

ЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.20.Be, 71.27.+a, 71.28.+d, 71.55.Jv, 75.10.Lp, 75.40.Cx

Магнитные фазовые диаграммы двухкомпонентных неупорядоченных ОЦК-сплавов замещения с сильными электронными корреляциями

В. В. Лизунов, Е. Г. Лень, И. Н. Мельник, Н. В. Ушаков,
Т. С. Лень*, В. А. Татаренко

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,*

03680, ГСП, Киев-142, Украина

**Национальный авиационный университет,*

пр. Космонавта Комарова, 1,

03058 Киев, Украина

В работе исследованы энергетические спектры электронов и предсказаны диаграммы магнитных фазовых состояний неупорядоченных бинарных ОЦК-сплавов замещения с различными значениями параметра рассеяния электронов на атомах обоих компонентов. Для описания таких сплавов предложена однозонная модель сильной связи, учитывающая электрон-электронные взаимодействия в приближении коррелированного случайногополя. Показано, что тип магнитного порядка сплавов определяется как энергетическими параметрами кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле и средней электронной концентрацией, так и величиной атомного потенциала рассеяния. В отличие от однокомпонентных систем в исследованных сплавах антиферромагнитное упорядочение имеет пороговый характер, то есть для всех возможных значений средней электронной концентрации оно не может устанавливаться при сколь угодно малых значениях потенциала кулоновского отталкивания электронов на одном узле.

В роботі досліджено енергетичні спектри електронів і передбачено діаграми магнітних фазових станів невпорядкованих бінарних ОЦК-стопів заміщення з різними значеннями параметра розсіяння електронів на атомах обох компонентів. Для опису таких стопів запропоновано однозонну модель сильного зв'язку, що враховує електрон-електронні взаємодії в наближенні корельованого випадкового поля. Показано, що тип магнітного порядку стопів визначається як енергетичними параметрами Кулонового відштовхування електронів з протилежними спінами на одному вузлі і середньою електронною концентрацією, так і величиною атомного

розсіювального потенціалу. На відміну від однокомпонентних систем у дослідженіх стопах антиферомагнітне впорядкування має пороговий характер, тобто за всіх можливих значень середньої електронної концентрації воно не може встановлюватися при скільки завгодно малих значеннях потенціалу Кулонового відштовхування електронів на одному вузлі.

Electron-energy spectra and diagrams of magnetic-phase states of disordered b.c.c. binary substitutional alloys for various values of the parameter of electron scattering by atoms of both constituents are investigated. To describe properties of these alloys, one-band tight-binding model taking into account electron-electron interactions in the correlated random field approximation is proposed. As shown, the type of magnetic order of alloy is defined by the energy parameters of the Coulomb repulsion of electrons with opposite spins at the one site, the average electron density, and value of the atomic scattering potential. As opposed to the one-component systems, in alloys at issue, the antiferromagnetic ordering has a threshold character, i.e., for all possible values of the mean electron concentration, it cannot be set at arbitrarily small values of the potential of the Coulomb repulsion of electrons on the one site.

Ключевые слова: электронная структура, сильные электронные корреляции, магнитная фазовая диаграмма, магнитные сплавы.

(Получено 29 ноября 2013 г.; окончат. вариант — 5 мая 2014 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Успехи современной электроники связаны с прогрессом в понимании свойств твердых тел, что позволяет создавать новые материалы с наперед заданными характеристиками. При этом большое внимание уделяется магнитным материалам, свойства которых можно изменять внешним магнитным полем, давлением, вариациями температуры, а также за счет других факторов. Так, переходные металлы и соединения на их основе, а также разбавленные магнитные полупроводники, в которых может реализовываться магнитное упорядочение различного типа, уже нашли широкое практическое применение и при этом являются перспективными для дальнейшего использования в новых направлениях электроники. Разнообразие свойств этих систем в основном обусловлено присущим им сильным электрон-электронным взаимодействием, порождающим межэлектронные корреляции, и существенной зависимостью последних от различных внешних параметров и характеристик самой системы [1].

Последние десятилетия характеризовались существенным прогрессом теоретических методов описания решеточных систем с сильными электронными корреляциями [2–9], в том числе методов, основанных на модели Хаббарда [2–4]. Эта модель позволила опи-

сать электронную структуру и свойства кристаллов, в частности, свободную энергию, локализованные магнитные моменты и их взаимную ориентацию на узлах кристаллической решетки, не налагая ограничений на степень локализации электронов.

При этом установлено, что характерной особенностью электронной структуры сильно коррелированных систем является расщепление энергетического спектра электронов, связанное с кулоновским отталкиванием электронов с противоположно направленными спинами на одном узле. Оно обуславливает возможность перехода металл–диэлектрик в указанных системах при полном расщеплении спектра (появлении кулоновской щели). В свою очередь, расщепление энергетического спектра электронов в немагнитных сплавах может быть обусловлено атомным упорядочением, и при установлении дальнего атомного порядка также возможен переход металл–диэлектрик. Кроме того, характер атомного и магнитного порядков, магнитные и электронные транспортные свойства как сплавов, так и сильно коррелированных систем зависят от положения уровня Ферми по отношению к вышеупомянутым щелям в их энергетических спектрах [10, 11]. Таким образом, исследования энергетического спектра электронов неупорядоченных магнитных сплавов должны выполняться с учетом взаимосвязи электрон–электронных корреляций и атомного упорядочения в кристаллах с различными атомными потенциалами рассеяния компонентов.

Наиболее успешными для расчета электронных свойств обсуждаемых систем на данный момент являются методы, использующие приближение динамического кластера (DCA—dynamical cluster approximation [12]), которое корректно описывает термодинамику системы с сильными электронными корреляциями, учитывая также нелокальность эффектов взаимодействия электронов. Методы, использующие DCA, основаны на кластерном обобщении теории динамического среднего поля (DMFT—dynamical mean-field theory, см., например, [5]), что обеспечивает их широкую применимость, но и значительную вычислительную сложность. Поэтому наряду с ними продолжают часто использоваться и другие подходы [13–15], позволяющие (пусть и не в полной мере) учесть вклад различных степеней свободы и проанализировать, как те или иные малые возмущения могут приводить к значительным откликам системы. Подобные исследования имеют сегодня особую актуальность, учитывая быстрый рост возможностей современной экспериментальной физики и отсутствие полного понимания всего многообразия свойств сильно коррелированных систем, например, того же взаимного влияния решеточного разупорядочения и сильных электронных корреляций.

В данной работе исследованы энергетические спектры электронной подсистемы и предсказаны магнитные фазовые диаграммы

неупорядоченных двухкомпонентных ОЦК-сплавов замещения с сильными электронными корреляциями в зависимости от параметров рассеяния электронов на атомах обоих сортов.

2. ГАМИЛЬТОНИАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ И ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Гамильтониан электронной подсистемы неупорядоченного бинарного кристаллического сплава замещения в однозонной модели сильной связи с учетом электрон-электронного взаимодействия имеет вид [16, 17]:

$$H = \sum_{i,s} W_i a_{is}^+ a_{is} + \sum_{i,j \neq i,s} h_{ij} a_{is}^+ a_{js} + \sum_{i,s,s' \neq s} U_i n_{is} n_{is'}, \quad (1)$$

где a_{is}^+ , a_{is} — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии, которое описывается обобщенным вектором Ванье $|is\rangle$, i — номер узла кристаллической решетки, $s = \pm 1/2$ — значение проекции спина электрона на ось Z , $n_{is} = a_{is}^+ a_{is}$ — оператор числа электронов в состоянии $|is\rangle$. В формуле (1) W_i — диагональный по индексам узлов матричный элемент одноэлектронной части гамильтониана, случайно принимающий значения W_i^A или W_i^B в зависимости от того, какой атом (А или В) находится в узле i , h_{ij} — недиагональный матричный элемент гамильтониана (интеграл пересека), который будем считать отличным от нуля и одинаковым для всех ближайших соседей (т.е. $h_{ij} = h_{01}$ при i и j соответствующих первой координационной сфере вокруг выделенного узла, иначе $h_{ij} = 0$), U_i — энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле, случайно принимающая значения U_i^A или U_i^B в зависимости от того, какой атом (А или В) находится в узле i .

Используем приближение коррелированного случайного поля [18–23], основная идея которого состоит в замене в выражении (1) многочастичного члена случайнным одночастичным:

$$\sum_{i,s,s' \neq s} U_i n_{is} n_{is'} \equiv \sum_{i,s} U_i n_{is}, \quad (2)$$

где $U_{is} = U_i \bar{n}_{i-s}$ (тут чертой обозначена совокупность квантово-механического и термодинамического усреднений). Тогда многочастичный гамильтониан (1) можно представить в виде суммы одночастичных: $H = \sum_s H_s$.

Аналогичное приближение использовалось ранее Хаббардом в его «сплавовой аналогии» [2–4]. Однако, при упрощении третьего слагаемого в (1) считалось, что величины U_{is} являются случайными и независимыми, распределенными по бинарному закону. Это позволило просто учесть флуктуации электронной плотности на каждом узле отдельно, но полностью исключило корреляции между

электронами на соседних узлах, т.е. магнитное упорядочение в полной мере осталось неучтеным. Для адекватного описания магнитного порядка, при замене многочастичного слагаемого на соответствующее одночастичное (2), величины $\{U_{is}\}$ должны быть статистически зависимыми [18].

Еще одно, использованное в настоящей работе, приближение дается соотношением:

$$\bar{n}_{i \frac{1}{2}} + \bar{n}_{i -\frac{1}{2}} \equiv n, \quad (3)$$

где n — среднее значение электронной концентрации. Оно состоит в приближенном учете зарядовых флуктуаций, связанных с кулоновским взаимодействием в (1). Тогда

$$U_{is} = U_i(n - \sigma\mu)/2, \sigma = 2s \text{ при } s = \pm 1/2, \quad (4)$$

где

$$\mu = \bar{n}_{i \frac{1}{2}} - \bar{n}_{i -\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Обобщая выражения (2)–(5) на случай магнитных бинарных сплавов, получим, что матричные элементы U_{is} принимают значения $U_{is}^{\lambda m_\lambda} = U_i^\lambda n_{i-s}^{\lambda m_\lambda}$, где $n_{is}^{\lambda m_\lambda}$ — число электронов со спином s , находящихся в узле i , при условии, что в этом узле находится атом сорта λ с проекцией на ось Oz локализованного магнитного момента m_λ . Тогда диагональный матричный элемент гамильтониана (1) ε_{is} принимает случайные значения $\varepsilon_{is}^{\lambda m_\lambda}$, которые зависят от того, атом какого сорта λ ($\lambda = A, B$) находится в узле i и от проекции локализованного магнитного момента m_λ в узле i (в дальнейшем рассмотрен наиболее простой случай лишь двух значений m_λ : $m_\lambda = \mu_\lambda \sigma = \mu_\lambda^\pm$ соответственно при $\sigma = \pm 1$). Эквивалентность узлов позволяет здесь и далее записывать выражения только, например, для нулевого узла:

$$\varepsilon_{0s}^{\lambda m_\lambda} = W_0^\lambda + U_{0s}^{\lambda m_\lambda} n_{0s}^{\lambda m_\lambda}. \quad (6)$$

Из обобщенных на случай магнитных сплавов выражений (3) и (5) можно получить:

$$n_{0s}^{\lambda m_\lambda} = (n_0^{\lambda m_\lambda} + m_\lambda)/2, \quad n_{0-s}^{\lambda m_\lambda} = (n_0^{\lambda m_\lambda} - m_\lambda)/2, \quad (7)$$

где $n_0^{\lambda m_\lambda}$ — число электронов в узле 0, в котором находится атом сорта λ с проекцией на ось Oz магнитного момента m_λ . Величина $n_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ равна [18]

$$n_{0s}^{\lambda m_\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E) g_{0s}^{\lambda m_\lambda}(E) dE, \quad (8)$$

где $f(E)$ — функция Ферми,

$$g_{0s}^{\lambda m_\lambda}(E) = \mp \pi^{-1} \operatorname{Im} < G_{0,0}^s(E^\pm) > \Big|_{(0)\in\lambda,m_\lambda}, E^\pm = E \pm i\delta, \delta \rightarrow 0, \quad (9)$$

$g_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ — условная плотность состояний электронов со спином s , $< \dots > \Big|_{(0)\in\lambda,m_\lambda}$ обозначает конфигурационное усреднение при условии, что в узле 0 находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента его электронов m_λ , $G_{0,0}^s(E^\pm)$ — диагональный матричный элемент одночастичной функции Грина магнитного сплава $G^s(E^\pm) = (E^\pm - H_s)^{-1}$, $H_s = \varepsilon_s + H_{0s}$. Здесь $\varepsilon_s = \sum_i \varepsilon_{is} a_{is}^+ a_{is}$ и $H_{0s} = \sum_{i,j \neq i} h_{ij} a_{is}^+ a_{js}$ — соответственно диагональная и недиагональная в узельном представлении части гамильтониана.

Полная плотность электронных состояний связана с условной плотностью состояний (9) соотношением:

$$g(E) = v^{-1} \sum_{\lambda, m_\lambda, s} P_0^{\lambda m_\lambda} g_{0s}^{\lambda m_\lambda}(E), \quad (10)$$

где $P_0^{\lambda m_\lambda}$ — вероятность того, что в узле 0 находится атом сорта λ с проекцией локализованного магнитного момента m_λ . Тогда средняя концентрация электронов $<Z> = Z^A x^A + Z^B x^B$ на атом (Z^λ — валентность атома сорта λ в пересчете на одну эффективную зону, x^λ — концентрация атомов сорта λ) равна:

$$<Z> = \sum_{\lambda, m_\lambda, s} P_0^{\lambda m_\lambda} n_{0s}^{\lambda m_\lambda}. \quad (11)$$

Используя метод кластерного разложения для одночастичной функции Грина электронов неупорядоченного кристаллического сплава с сильными электронными корреляциями [13] и пренебрегая вкладами процессов рассеяния на кластерах из трех и более узлов, можно получить выражение для условной плотности электронных состояний в виде:

$$\begin{aligned} g_{0s}^{\lambda m_\lambda}(E) \approx & -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{G}_{0,0}^s + \tilde{G}_{0,0}^s t_{0s}^{\lambda m_\lambda} \tilde{G}_{0,0}^s + \sum_{(j) \neq (0), \lambda', m_{\lambda'}} P_{j0}^{\lambda' m_{\lambda'} / \lambda m_\lambda} \times \right. \\ & \times \left[\tilde{G}_{0,0}^s [1 - t_{0s}^{\lambda m_\lambda} \tilde{G}_{0,j}^s t_{js}^{\lambda' m_{\lambda'}} \tilde{G}_{j,0}^s]^{-1} t_{0s}^{\lambda m_\lambda} \tilde{G}_{0,j}^s t_{js}^{\lambda' m_{\lambda'}} (\tilde{G}_{j,0}^s + \tilde{G}_{j,0}^s t_{0s}^{\lambda m_\lambda} \tilde{G}_{0,0}^s) + \right. \\ & \left. \left. + \tilde{G}_{0,j}^s [1 - t_{js}^{\lambda' m_{\lambda'}} \tilde{G}_{j,0}^s t_{0s}^{\lambda m_\lambda} \tilde{G}_{0,j}^s]^{-1} t_{js}^{\lambda' m_{\lambda'}} \tilde{G}_{j,0}^s t_{0s}^{\lambda m_\lambda} (\tilde{G}_{0,0}^s + \tilde{G}_{0,j}^s t_{js}^{\lambda' m_{\lambda'}} \tilde{G}_{j,0}^s) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $\tilde{G}_{i,j}^s$ — матричные элементы функции Грина $\tilde{G}^s = (E^+ - \tilde{H}_s)^{-1}$ гамильтониана $\tilde{H} = H_{0s} + \sigma_s$ электронов со спином s в эффективной среде, описываемой когерентным потенциалом σ_s , $t_{0s}^{\lambda m_\lambda}$ — матричный элемент одноузельного оператора рассеяния $t_s = [1 - V_s \tilde{G}^s]^{-1} V_s$, где $V_s = \varepsilon_s - \sigma_s$, а $P_{j0}^{\lambda' m_{\lambda'} / \lambda m_\lambda}$ — условная вероятность найти в узле j атом сорта λ' с проекцией локализованного магнитного момента $m_{\lambda'}$ при условии, что в узле 0 находится атом сорта λ с проекцией лока-

лизованного магнитного момента m_λ .

Подчеркнем, что в отличие от «сплавовой аналогии» Хаббарда, подход [18], используемый в данной работе, позволяет описать магнетизм как локализованных, так и коллективизированных электронов, и, в частности, описать переход металл–диэлектрик в рассматриваемых сплавах.

Свободная энергия магнитного сплава при $T = 0$ К определяется аналогично работе [18] и дается выражением:

$$F = - \sum_{\lambda, m_\lambda} \frac{U_0^\lambda}{4} P_0^{\lambda, m_\lambda} [(n_0^{\lambda, m_\lambda})^2 - (m_0^\lambda)^2] + \int_{-\infty}^{\infty} f(E') g(E') E' dE'. \quad (13)$$

3. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Для упрощения численных расчетов представим вероятности нахождения атомов сорта λ и локализованных магнитных моментов m_λ в узлах кристаллической решетки в выражениях (10)–(12) в виде:

$$P_0^{\lambda, m_\lambda} \cong P_0^\lambda P_0^{m_\lambda}, \quad P_{j, 0}^{\lambda', m_{\lambda'}/\lambda, m_\lambda} \cong P_{j, 0}^{\lambda'/\lambda} P_{j, 0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda}, \quad (14)$$

где $P_0^\lambda = \langle c_0^\lambda \rangle$ — вероятность заполнения узла 0 атомом сорта λ (в отсутствие дальнего порядка равная концентрации атомов данного сорта x^λ), $P_0^{m_\lambda} = \langle c_0^{m_\lambda} \rangle$ — вероятность того, что в узле 0 проекция локализованного магнитного момента на ось Oz равна m_λ , $c_0^{m_\lambda}$ — случайное число, принимающее значение 1 или 0 в зависимости от ориентации (знака проекции) магнитного момента m_λ в узле 0, т.е. равенства m_λ значению μ_λ^+ или μ_λ^- , аналогично определяются случайные числа c_0^λ при значении λ , равном А или В.

Условные вероятности $P_{j, 0}^{\lambda'/\lambda}$ ($P_{j, 0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda}$) определяются соотношением $P_{j, 0}^{\lambda'/\lambda} = \langle c_j^\lambda c_0^\lambda \rangle = P_0^\lambda P_{j, 0}^{\lambda'/\lambda}$ ($P_{j, 0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda} = \langle c_j^{m_{\lambda'}} c_0^{m_\lambda} \rangle = P_0^{m_\lambda} P_{j, 0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda}$) и связаны с параметрами парных корреляций во взаимном расположении атомов (парных корреляций в ориентации локализованных магнитных моментов) первой координационной сферы, а именно, $\varepsilon_{j, 0}^{\text{BB}}$ ($\varepsilon_{j, 0}^{\mu_\lambda^+ \mu_\lambda^-}$), далее именуемыми параметрами ближнего атомного (магнитного) порядка ε_a (ε_m), соотношениями:

$$P_{j, 0}^{\lambda'/\lambda} = P_j^{\lambda'} \pm \frac{\varepsilon_{j, 0}^{\text{BB}}}{P_0^\lambda} \quad \left(P_{j, 0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda} = P_j^{m_{\lambda'}} \pm \frac{\varepsilon_{j, 0}^{\mu_\lambda^+ \mu_\lambda^-}}{P_0^{m_\lambda}} \right), \quad (15)$$

где знак «+» соответствует совпадению значений λ и λ' (совпадению знаков $m_{\lambda'}$ и m_λ), а знак «-» — их несовпадению.

В неупорядоченных сплавах величина локализованного магнитного момента m_λ зависит от равновесных значений параметров

ближнего атомного и магнитного порядков и наоборот. То есть все они определяются самосогласованно путем минимизации свободной энергии F (13) по указанным параметрам при фиксированных значениях энергий кулоновского взаимодействия U_0^λ , диагональных матричных элементов W_0^λ и средней электронной концентрации $\langle Z \rangle$.

В качестве объекта для численного исследования выбраны бинарные неупорядоченные сплавы на основе ОЦК-решетки с концентрацией компонентов $x^A = x^B = 0,5$. В работе выполнены расчеты для случая $T = 0$ К (при $\epsilon_a = 0$ и $U_0^A = U_0^B = U_0$) плотностей электронных состояний, равновесных значений свободной энергии, локализованных магнитных моментов и параметров ближнего магнитного упорядочения ϵ_m при различных значениях энергии кулоновского отталкивания электронов на одном узле U_0 , средней электронной концентрации $\langle Z \rangle$ и атомного потенциала рассеяния $W = W_0^B - W_0^A$ ($W_0^A = 0$). При этом энергия измерялась в единицах полуширины энергетической зоны чистого ОЦК-металла А $w = 8|h_{01}|$, а локализованные магнитные моменты — в магнетонах Бора μ_B .

На рисунке 1 представлены типичные зависимости свободной энергии сплава от параметра парных магнитных корреляций ϵ_m , а также приведены равновесные значения положительной проекции локализованных магнитных моментов на атомах обоих сортов μ_λ^+ ($\lambda = A, B$). Минимум свободной энергии F определяет равновесные значения ϵ_m . Показаны случаи, в которых исследуемый ОЦК-сплав оказывается в ферромагнитном и антиферромагнитном состояниях, а также в состоянии спинового стекла. При $W = -0,1$ и приведенных на графиках значениях параметров U_0 и $\langle Z \rangle$ минимум F при $\epsilon_m = 0,25$ определяет ферромагнитное состояние сплава (рис. 1, а), при $\epsilon_m = -0,25$ — антиферромагнитное состояние сплава (рис. 1, б), а при $\epsilon_m = 0$ — состояние спинового стекла (рис. 1, в).

На основании полученных равновесных значений ϵ_m и магнитных моментов m_λ на атоме сорта λ построены магнитные фазовые диаграммы сплавов для различных значений атомных потенциалов рассеяния (см. рис. 2). При этом считалось, что значениям $\epsilon_m = -0,25$ соответствует антиферромагнитное упорядочение (АФМ), а значениям $\epsilon_m = 0,25$ — ферромагнитное упорядочение (ФМ). При отличных от нуля значениях локализованных магнитных моментов на атомах и слабой корреляции в их ориентации реализуются состояния либо с неполным антиферромагнитным ($-0,25 < \epsilon_m < 0$), либо с неполным ферромагнитным ($0 < \epsilon_m < 0,25$) упорядочением. На магнитных фазовых диаграммах эти состояния образуют переходную область, разделенную пунктирной линией, которая соответствует состоянию спинового стекла (СС), для которого $\epsilon_m = 0$, при $m_\lambda \neq 0$. Парамагнитная фаза (П) характеризуется значениями лока-

лизованных магнитных моментов $m_\lambda = 0$.

Переход от одного ОЦК-сплава к другому (с другими параметрами U_0 и $\langle Z \rangle$) соответствует переходу от одной точки на магнитной фазовой диаграмме к другой. Магнитные состояния этих систем определяются по областям магнитной фазовой диаграммы, куда попадают параметры сплавов. При этом границы областей различных магнитных состояний проведены, исходя из представленных выше предельных для этих фаз значений параметра магнитного порядка ε_m и соответствующих значений локализованных магнитных моментов m_λ . В общем случае, разным точкам магнитных фазовых диаграмм соответствуют различные сплавы с отличающимися значениями потенциалов кулоновского отталкивания электронов на одном узле, разными значениями локализованных магнитных моментов на атомах, разными средними значениями электронной

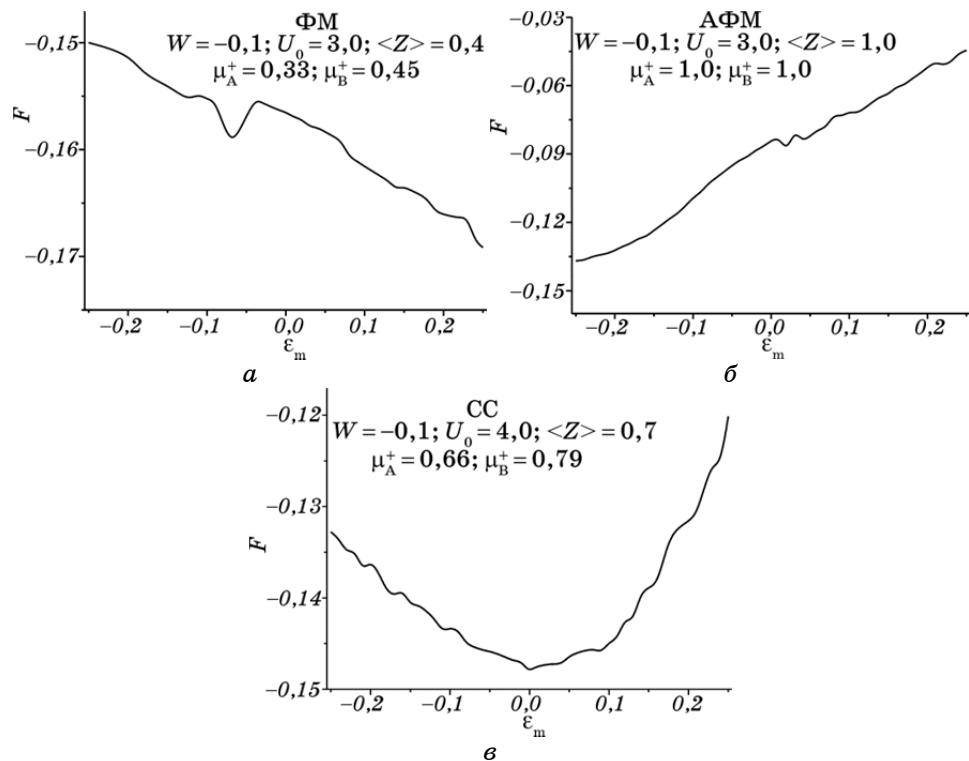


Рис. 1. Зависимость свободной энергии F сплавов от параметра парных магнитных корреляций ε_m при $W = -0,1$ для значений параметров U_0 и $\langle Z \rangle$, соответствующих ферромагнитному (а) и антиферромагнитному (б) состояниям, а также состоянию спинового стекла (в). Приведены также равновесные значения m_λ в точках минимума F .

концентрации и разными потенциалами атомного рассеяния. При этом каждый из этих сплавов рассматривается как однофазная система с той или иной степенью атомного и магнитного упорядочения, что задается соответствующими параметрами порядка.

Как видно из рисунка 2, *a*, магнитная фазовая диаграмма для значения потенциала атомного рассеяния $W = 0$ (однокомпонентная магнитная система) является симметричной относительно линии $\langle Z \rangle = 1$, соответствующей половинному заполнению зоны. Однако при отличных от 0 значениях W диаграмма становится несимметричной (рис. 2, *b*). При ненулевом значении атомного потенциала рассеяния W на магнитной фазовой диаграмме область с антиферромагнитным упорядочением увеличивается при $\langle Z \rangle < 1$ и уменьшается при $\langle Z \rangle > 1$. Следует отметить, что полученные результаты хорошо согласуются с результатами, полученными при использовании других теоретических подходов (см., например, [7, 15]).

Известно [14], что для сильно коррелированных систем, описываемых традиционной моделью Хаббарда (без учета различия атомных потенциалов компонентов, т.е. при $W = 0$) при $\langle Z \rangle = 1$ для ненулевых значений U_0 имеет место точный переход к гейзенберговскому антиферромагнетику (см. рис. 2). Особенностью полученных магнитных фазовых диаграмм сплавов, по сравнению со случаем $W = 0$, является существование минимального значения кулоновского потенциала U_0^{\min} , для которого наблюдается антиферромагнитное упорядочение вблизи $\langle Z \rangle = 1$, т.е. в сплавах может наблюдаться пороговый характер антиферромагнитного упорядочения. Так, для случая $W = -0,1$ и при наложенном выше условии на значения кулоновского потенциала компонентов сплава, при

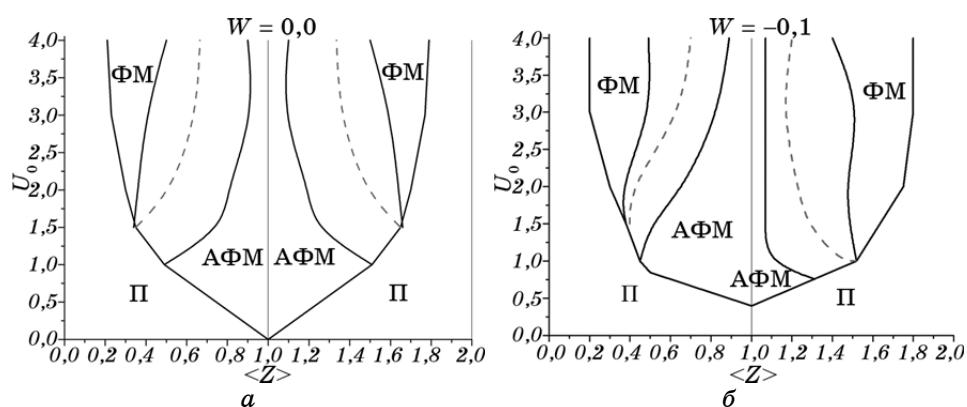


Рис. 2. Магнитные фазовые диаграммы сплавов для значений атомного потенциала рассеяния: $W = 0$ (*a*) и $W = -0,1$ (*b*).

малых значениях $U_0 (< U_0^{\min})$ и $\langle Z \rangle \approx 1$ сплав находится в парамагнитном состоянии с $m_\lambda = 0$. Расчеты показывают, что с ростом W значение U_0^{\min} увеличивается.

На рисунке 3 представлены плотности состояний однокомпонентного магнитного кристалла ($W = 0$) и магнитного бинарного сплава ($W = -0,1$) при $U_0 = 2$ и значениях $\langle Z \rangle$ симметричных относительно $\langle Z \rangle = 1$ (также указаны равновесные значения параметров парных магнитных корреляций и локализованных магнитных моментов). Из рисунка 3 видно, что причиной асимметрии магнитной фазовой диаграммы при отличных от 0 значениях W является изменение электронного спектра сплава. Следует отметить, что такое изменение происходит не столько из-за смещения парциальных плотностей состояний для компонентов сплава А и В, вызванного

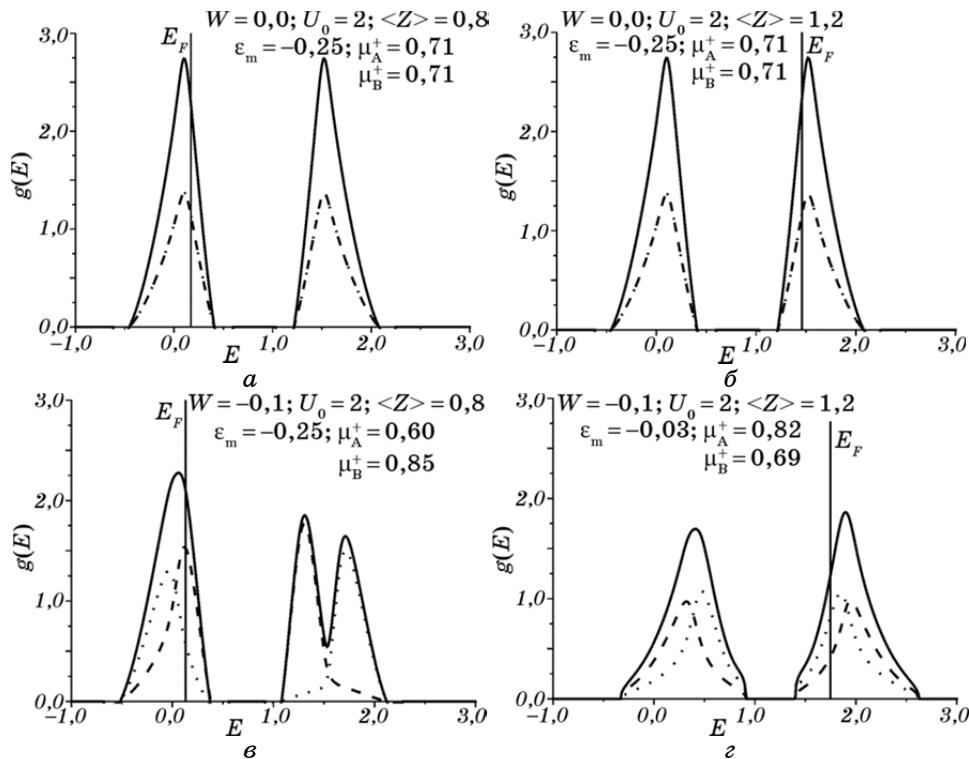


Рис. 3. Плотности электронных состояний (сплошная линия) для симметричных относительно $\langle Z \rangle = 1$ значений $\langle Z \rangle$ на магнитной фазовой диаграмме при $W = 0$ (а, б) и $W = -0,1$ (в, г). Штриховая линия представляет парциальный вклад компонента А сплава, а пунктирная — парциальный вклад компонента В.

различием их атомных потенциалов W_0^A и W_0^B , сколько в результате различного расщепления этих парциальных вкладов, связанного с отличием равновесных значений магнитных моментов на атомах разного сорта, т.е. связано со спецификой проявления сильных электронных корреляций в бинарных сплавах замещения.

4. ВЫВОДЫ

В работе предложен метод расчета электронной структуры и магнитных свойств сплавов, основанный на обобщении однозонной модели Хаббарда на случай двухкомпонентных сплавов замещения с различными атомными потенциалами компонентов. На основании рассчитанных равновесных значений параметров парных магнитных корреляций и магнитных моментов обоих компонентов сплава построена магнитная фазовая диаграмма атомноразупорядоченного ОЦК-сплава с ненулевым атомным потенциалом рассеяния. Установлено, что отличный от нуля атомный потенциал рассеяния приводит к нарушению симметрии магнитной фазовой диаграммы сплавов относительно соответствующего половинному заполнению значения электронной концентрации $\langle Z \rangle = 1$. Нарушение электрон-дырочной симметрии магнитной фазовой диаграммы сплавов в основном связано с различием равновесных значений магнитных моментов на атомах разного сорта. Установлено, что в исследованных модельных сплавах антиферромагнитное упорядочение имеет пороговый характер, т.е. для всех возможных значений $\langle Z \rangle$ антиферромагнитное состояние наблюдается лишь при значениях U_0 , превышающих определенную критическую величину U_0^{\min} .

В отличие от [2–4, 18–23], в настоящей работе впервые при построении магнитных фазовых диаграмм было одновременно учтено как электрон-электронное взаимодействие, так и различие между атомными потенциалами рассеяния двухкомпонентных систем, что позволяет прогнозировать магнитные свойства бинарных кристаллических сплавов замещения.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. E. Dagotto, *Science*, **309**: 257 (2005).
2. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **276**, No. 1365: 238 (1963).
3. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **277**, No. 1369: 237 (1964).
4. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **281**, No. 1386: 401 (1964).
5. D. Vollhardt, *Annalen der Physik*, **524**, Iss. 1: 1 (2012).
6. K. Byczuk, M. Ulmke, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 196403 (2003).
7. K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*, **69**: 045112 (2004).
8. P. Lombardo, R. Hayn, and G. I. Japaridze, *Phys. Rev. B*, **74**: 085116 (2006).

9. D. Semmler, K. Byczuk, and W. Hofstetter, *Phys. Rev. B*, **81**: 115111 (2010).
10. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем. Электронные свойства сплавов* (Киев: Наукова думка: 1995).
11. С. П. Репецкий, В. Б. Молодкин, И. Г. Вышиваная, Е. Г. Лень, И. Н. Мельник, О. И. Мусиенко, Б. В. Стащук, *Успехи физики металлов*, **10**, № 3: 283 (2009).
12. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B*, **58**: R7475 (1998).
13. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *Теоретическая и математическая физика*, **131**, № 3: 456 (2002).
14. Ю. А. Изюмов, *Успехи физических наук*, **165**, № 4: 403 (1995).
15. H. Fukuyama, *Phys. Rev. B*, **5**, No. 8: 2872 (1972).
16. E. G. Len, I. M. Melnyk, S. P. Repetsky, V. V. Lizunov, and V. A. Tatarenko, *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Materials Science and Engineering Technology)*, **42**, No. 1: 47 (2011).
17. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, Т. С. Лень, Е. Г. Лень, *Физ. мет. металловед.*, **93**, № 3: 9 (2002).
18. A. N. Andriotis, E. N. Economou, L. Qiming, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **47**, No. 15: 9208 (1993).
19. E. N. Economou, C. T. White, and R. R. DeMarco, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3946 (1978).
20. C. T. White and E. N. Economou, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3959 (1978).
21. R. R. DeMarco, E. N. Economou, and C. T. White, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3968 (1978).
22. A. N. Andriotis, P. N. Poulopoulos, and E. N. Economou, *Solid State Communications*, **39**: 1175 (1981).
23. A. N. Andriotis, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **5**, No. 26: 4505 (1993).

REFERENCES

1. E. Dagotto, *Science*, **309**: 257 (2005).
2. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **276**, No. 1365: 238 (1963).
3. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **277**, No. 1369: 237 (1964).
4. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **281**, No. 1386: 401 (1964).
5. D. Vollhardt, *Annalen der Physik*, **524**, Iss. 1: 1 (2012).
6. K. Byczuk, M. Ulmke, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 196403 (2003).
7. K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*, **69**: 045112 (2004).
8. P. Lombardo, R. Hayn, and G. I. Japaridze, *Phys. Rev. B*, **74**: 085116 (2006).
9. D. Semmler, K. Byczuk, and W. Hofstetter, *Phys. Rev. B*, **81**: 115111 (2010).
10. V. F. Los' and S. P. Repetsky, *Metody Teorii Neuporyadochenykh Sistem. Elektronnye Svoystva Splavov (Methods for Disordered Systems Theory. Electronic Properties of Alloys)* (Kiev: Naukova Dumka: 1995) (in Russian).
11. S. P. Repetsky, V. B. Molodkin, I. G. Vyshivanaya, E. G. Len, I. N. Melnyk, O. I. Musienko, and B. V. Stashchuk, *Uspehi Fiziki Metallov*, **10**, No. 3: 283 (2009) (in Russian).
12. M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B*, **58**: R7475 (1998).
13. S. P. Repetsky and T. D. Shatnij, *Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika*,

- 131, No. 3: 456 (2002) (in Russian).
- 14. Yu. A. Izyumov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **165**, No. 4: 403 (1995) (in Russian).
 - 15. H. Fukuyama, *Phys. Rev. B*, **5**, No. 8: 2872 (1972).
 - 16. E. G. Len, I. M. Melnyk, S. P. Repetsky, V. V. Lizunov, and V. A. Tatarenko, *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Materials Science and Engineering Technology)*, **42**, No. 1: 47 (2011).
 - 17. S. P. Repetsky, T. D. Shatnij, T. S. Len, and E. G. Len, *Fiz. Met. Metalloved.*, **93**, No. 3: 9 (2002) (in Russian).
 - 18. A. N. Andriotis, E. N. Economou, L. Qiming, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **47**, No. 15: 9208 (1993).
 - 19. E. N. Economou, C. T. White, and R. R. DeMarco, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3946 (1978).
 - 20. C. T. White and E. N. Economou, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3959 (1978).
 - 21. R. R. DeMarco, E. N. Economou, and C. T. White, *Phys. Rev. B*, **18**, No. 8: 3968 (1978).
 - 22. A. N. Andriotis, P. N. Poulopoulos, and E. N. Economou, *Solid State Communications*, **39**: 1175 (1981).
 - 23. A. N. Andriotis, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **5**, No. 26: 4505 (1993).