely segítségével új effektív potenciált állíthatunk elő.

2.3. Heisenberg-modell és csatolások

A mágneses rendszerek tulajdonságait, véges hőmérsékletű viselkedését gyakran írjuk le egy klasszikus Heisenberg modellel:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j, \quad (2.19)$$

ahol $\vec{\sigma}_i$ az i -ik rácspontban lévő atom mágneses momentumával párhuzamos egységvektor, J_{ij} pedig az i, j rácspontok közötti kicserélődési csatolás. Az adiabatikus közelítésben[7], miszerint ha az elektronrendszert kisebb térfogatokra osztjuk, akkor ezen részek átlagos mágneses momentumának a relaxációs ideje nagyságrendekkel nagyobb, mint az elektronok relaxációs ideje, nem csak a rácspontokra lokalizált spinek esetében működik a Heisenberg modell, hanem alkalmazható itineráns rendszerekben is. Az itineráns rendszerekben a mágneses momentum a delokalizált vegyérték elektronok járuléka. Nem relativisztikus esetben a modellnek invariánsnak kell lennie a rendszer egy tetszőleges globális elforgatásával szemben – ez egyenértékű a spin kvantálás irányának tetszőleges megvá-

lasztásával. A Heisenberg modellben szereplő skalárszorzat nyilvánvalóan teljesíti ezt a feltételt. Relativisztikus esetben a spin-pálya kölcsönhatás következtében sérül ez az invariancia és az egyszerű J_{ij} skalár csatolás helyett egy \mathbf{J}_{ij} csatolási tenzor jelenik meg, valamint felléphetnek a mágneses anizotrópiával kapcsolatos plusz tagok:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{\sigma}_i^t \mathbf{J}_{ij} \vec{\sigma}_j. \quad (2.20)$$

A 3×3 -as csatolási mátrix felbontható 3 komponensre, amik a fizikai hátterét is tükrözik a kölcsönhatásnak.

$$\underline{\underline{J}} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{J}}) \underline{\underline{I}} + \left(\frac{1}{2} (\underline{\underline{J}} + \underline{\underline{J}}^+) - \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{J}}) \underline{\underline{I}} \right) + \frac{1}{2} (\underline{\underline{J}} - \underline{\underline{J}}^+) \quad (2.21)$$

Az első tag a klasszikus Heisenberg-modell konstans csatolását írja le a spinek között. A második tag egy trace nélküli szimmetrikus mátrix, amelyet gyakran pseudo dipólus-dipólus kölcsönhatásnak nevezünk. A harmadik tag pedig egy antiszimmetrikus mátrix, amely hatása felírható a következő módon:

$$\vec{\sigma}_i J^A \vec{\sigma}_j = \vec{D}(\vec{\sigma}_i \times \vec{\sigma}_j) \quad (2.22)$$

Ez a tag a Dzyaloshinskii-Moriya kölcsönhatás[1] leírásáért felelős. Mivel az általam vizsgált rendszerek köbös szimmetriával rendelkeznek, ezért csak az első két tag jelenik meg a számítások során.

2.4. Infinitesimalis forgatások módszere

A Heisenberg modellben fellépő csatolások *ab-initio* meghatározására különböző eljárások találhatóak az irodalomban. Egy lehetséges módszer különböző hullámhosszú spin spirálok energiájának a meghatározása[8], amelyek Fourier transzformáltjából kinyerhetőek a csatolási állandók. Az eljárás előnye, hogy nagy pontosságú módszert alkalmazhatunk az energiák meghatározására, de a relativisztikus hatásokat csak perturbatív módon tudjuk figyelembe venni. Dolgozatomban az u.n. infinitesimalis elforgatások módszerét alkalmaztam. Az eredeti eljárást Liechtenstein, Katsnelson és Gubanov[9] dolgozta ki a többszörös szórás formalizmus keretein belül. Ennek egy relativisztikus kiterjesztését használom[10] teljes kölcsönhatási tenzor meghatározására.

Az infinitesimalis forgatások, vagy más néven forgatónyomaték módszer esetében a szabadenergia megváltozását a sávenergiák megváltozásával közelítjük, összhangban a mágneses erő tétellel[11]:

$$F = \int_{-\infty}^{E_F} \varepsilon n(\varepsilon) d\varepsilon - E_F N(E_F) = - \int_{-\infty}^{E_F} N(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.23)$$

ahol $n(\varepsilon)$ az állapot sűrűség, $N(E) = \int_{-\infty}^E n(\varepsilon) d\varepsilon$ pedig az integrált állapot sűrűség. Az integrált állapot sűrűséget kifejezhetjük egy állandó erejéig a Lloyd formula[12] segítségével

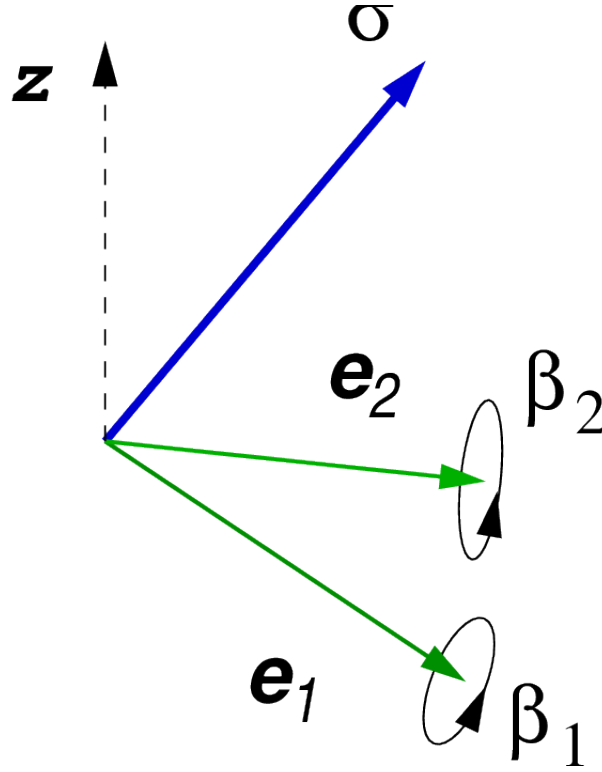
vel:

$$N(\varepsilon) = \ln(\det|\tau|) + N_0 = \text{Tr}(\ln(\tau)) \quad (2.24)$$

Behelyettesítve a 2.23 számú egyenletbe a rendszer szabadenergiájára a következő kifejezést kapjuk:

$$F = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{E_f} \text{Tr}(\ln(\tau(\epsilon))) d\epsilon \quad (2.25)$$

A módszer rövid ismertetéséhez válasszunk két egymásra és a mágnesezettség irányára merőleges egységvektort a 2.1 ábra szerint.



2.1. ábra. Merőleges forgástengelyek

Ekkor t_i^{-1} infinitezimális forgatásai a következő alakot veszik fel:

$$\Delta t_i^{-1(1)} = \sum_{n=1,2} i \vec{e}_n [\vec{J}, t_i^{-1}] d2_n \quad (2.26)$$

ahol \vec{J} relativisztikus esetben a pályamomentum- és a spinoperátorok összege, míg klasszikus esetben csak a spinoperátor. A szabadenergia szög szerinti deriváltjainak meghatározásához szükségünk van a t-mátrixok szög szerinti másodrendű megváltozásaira is:

$$\Delta t_i^{-1(2)} = - \sum_{m,n=1,2} \vec{e}_n \vec{e}_m [\vec{J}, [\vec{J}, t_i^{-1}]] d2_n d2_m \quad (2.27)$$

Ezen deriváltak felhasználásával a t-mátrix megváltozásai:

$$\Delta t_i^{-1} = \sum_{n=1,2} i \vec{e}_n [\vec{J}, t_i^{-1}] d2_n - \sum_{m,n=1,2} \vec{e}_n \vec{e}_m [\vec{J}, [\vec{J}, t_i^{-1}]] d2_n d2_m \quad (2.28)$$

Az 2.28 felhasználásával az SPO logaritmus a következő alakot veszi fel:

$$\ln(\tau') = \ln(t^{-1} + \Delta t_i^{-1} - G_o)^{-1} \quad (2.29)$$

A csatolási állandók kiszámításához az szükséges, hogy a mágnesezettség irányát két különböző siteon változtassuk meg, ekkor a 2.29 egyenlet a következő alakú lesz:

$$\ln(\tau') - \ln(\tau) = \ln(t^{-1} + \Delta t_i^{-1} + \Delta t_j^{-1} - G_o)^{-1} \quad (2.30)$$

A 2.30 egyenletet másodrendig kifejtve:

$$\ln(\tau') - \ln(\tau) = -\tau(\Delta t_i^{-1(1)} + \Delta t_j^{-1(1)} + \Delta t_i^{-1(2)} + \Delta t_j^{-1(2)}) + \tau\Delta t_i^{-1(1)}\tau\Delta t_j^{-1(1)} \quad (2.31)$$

Az 2.31 és 2.25 egyenletek alapján a szabadenergia különböző siteokon történő elforgatás szerinti deriváltjai:

$$\frac{d^2 F}{d2_{n,i}d2_{m,j}} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \tau_{ij} \vec{e}_{n,i}[\vec{J}, t_i^{-1}] \tau_{ij} \vec{e}_{m,j}[\vec{J}, t_i^{-1}] \quad (2.32)$$

ahol $\vec{e}_{n,i}$ az i . rácshelyhez tartozó n . irányvektort, $2_{n,i}$ pedig az e tengely körüli forgatás szögét jelöli. Klasszikus számolás esetén ez az egyenlet visszaadja a Liechtenstein-formulát[9]. Ötvözetek esetén az energia megváltozása függ az adott rácshelyeken lévő atomok fajtajától is. Ebben az esetben a 2.17 egyenlet alapján elhelyezzük a két atomot a koherens közegben, majd így végezzük el a fent ismertetett számolást. Egy kétkomponensű ötvözet esetén a csatolások száma megnégyszereződik az egykomponensű rendszerhez képest, hiszen a csatolásokat minden lehetséges komponens között meg kell határozni.

A Heisenberg-csatolási állandók kiszámításához először vizsgáljuk meg, hogy mi történik a Heisenberg-modell Hamilton-függvényével, ha az egyes siteokon lévő vektorokat elforgatjuk. Tegyük fel, hogy kezdetben minden vektor ugyan abba az irányba áll, azaz ferromágneses alapállapotban van a rendszer. Ekkor az egyes vektorok forgatás szerinti deriváltjai:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{\sigma}_i}{d\varphi_{1,i}} &= \vec{e}_1 \times \vec{\sigma}_i = -\vec{e}_2 \\ \frac{d\vec{\sigma}_i}{d\varphi_{2,i}} &= \vec{e}_2 \times \vec{\sigma}_i = \vec{e}_1 \end{aligned} \quad (2.33)$$

Az 2.33 egyenletet felhasználva a Hamiltoni második deriváltjai:

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{d\varphi_{1,i}d\varphi_{1,j}} &= \vec{e}_2 J_{ij} \vec{e}_2 = J_{ij}^{22} \\
\frac{dH}{d\varphi_{2,i}d\varphi_{1,j}} &= -\vec{e}_1 J_{ij} \vec{e}_2 = -J_{ij}^{12} \\
\frac{dH}{d\varphi_{1,i}d\varphi_{2,j}} &= -\vec{e}_2 J_{ij} \vec{e}_1 = -J_{ij}^{21} \\
\frac{dH}{d\varphi_{2,i}d\varphi_{2,j}} &= \vec{e}_1 J_{ij} \vec{e}_1 = J_{ij}^{11}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Ezek az értékek kiszámíthatóak a 2.32 egyenletek alapján. Egy adott mágnesezettség irány mellett így megkapható a J_{ij} mátrix 4 komponense, tehát a teljes mátrix meghatározásához 3 különböző mágnesezettségirány mellett kell ezeket a komponenseket meghatározni.

2.5. Monte Carlo szimuláció

A Monte Carlo (MC) szimuláció során egy rendszer fázisterét mintavételezzük, oly módon, hogy az megfeleljen a fizikailag várt valószínűségeknek, így mérve különböző termodinamikai várható értékeket a rendszeren. Jelen esetben a rendszer egy-egy állapotát a spinek irányai, az állapot valószínűségét pedig az energiája határozzák meg. Munkám során két módszert használtam a minták kiválasztására:

2.5.1. Metropolis algoritmus

A Metropolis algoritmus[13] során egy véletlenszerű elrendezésből indulok ki, majd minden MC lépés során minden spinhez generálok véletlenszerűen egy új irányt ($\vec{\sigma}_i'$) amelyet P valószínűséggel fogadok el.

$$\begin{aligned}
Ha \quad \Delta E > 0, \quad akkor \quad P &= e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \\
Ha \quad \Delta E < 0, \quad akkor \quad P &= 1
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Ahol

$$\Delta E = \sum_{\langle j \neq i \rangle} (\vec{\sigma}_i' - \vec{\sigma}_i) J_{ij} \vec{\sigma}_j \tag{2.36}$$

Ez a módszer teljesíti a részletes egyensúly elvét, de nem minden lépésben generál új irányt, ami alacsony hőmérsékletek esetén elronthatja a feltételezett ergodicitást.

2.5.2. Heat-Bath algoritmus

A Heat-Bath algoritmus[14] előnye a Metropolissal szemben, hogy minden lépésben sikeresen generál új irányokat, de cserébe ezen új irány legenerálása lassabb. Ez az algoritmus kihasználja, hogy egy adott spin energiája csak a lokális térrel ($B_{loc}^{\vec{}}$) való bezárt szögétől és a $B_{loc}^{\vec{}}$ nagyságától függ, ahol a lokális teret az i . siteon következő módon

definiáljuk:

$$B_i^{\vec{loc}} = \sum_{\langle j \neq i \rangle} J_{ij} \vec{\sigma}_j \quad (2.37)$$

Ez a szögfüggés kiintegrálható, így lehetőség van a $B^{\vec{loc}}$ -sal bezárt szög egyszerű generálására, majd a lokális tér tengelye körüli forgatásra egy véletlen $[0-2\pi]$ szöggel, így megkapva az új irányt. Ezen algoritmus hátránya, hogy amennyiben a rendszerben anizotrópia van, akkor nem használható, mivel az megtöri a lokális tér menti forgásszimmetriát. Ugyanis ha a rendszer nem rendelkezik forgási szimmetriával, akkor a bezárt szög meghatározásához egy 2 dimenziós eloszlásból kéne mintavételezni, amely már sokkal több időt venne igénybe.

3. Szimulációs kód

Az ötvözetek mágneses tulajdonságainak meghatározására egy Monte Carlo módszeren alapuló szimulációs kódot fejlesztettem C++ nyelven. A programban több helyen felhasználtam a GSLben (GNU Scientific Library) előre megírt függvényeit.

3.1. A program szerkezete

A program alapvetően két főbb egységre osztható. Elsőként fel kell építeni a későbbiekben szimulált rácsot, elhelyezni a különböző komponenseket a rácshelyeken, kiszámítani a lokális tereket és a maximális mágnesezettséget. Ezután a Metropolis/HeatBath algoritmus segítségével fel kell térképezni a fázisteret és elkészíteni a termodinamikai átlagokat.

3.2. A rács elkészítése

A rács elkészítése során a program minden egyes sitera c_i valószínűséggel elhelyez egy i típusú atomot, véletlenszerű mágnesezettség iránnyal. Miután ez megtörtént, minden rácshelyre ki kell számítani a lokális teret 2.37 szerint, valamint ki kell számítani a rács maximális mágnesezettségét:

$$M^{max} = \sum_i \mu_i \quad (3.1)$$

ahol a μ_i az i típusú atomhoz tartozó mágneses momentum. Ekkor megtörténik az atomok szomszédainak és csatolási mátrixainak lementése is, így felgyorsítva a későbbi számításokat. Mivel egy ilyen rács esetén több különböző konfiguráció lehetséges, ezért a szimulációkat több rácsra futtatom le, majd azok eredményeit átlagolom.

3.3. A szimuláció

A szimuláció során több különböző hőmérsékletre szeretném kiszámítani a termodinamikai mennyiségeket. Minden egyes átlagolás előtt egy hosszú (a spinek számával egy nagyságrendbe eső lépésből álló) termalizáció történik, így garantálva, hogy az átlagba

nem kerülnek túlreprezentáltak a korábbi számításokhoz tartozó állapotok. Ezután megkezdődik a mérési fázis, ahol MC lépésenként mérem a mágnesezettséget és energiát, valamint ezen mennyiségek magasabb momentumait. Eredetileg minden lépéshez Metropolis algoritmust használok, de amennyiben a sikeres spinfordítások aránya egy meghatározott érték alá csökken (jelen esetben ez 0.7) akkor a program a HeatBath algoritmusra vált, így gyorsítva fel a fázistér bejárását. Valamint minden termalizáció után egy pillanatképet készítek a rendszerről, amely segíthet megérteni a viselkedését. A szimuláció során a következő mennyiségeket átlagolom:

$$\begin{aligned}
\text{A mágnesezettség: } M &= \sum_i \mu_i \vec{\sigma}_i \\
\text{A mágnesezettség momentumai } M^2 &= \vec{M}^2, \quad M^4 = (M^2)^2 \\
\text{Az energia: } E &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{\sigma}_i J_{ij} \vec{\sigma}_j
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Valamint minden hőmérsékletre a a következőket számítom ki:

$$\begin{aligned}
\text{A szuszceptibilitást: } \chi &= \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T} \\
\text{A fajhőt: } C_V &= \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(k_B T)^2} \\
\text{A Binder-kumulánst } U_4 &= 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Megmutatható, hogy a Binder-kumuláns[15] értéke a kritikus hőmérsékleten független a rács méretétől, így segítségével pontosabban azonosíthatjuk az átalakulási hőmérsékletet.

3.4. Validáció

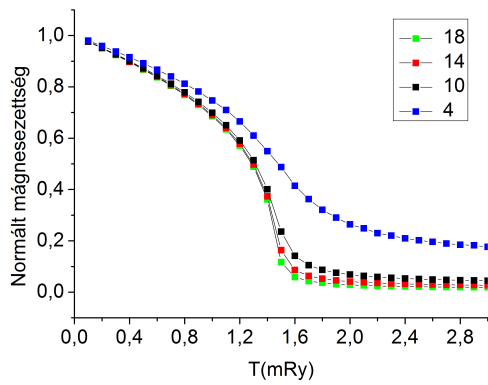
A program validálásához három különböző modellrendszert használtam fel.

3.4.1. Egykomponensű ferromágneses

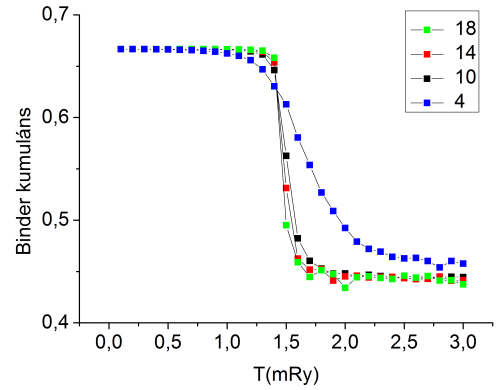
Az első modellrendszer egy egykomponensű, köbös rácsszerkezetű rendszer, ahol spinek csak az első szomszédakkal hatnak kölcsön, ferromágnesesen. A használt csatolási mátrix a következő alakú:

$$J_{ij}^{ferro} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

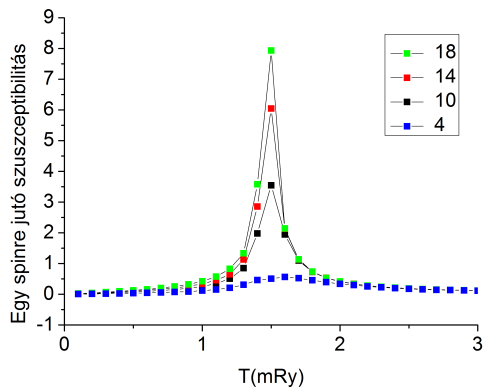
A szimulációkat elvégezve egy $L \times L \times L$ -es rácsra, ahol $L = 10; 14; 18$, a következő eredményeket kaptam:



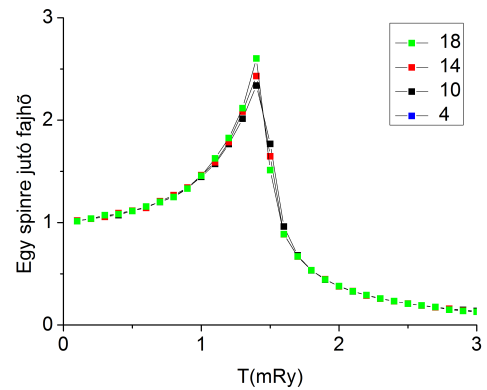
(a) Normált mágnesezettség



(b) Binder kumuláns



(c) Egy részecskére jutó szuszeptibilitás



(d) Egy részecskére jutó fajhő

3.1. ábra. Szimulációs eredmények az egykomponensű ferromágneses modellrendszerre

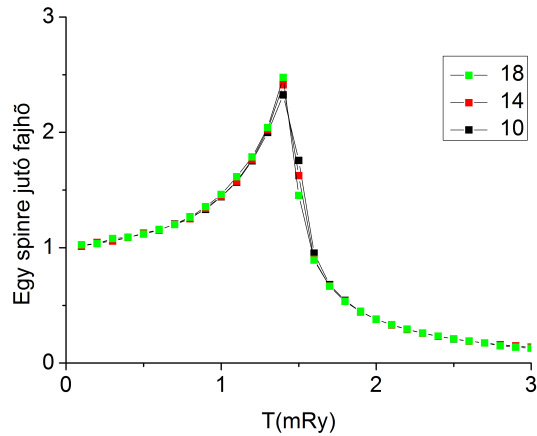
Az átlagtérelmélet alapján tudhatjuk, hogy $T_C \leq \frac{J}{3} = 2$, amit az eredmények is igazolnak. Mind a szuszeptibilitásban és a fajhőben egy csúcsot lehet látni $T \approx 1.45 \pm 0.5 mRy$ -nél, amely a kritikus hőmérsékletre utal. Valamint a Binder-kumulánsok metszéspontja is $T_c^{Binder} = 1.42 \pm 0.1 mRy$ -nél található. A kritikus hőmérséklet pontosabb meghatározásához egy részletesebb szimulációt is lefuttattam az 1.4-1.5 mRy tartományon. Ennek eredményként $T_c^{SC} = 1,437$ adódott, mely az irodalmi értéktől[16] kisebb mint 0.5%-os eltérést mutat.

3.4.2. Egykomponensű antiferromágneses

Ez a modellrendszer megegyezik az egykomponensű ferromágneses rendszerrel, azzal a különbséggel, hogy itt elsőszomszéd antiferromágneses csatolás van. Ennek a csatolási mátrixa:

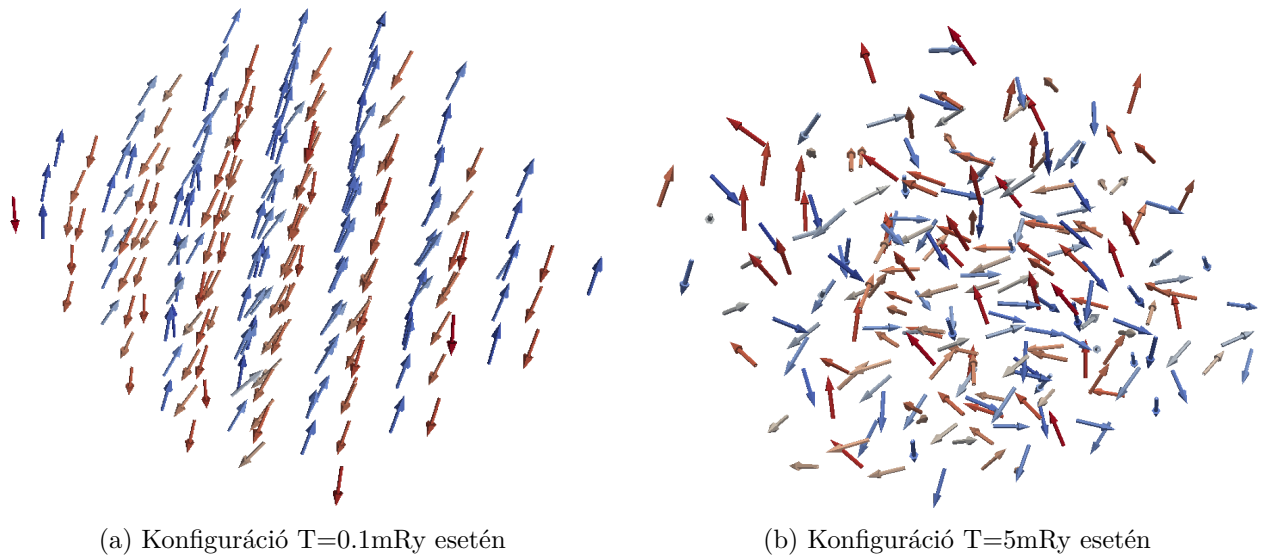
$$J_{ij}^{anti} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

A várakozások szerint ezen a rendszeren a fajhőben ugyan ott tapasztalunk csúcsot, mint a ferromágneses esetben, ami teljesül is:



3.2. ábra. Fajhő az egykomponensű antiferromágneses modellrendszerre

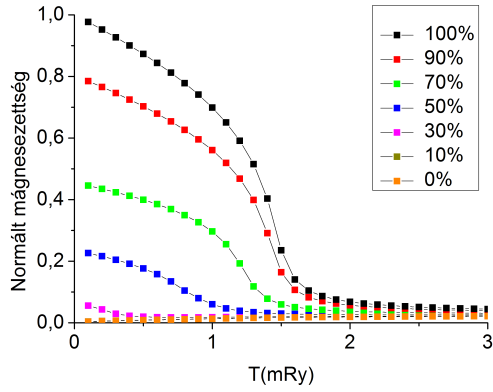
Valamint alacsony hőmérsékleten rendezett antiferromágneses, magas hőmérsékleten pedig rendezetlen konfigurációt várunk.



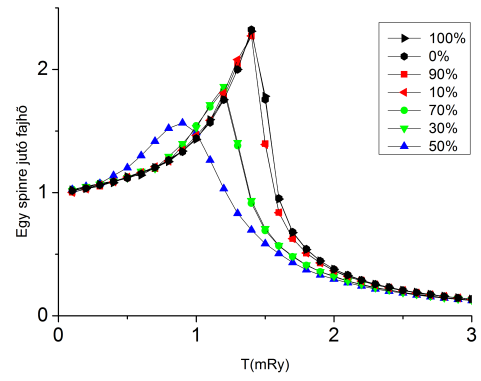
3.3. ábra. Az antiferromágneses rendszer egy-egy konfigurációja különböző hőmérsékletek esetén

3.4.3. Kétkomponensű rendszer

A harmadik modell egy kétkomponensű rendszer, amelyben az "A" komponensek között ferromágneses csatolás volt, míg az "A-B", "B-A" és "B-B" csatolások antiferromágnesesek. A várakozások szerint a "B" komponens koncentrációjának növelésével a rendszer az egykomponensű ferromágneses rendszerből az egykomponensű antiferromágneses rendszerbe megy át.



(a) Mágneszettség különböző F-AF arány esetén



(b) Fajhő különböző F-AF arány esetén

3.4. ábra. Átmenet ferromágneses rendszerből antiferromágnesesbe

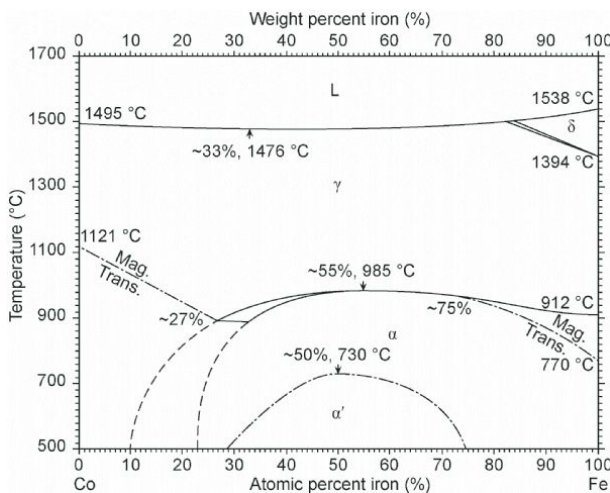
Látható, hogy a mágneszettségben az átmenet egyenletes. A fajhőnél pedig megfigyelhető, hogy az $A_{1-x}B_x$ és A_xB_{1-x} ötvözetek ugyan úgy viselkednek, és végül a B komponens koncentrációjának növelésével eljut az antiferromágneses határesethez.

4. Eredmények

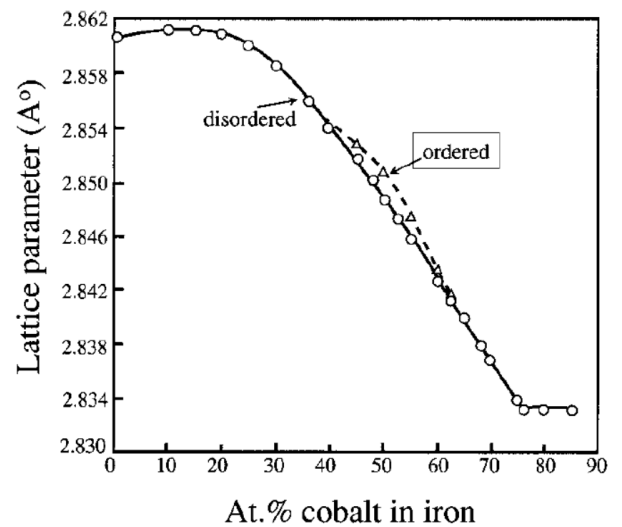
Ebben a fejezetben az $Fe_{1-x}Co_x$ ötvözetekre kapott eredményeket ismertetem.

4.1. Rácsszerkezet

A számításokban az $0 \leq x \leq 0.15$ tartományt vizsgáltam, ahol az ötvözetnek a kérdéses hőmérsékleten és koncentrációk mellett tércentrált köbös rácsa van.



(a) FeCo fázisdiagram



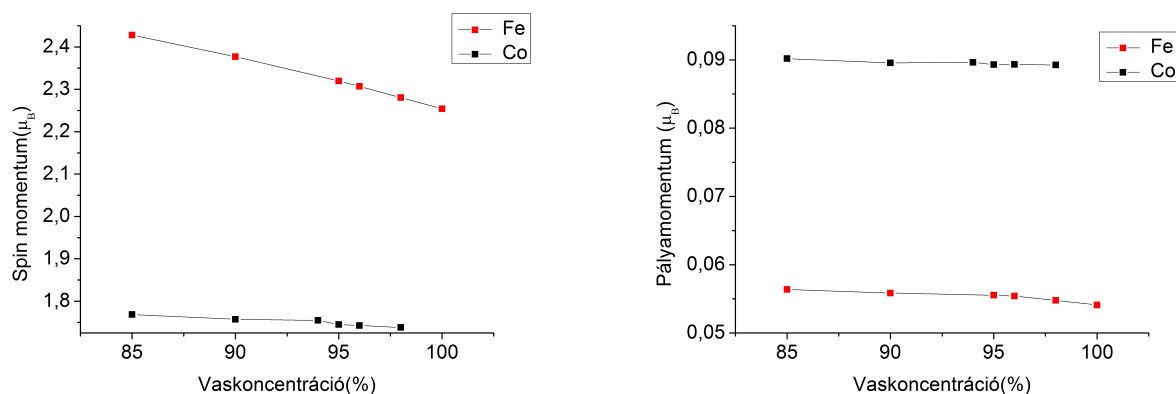
(b) Rácsállandó koncentrációfüggése

4.1. ábra. Rács tulajdonságok a koncentráció és hőmérséklet függvényében [17]

Látható, hogy a rácsparaméter a kérdéses tartományon alig változik, ezért a számítások során minden koncentrációhoz $a = 2,869\text{\AA}$ rácscsillammal számoltam. Valamint az is megfigyelhető, hogy 40%-os kobaltkoncentráció alatt nem történik rendeződés az atomok között, tehát megengedett a Co atomokat a rácson véletlenszerűen elhelyezni.

4.2. KKR eredmények

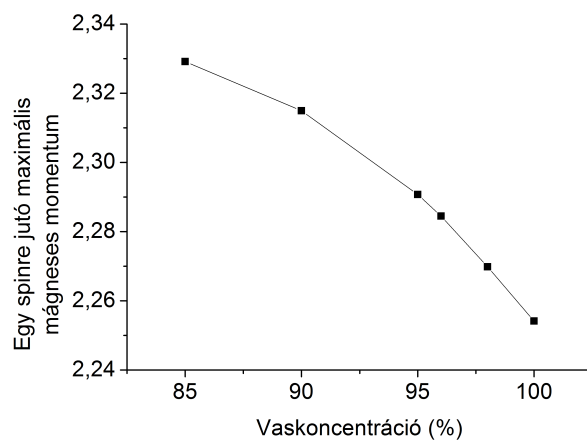
A 2.1 fejezetben ismertetett módszerrel meghatároztam az egy atomra jutó spin- és pályamomentumokat, a Fermi-energiát valamint a csatolási állandókat.



(a) Spinmomentumok a koncentráció függvényében (b) Pályamomentumok a koncentráció függvényében

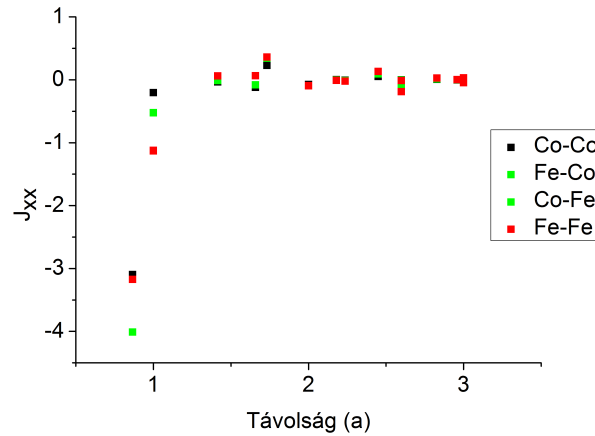
4.2. ábra. A spin- és pályamomentumok koncentrációfüggése a két komponensre

Ez alapján látható, hogy a mágneses tulajdonságok vizsgálatakor nem követünk el nagy hibát a pályamomentumok elhanyagolásával, valamint fontos megkülönböztetnünk a vas és kobalt atomok mágneses momentumait. A kapott értékekből meghatározható a szaturációs mágnesezettség is:



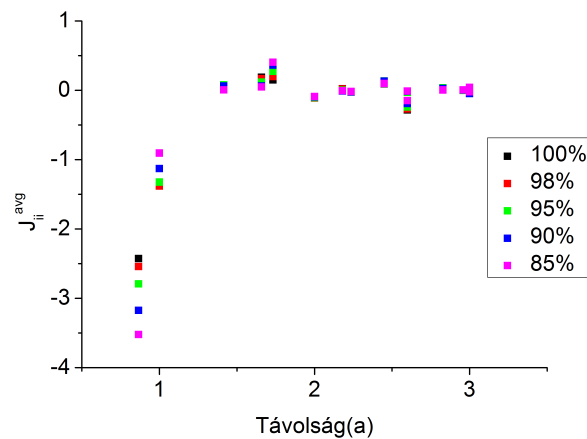
4.3. ábra. A szaturációs mágnesezettség a koncentráció függvényében

A csatolási állandókat egy atom és 256 szomszédja között számítottam ki, amik a központi atomtól való távolság függvényében a következő alakúak:



4.4. ábra. $Fe_{90}Co_{10}$ csatolási mátrix J_{XX} komponense a távolság és komponensek függvényében

A távolságok rácsállandó egységekben értendők. Egyes távolságoknál azért látható több érték, mivel vannak olyan atomok, amelyek központi atomtól való távolsága megegyezik, de a relatív helyvektoruk nem. Megfigyelhető, hogy az első két szomszédra erős ferromágneses csatolást kapunk, de a további szomszédoknál antiferromágneses csatolások is megjelennek. Valamint azt is, hogy a csatolási állandók a távolság függvényében gyorsan lecsengenek, így a távolabbi atomokkal vett kölcsönhatás elhanyagolható. Mivel az általam szimulált tartományban a Co koncentráció kicsi, ezért ezeket az ötvözeteket a Fe-Fe csatolási mátrix fogja dominálni. A Fe-Fe csatolások erőssége a koncentráció függvényében:



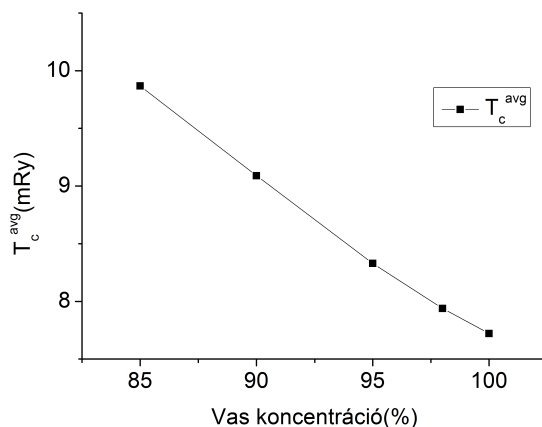
4.5. ábra. A $Tr(\underline{J}^{FeFe})/3$ a vas koncentráció függvényében

Látható, hogy az elsőszomszéd csatolás a Co koncentráció növekedésével erősödik, de a másodsomszéd kölcsönhatás gyengül, így csak ebből nem vonható le várakozás a kritikus hőmérséklet koncentrációfüggésére. A Curie-hőmérséklet koncentrációfüggésének megbecsléséhez az átlagtérelméletet használtam, amely alapján ötvözetekre a T_c a követ-

kező módon becsülhető:

$$T_c^{avg} = \frac{1}{3} \left(\sum_{\langle i \rangle} \sum_{k,l} c_k c_l T_r(\underline{J}_i^{k-l}) \right) \quad (4.1)$$

ahol i a szomszédokat, k és l pedig a komponenseket indexeli, valamint \underline{J}_i^{k-l} az i . szomszédokkal való csatolási mátrixot jelöli, abban az esetben amikor a központi atom k , az i . szomszéd pedig l típusú. Ebben a közelítésben az átlagtérelmélet alapján várt kritikus hőmérsékletek:



4.6. ábra. A T_c^{avg} a vas koncentráció függvényében

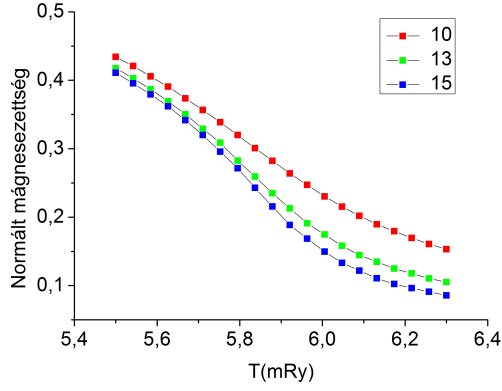
Tehát a Co koncentráció növelésével a kritikus hőmérséklet növekedését várjuk.

4.3. Szimulációs eredmények

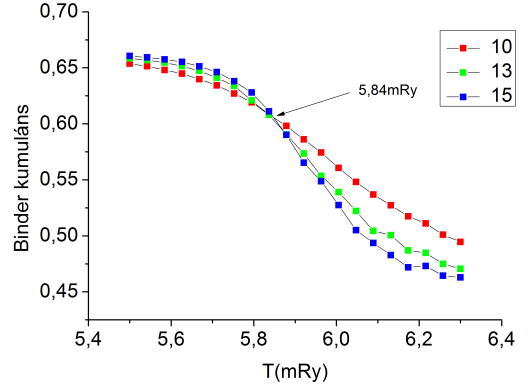
A következő fejezetben a MC szimulációk eredményeit részletesen ismertetem tiszta vasra, valamint $Fe_{93}Co_7$ -re, majd összefoglalom az eredményeket más koncentrációk esetén is.

4.3.1. Szimulációs eredmények Fe_{100} -ra

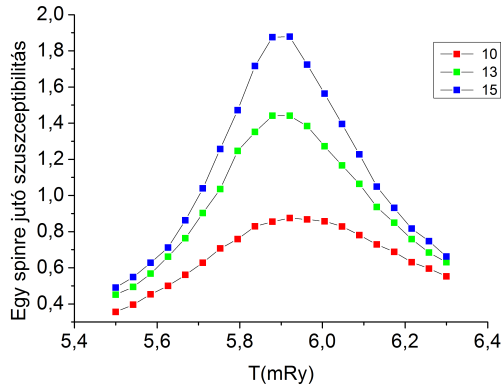
A tiszta vas Curie-hőmérséklete mérések alapján 1043K. Az átlagtérelmélet alapján nekem 1220K adódott, ami tudva, hogy az átlagtérelmélet túlbecsüli a rendezettséget jó becslést ad. A szimulációt $L = 10; 13$ és 15 -ös rácsmérettel végeztem, mert ezek a rácsok már elég nagyok ahhoz, egy egy spin ne csatolódjon önmagához a periodikus határfeltételek miatt, de a futási idő se legyen túl hosszú.



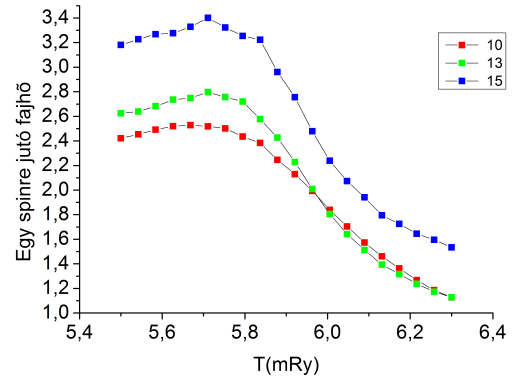
(a) Normált mágneszettség



(b) Binder kumuláns



(c) Egy részecskére jutó szuszeptibilitás



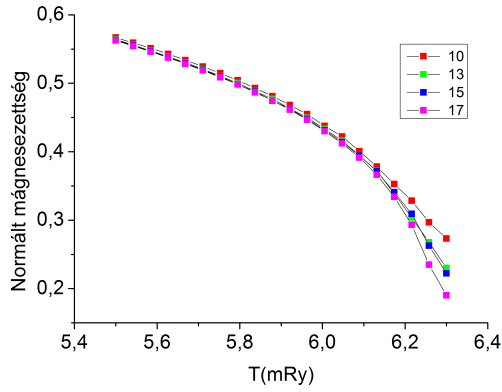
(d) Egy részecskére jutó fajhő

4.7. ábra. Szimulációs eredmények a tiszta vasra

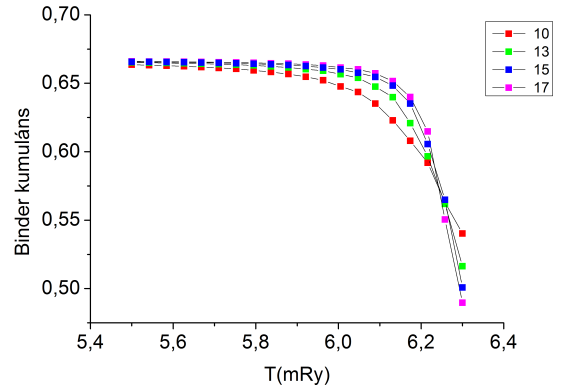
A számolások során minden egyes hőmérsékleten 150000 átlagolást végeztem, 10000 temperáló lépéssel minden hőmérsékletváltás esetén. Jól megfigyelhető a szuszeptibilitásban és a fajhőben megjelenő csúcs, ami a kritikus hőmérsékletet jelzi, de ezek nem ugyan ott vannak, és mivel a szimulált rácsok relatíve kicsik, ezért a véges méret skálázódás hatását is figyelembe kéne venni. Ezzel szemben a Binder-kumulánsban jól látható a metszéspont, amely már nem érzékeny a rács méretére. Ez alapján a $T_c^{Fe_{100}} = 922K$ adódik, amely mintegy 12%-os eltérés az irodalmi értékhez képest, de jó egyezést mutat egy véletlen fázis közelítéssel (RPA) elvégzett számítással[18], ahol 950K adódott a Curie-hőmérsékletre.

4.3.2. Szimulációs eredmények $Fe_{93}Co_7$ -re

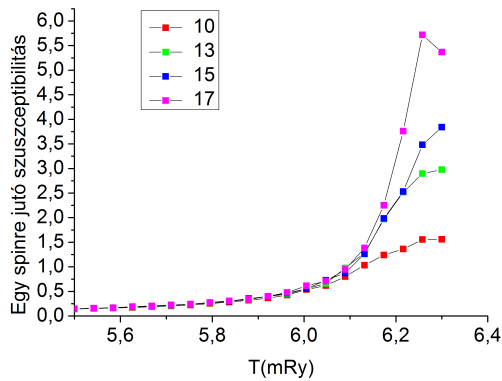
Az átlagtérelmélet alapján ezen a koncentráción magasabb Curie-hőmérsékletet várhatunk, mint tiszta vas esetén. Ebben az esetben már fontos több, különböző rácson végzett számítást átlagolni, mivel a különböző rácselrendezések más-más eredményeket adnak, és ekkora rácsok nem elegek ahhoz, hogy ezek már egy rácsra kiátlagolódnak.



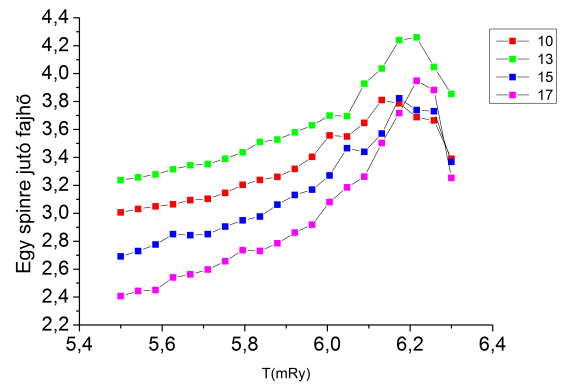
(a) Normált mágnesezettség



(b) Binder kumuláns



(c) Egy részecskére jutó szuszceptibilitás



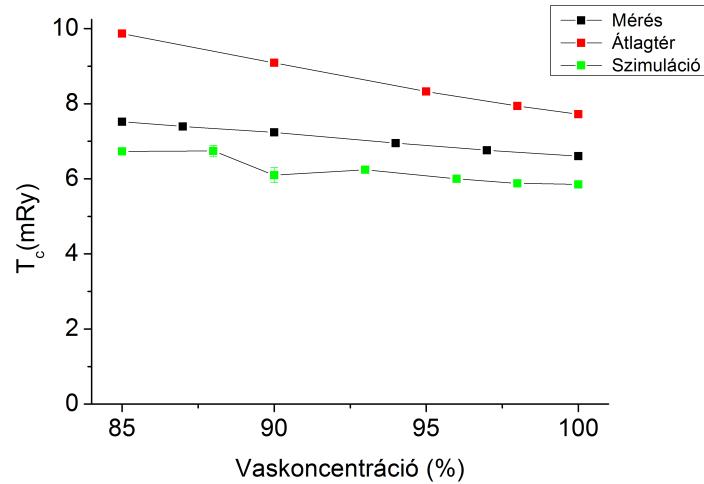
(d) Egy részecskére jutó fajhő

4.8. ábra. Szimulációs eredmények a $Fe_{93}Co_7$ -re, különböző rácsméretetek esetén

A számolások során minden egyes hőmérsékleten 30000 átlagolást végeztem, 4000 temperáló lépéssel minden hőmérsékletváltás esetén, valamint 6 különböző rácskonfiguráció eredményeit átlagoltam. Látható, hogy a szuszceptibilitás és fajhő görbék kevésbé simák, mint a Fe_{100} esetében, ez azzal magyarázható, hogy a limitált számítási teljesítmény miatt nem volt lehetőség megfelelően sok különböző rácskonfiguráció összeátlagolására. Valamint a kritikus hőmérséklet közelében a termodinamikai jellemzők átlagolásának konvergenciája jelentősen lelassul, így ugyan annyi átlagolás eredményeként kisebb pontosságot lehet csak elérni. A Binder-kumulánsból ebben az esetben is meghatároztam a kritikus hőmérsékletet, ami $T_c^{Fe_{93}} = 987K$ -nek adódott.

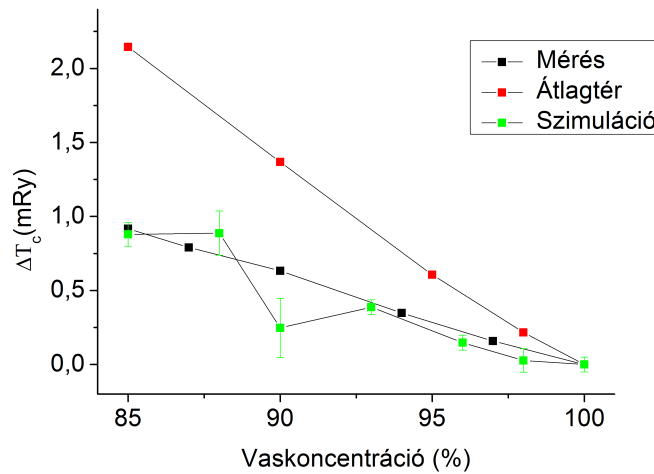
4.3.3. A T_c koncentrációfüggése

A $Fe_{1-x}Co_x$ ötvözetek Curie-hőmérsékletének koncentrációfüggését már mérésekkel meghatározták. Ezek az eredmények tendencia szempontjából összhangban vannak mind a szimulációból, mind az átlagtérelméletből kapott eredményekkel.



4.9. ábra. A T_c a vas koncentráció függvényében

Bár megfigyelhető, hogy az átlagtérelmélet egyre rosszabb közelítést ad a kobaltkoncentráció növekedésével. Amennyiben a kritikus hőmérséklet változását vizsgáljuk a koncentráció függvényében, akkor egy kiszóró pont kivételével még jobb egyezést tapasztalunk.



4.10. ábra. A T_c megváltozása a vas koncentráció függvényében

A szimulációból kapott kritikus hőmérséklet hibájának becsléséhez a szimuláció hőmérsékletbeli felbontása és a Binder-kumulánsban kapott metszéspontok legnagyobb távolságának fele közül a nagyobb értéket választottam.

5. Összefoglalás

A TDK dolgozatom célja az alacsony kobalttartalmú vas-kobalt ötvözetek kritikus hőmérsékletének feltérképezése volt, a kobalt koncentrációjának függvényében. Ennek kiszámításához szükségem volt az ötvözetek elektronszerkezetére. Ezen elektronszerkezetek meghatározásához megismertem a DFT és KKR elméleteket, valamint megtanultam kezelni az Elméleti Fizika Tanszék KKR módszeren alapuló programját. A kapott elektronszerkezetekből meghatároztam a Heisenberg-modell csatolási állandóit, amiket bemenetként használtam az általam írt MonteCarlo módszeren alapuló szimulációs kódba. Ezen szimulációs programban implementáltam a Metropolis/HeatBath algoritmusokon alapuló spinforgatást, valamint a program struktúrája úgy van felépítve, hogy könnyen bővíthető legyen új funkciókkal. A szimuláció eredményeként kapott Binder-kumulánsokból meghatároztam a kritikus hőmérsékleteket, amelyek 13%-os hibával megegyeztek az irodalmi értékekkel.

A továbbiakban szeretném kibővíteni a szimulációs kódot on-site anizotrópia kezelésére is, valamint a metadinamika implementálásával számításokat végezni $Fe_{0.5+x}Co_{0.5-x}$ rendszerre, ahol az $-0.2 \leq x \leq 0.2$. Ebben a tartományban az ötvözet rendezett szerkezetet vesz fel, ahol a kobalt- és vasatomok külön rétegekbe rendeződnek. Ekkor a rács torzul, így mágnesség szempontjából egy kitüntetett iránnyal fog rendelkezni. Jövőbeni célként ezen rendezett ötvözetek anizotrópia energiájának a koncentráció és hőmérsékletfüggését szeretném meghatározni.

Végül köszönetet szeretnék mondani témavezetőmnek, Dr. Udvardi Lászlónak az útmutatásáért és hasznos tanácsaiért, a KKR elektronszerkezet számító program fejlesztőinek, valamint az Elméleti Fizika Tanszéknek, hogy rendelkezésemre bocsátották a tanszék számítógépeit a szimulációk elvégzésére.

Hivatkozások

- [1] I. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids **4**, 241 (1958).
- [2] S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Boni, Science **323**, 915 (2009).
- [3] N. Romming, A. Kubetzka, Ch. Hanneken, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **114**, 177203 (2015).
- [4] Electron Scattering in Solid Matter, ISBN:3-540-22524-2
- [5] J. Korringa. (1947). Physica, **13**, 392
- [6] Durham, P. J., Gyorffy, B. L. , Pindor, A. J. (1980) J. Phys. **F 10**, 661–668.
- [7]] V. P. Antropov, M. I. Katsnelson, B. N. Harmon, M. van Schilfgaarde, and D. Kusnezov, Phys. Rev. **B 54**, 1019 (1996)
- [8] S. V. Halilov, H. Eschrig, A. Y. Perlov, P. M. Oppeneer; Phys. Rev. **B 58**,293 (1998)
- [9] A.I. Liechtenstein, M.I. Katsnelson, V.P. Antropov, V.A. Gubanov, J. Magn.; Magn. Mater. **67**, 65 (1987)
- [10] L. Udvardi, L. Szunyogh, K. PalotAs, and P. Weinberger, Phys. Rev. **B 68**, 104436 (2003)
- [11] A. Oswald, R. Zeller, P.J. Braspenning, and P.H. Dederichs, J. Phys. F: Met. Phys. **15**, 193 (1985)
- [12] P. Lloyd, Proc. Phys. Soc. London **90**, 207 (1967)
- [13] Metropolis, N.; Rosenbluth, A.W.; Rosenbluth, M.N.; Teller, A.H.; Teller, E. (1953). Journal of Chemical Physics. **21**: 1087–1092.
- [14] D. Loison, C.L. Qin, K.D. Schotte, and X.F. Jin; Eur. Phys. J. **B 41**, 395–412 (2004)
- [15] K.Binder; Z.Phys. **B 43** (1981) 119-140
- [16] Kun Chen, Alan M. Ferrenberg, and D. P. Landau; Phys. Rev. **B 48** 3249 (1993)
- [17] R. S. Sundar, S. C. Deevi; Int. Mater. Rev. **50** (2005), 157-191
- [18] J. Kudrnovsky, V. Drchal,I. Turek, M. Pajda, P. Bruno; Czechoslovak Journal of Physics, Vol. **52** (2002), 215-218