

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.20.Be, 71.27.+a, 71.28.+d, 71.55.Jv, 75.10.Lp, 75.30.Kz

Вплив далекого магнетного порядку на магнетну фазову діаграму в напівеліптичній моделі для атомно-розупорядкованих бінарних стопів заміщення

Є. Г. Лен^{*,**}, Т. Д. Шатній^{*}, В. В. Лізунов^{*}, Т. С. Лен^{***},
М. В. Ушаков^{*}

^{*}Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

^{**}Київський академічний університет НАН України та МОН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

^{***}Національний авіаційний університет,
просп. Любомира Гузара, 1,
03058 Київ, Україна

В рамках узагальненої однозонної моделі Хаббарда для бінарних стопів заміщення із сильними електронними кореляціями, що впорядковуються, встановлюється зв'язок між магнетною фазовою діаграмою (МФД) та особливостями електронної структури атомно-розупорядкованих стопів з врахуванням близького та далекого магнетних порядків. Проведено числові розрахунки за температури 0 К густини електронних станів, вільної енергії, магнетних моментів та параметрів кореляції у їхній орієнтації для атомно-розупорядкованих стопів у напівеліптичній моделі для початкової густини станів. Аналіз густини електронних станів показав, що

Corresponding author: Evgen Georgiyovych Len
E-mail: len@imp.kiev.ua

^{*}G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

^{**}Kyiv Academic University, N.A.S. of Ukraine and MES of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

^{***}National Aviation University,
1 Lyubomyr Huzar Ave., UA-03058 Kyiv, Ukraine

Citation: E. G. Len, T. D. Shatnii, V. V. Lizunov, T. S. Len, and M. V. Ushakov, Effect of Long-Range Magnetic Order on Magnetic Phase Diagram in the Semi-Elliptic Model for Atomically Disordered Substitutional Binary Alloys, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 8: 1005–1019 (2021) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.43.08.1005](https://doi.org/10.15407/mfint.43.08.1005).

напівеліптична модель цілком придатна для комплексного дослідження на якісному рівні взаємного впливу атомного і магнетного впорядкувань. Врахування далекого магнетного порядку загалом зберігає характер розподілу магнетних фаз на МФД, додаючи додаткові деталі в області антиферромагнетної фази. Показано, що антиферромагнетні стани з врахуванням впорядкування на далеких відстанях (з виділенням підґратниць) є енергетично більш вигідними за стани з антиферромагнетним упорядкуванням лише на близьких відстанях.

Ключові слова: атомно-розупорядковані стопи, сильні електрон-електронні кореляції, електронна структура, параметри близького і далекого магнетного впорядкувань, магнетна фазова діаграма.

Within the framework of the generalized one-band Hubbard model for ordered binary substitutional alloys with strong electron correlations, a connection between magnetic phase diagram (MPD) and the features of the electronic structure of atomically completely disordered alloys is established with taken into account the short- and long-range magnetic orders. Numerical calculations of the density of electronic states, free energy, magnetic moments, and correlation parameters in their orientation are carried out at temperature of 0 K for completely atomically disordered alloys in a semi-elliptic model for a seed density of states. As shown an analysis of the density of electronic states, the semi-elliptical model is quite suitable for a comprehensive study at a qualitative level of the mutual influence of atomic and magnetic orderings. The accounting of long-range magnetic order generally preserves the character of the distribution of magnetic phases on the MPD but supplements the last with additional details in the region of the antiferromagnetic phase. As shown, the antiferromagnetic states with taking into account the ordering at long distances (with a separation of the sublattices) are energetically more profitable than states with antiferromagnetic ordering at short distances only.

Key words: completely atomically disordered alloys, strong electronic correlations, electronic structure, parameters of short- and long-range magnetic orderings, magnetic phase diagram.

(Отримано 11 червня 2021 р.)

1. ВСТУП

Теоретичний опис магнетних стопів з врахуванням взаємного впливу їхніх атомної та магнетної підсистем досі залишається нерозв'язаною в повній мірі задачею. У цій області можна умовно виділити два типи теоретичних підходів. До першого типу відносять теорії, які в явному вигляді не враховують електронну структуру стопів (див., наприклад, [1]). В рамках таких підходів найбільш повний опис магнетного та атомного впорядкувань з врахуванням їхнього взаємного впливу в стопах надано в роботах [2–4]. До другого типу відносять підходи, які базуються на врахуванні впливу електронної структури та її перебудови через зміни типу та ступеня

атомного і магнетного упорядкувань. Побудова таких теоретичних моделей ускладнена необхідністю врахування багаточастинкових ефектів, зокрема, спричинених сильними електрон-електронними кореляціями [5, 6]. Сильні електронні кореляції роблять незастосовними прості уявлення як про повністю колективізовані електрони, так і про цілком локалізовані магнетні моменти. Для великої кількості найбільш технологічно цікавих сильнокорельованих матеріалів, зокрема, перехідних металів та стопів на їх основі, необхідно враховувати конкуренцію між процесами колективізації та локалізації електронних станів, а відтак, в явному вигляді враховувати зміни електронної структури за різних трансформацій системи.

Існують потужні першопринципні методи розрахунку електронної структури, у т.ч. систем з сильними електронними кореляціями (див., наприклад, [7]). Однак і найскладніші першопринципні, і найпростіші модельні розрахункові методи сьогодні здатні описати лише цілком атомно- та/або магнетно-упорядковані чи розупорядковані системи. Складності, що виникають з врахуванням проміжних ступеней упорядкованості, частково долають різні кластерні підходи до розгляду процесів розсіювання електронів в кристалах [8–10]. Проте системні дослідження одночасно магнетного та атомного упорядкувань в стопах з врахуванням перебудови енергетичного спектра електронів досі відсутні.

Великий обсяг розрахунків та відома [1], навіть без перебудови електронної структури, складність поведінки одночасно діючих атомного і магнетного упорядкувань спонукають до спрощення модельних розрахунків та до поступового руху від вже відомого до ще недослідженого. В даній роботі в рамках узагальненої однозонної моделі Хаббарда для стопів з сильними електронними кореляціями [11, 12], що впорядковуються, встановлюється зв'язок між магнетною фазовою діаграмою (МФД) та особливостями електронної структури атомно-розупорядкованих бінарних стопів заміщення з врахуванням можливості встановлення як близького, так і далекого магнетних порядків. Оскільки, на відміну від попередніх робіт [11, 12], в яких розрахунки проводили для вихідного реального закону дисперсії для чистого ОЦК-кристалу в моделі сильного зв'язку, в даній роботі використано напівеліптичну модель для початкової густини станів, яка не має особливостей Ван Хове, тому було додатково проаналізовано зміни енергетичного спектра електронів внаслідок варіації параметрів стопу та їх достатності для коректного відтворення розподілу фаз на МФД.

2. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Використовуваний підхід детально викладено в [11, 12]. У цих роботах побудовано та проаналізовано МФД атомно-розупорядкованих

ОЦК-стопів заміщення з певним потенціалом домішкового розсіювання W . В роботі [12] було також досліджено МФД за різних значень концентрації x компонента А стопу A_xB_{1-x} . Зазначимо, що, як і в даній роботі, МФД у випадку реального закону дисперсії було побудовано у координатах (U, n) за $T = 0$ К (статичне наближення), де U — параметр кулонівського відштовхування електронів з протилежними спінами на одному вузлі, n — середня електронна концентрація. Рівноважні значення параметра парних магнетних кореляцій ε_m в орієнтації магнетних моментів на сусідніх вузлах та значення самих магнетних моментів μ_λ^\pm , локалізованих на атомах сорту $\lambda = [A, B]$, визначались з умови мінімуму вільної енергії з врахуванням зміни електронної структури досліджуваного бінарного стопу у разі зміни його параметрів. Водночас не враховувались впливи магнетокристалічної анізотропії, магнетопружного ефекту та виграшу в магнетостатичній енергії через утворення та дезорієнтацію магнетних доменів. Тобто даний підхід передбачає розгляд впливу лише електронної структури на атомне і магнетне упорядкування, який може бути домінуючим для систем з сильними електрон-електронними кореляціями. На відміну від попередніх робіт додатково враховано можливість реалізації далекого магнетного порядку η_m , тому в даній роботі мова йде про стопи, що впорядковуються, хоча параметри близького (ε_a) і далекого (η_a) атомних порядків в нашому випадку дорівнюють нулю.

Зазначимо також, що за відсутності зовнішнього магнетного поля (як у нашому випадку) ймовірності знайти у розглядуваному вузлі ґратки магнетні моменти з різною орієнтацією ($m_\lambda = \mu_\lambda^\pm$) є однаковими, тобто $P_0^{\mu_\lambda^+} = P_0^{\mu_\lambda^-} = 0,5$ (за $\eta_m = 0$ також виконується рівність $\mu_\lambda^+ = -\mu_\lambda^-$). Отже, в рамках припущень даної роботи магнетні стопи за відсутності зовнішнього магнетного поля не будуть мати спонтанної намагнетченості. До цього через виділення за далекого магнетного впорядкування підґратниць двох типів (для ОЦК-кристалів), кожна з яких споріднена з проекцією магнетного моменту певного знаку, ймовірності знайти у вузлах цих підґратниць додатну проекцію магнетного моменту μ_λ^+ будуть залежати від параметра далекого магнетного порядку η_m наступним чином: $P_{i0}^{\mu_\lambda^+} = P_0^{\mu_\lambda^+} + (v_{II}/v)\eta_m$, для підґратниць I-го типу; $P_{i0}^{\mu_\lambda^+} = P_0^{\mu_\lambda^+} - (v_I/v)\eta_m$, для підґратниць II-го типу; $v_I + v_{II} = v$, v_I, v_{II} — числа підґратниць першого та другого типу відповідно (тут $v_I = v_{II} = 1$). Для від'ємної проекції локалізованого магнетного моменту μ_λ^- ймовірності визначають з умови $P_{i0}^{\mu_\lambda^+} + P_{i0}^{\mu_\lambda^-} = 1$. Отже, умовна ймовірність $P_{jl\ i0}^{m_{\lambda'}/m_\lambda} = P_{jl}^{m_{\lambda'}} \pm \varepsilon_{jl\ i0}^{\mu_{\lambda'}\mu_\lambda}/P_{i0}^{m_{\lambda'}}$ знайти у вузлі (jl) (перший індекс нумерує підґратницю, а другий — власне вузол на цій підґратниці) магнетний момент $m_{\lambda'}$ за умови, що у вузлі ($i0$) присутній магнетний момент m_λ (для того ж знаку спіна), пов'язана як з параметром парних кореляцій $\varepsilon_m = \varepsilon_{ji\ i0}^{\mu_{\lambda'}\mu_\lambda}$, так і через величини $P_{i0}^{\mu_\lambda^+}$ з параметром далекого порядку η_m , вона визначає внесок у функції Гріна розсіювання на кластерах з двох розсіювальних центрів.

Густина електронних станів та параметри магнетних станів стопів одержано у парному наближенні методу кластерного розкладу для одночастинкової функції Гріна [8, 9, 13] у напівеліптичній моделі. Енергію вимірюють в одиницях напівширини вихідної енергетичної зони, а локалізовані магнетні моменти — в магнетонах Бора μ_B . Усі розрахунки в роботі проведено за наступних параметрів атомної підсистеми: $W = -0,2$, $\varepsilon_a = 0$, $\eta_a = 0$ та концентрації компонент $P_0^A = P_0^B = 0,5$.

На рисунку 1 представлено енергетичні залежності густини електронних станів досліджуваних атомно-розупорядкованих бінарних стопів заміщення за $U = 2$ та різних значень n . Порівнюючи ці залежності з результатами робіт [11, 12], можна бачити, що в цілому відмінності в енергетичних розподілах електронів, які обумовлені наявністю особливостей Ван Хове за реального закону дисперсії та їх відсутністю в напівеліптичній моделі, хоч і призводять до різних типів упорядкування в певних діапазонах значень U і n , однак збігаються як багатство форм, необхідне для адекватної передачі фазових трансформацій системи, так і подібність загальних закономірностей. Це призводить до подібності МФД бінарних ОЦК-стопів заміщення, одержаних у цих двох моделях. Водночас у напівеліптичній моделі як МФД (рис. 2), так і відповідні енергетичні залежності електронної густини станів (рис. 1), є значно більш симетричними відносно значення середньої електронної концентрації, що відповідає половинному заповненню зони ($n = 1$). Додатково на рисунку 1 наведено рівноважні значення магнетних моментів μ_λ^+ на атомах різного сорту λ та параметрів магнетного порядку (ε_m, η_m), які визначають тип магнетного впорядкування, тобто область на МФД, в якій знаходиться стоп за певних значень U і n (рис. 2). Можна бачити (рис. 1), що для симетричних відносно половинного заповнення значень n параметри кореляцій в орієнтації локалізованих магнетних моментів та величини останніх (з врахуванням заміни А на В) фактично співпадають.

На відміну від попередніх робіт [11, 12], на МФД стопів, які магнетно упорядковуються, має місце наступна відповідність областей магнетного упорядкування та рівноважних значень параметрів парних кореляцій в орієнтації магнетних моментів на сусідніх вузлах. У випадку відмінних від нуля значеннях локалізованих магнетних моментів на розглядуваному вузлі ($m_\lambda \neq 0$) максимальному антиферромагнетному впорядкуванню (AFM) відповідає не лише значення $\varepsilon_m = -0,25$, а й $\eta_m = 1$. За меншої кореляції в орієнтації локалізованих магнетних моментів на сусідніх вузлах можуть реалізовуватися стани з неповним антиферромагнетним впорядкуванням (s-AFM) трьох типів: за типами близького ($-0,25 < \varepsilon_m < 0$) і далекого ($0 < \eta_m < 1$) порядків та їхньої певної комбінації (з обмеженнями на максимальні значення ε_m за $\eta_m \neq 0$, які випливають з виразів для ймовірнос-

тей, значення яких мають лежати в інтервалі $[0, 1]$). Значенню $\varepsilon_m = 0,25$ за $\eta_m = 0$ відповідає повне феромагнетне впорядкування (FM); стани з неповним феромагнетним впорядкуванням ($0 < \varepsilon_m < 0,25$ за $\eta_m = 0$; s-FM) утворюють перехідну область між FM і SG станами. Останній — це стан спінового скла (SG), для якого $\varepsilon_m \cong 0$ за $\eta_m = 0$ і $m_\lambda \neq 0$ і він на МФД умовно позначений однією пунктирною лінією. Парамагнетна фаза (P), як і раніше, характеризується просто відсутністю локалізованих магнетних моментів ($m_\lambda = 0$).

Рисунок 2 представляє також МФД атомно-розупорядкованого бінарного стопу заміщення, розраховану у напівеліптичній моделі за відсутності далекого магнетного порядку ($\eta_m = 0$). Цій МФД відповідає заміна штрих-пунктирної лінії повного далекого АФМ упорядкування ($\eta_m = 1$) штриховою лінією, яка відповідає повному близькому АФМ упорядкуванню ($\varepsilon_m = -0,25$). Решта областей для зазначених МФД співпадають.

Як можна бачити з рис. 3, в області АФМ рівноважні значення вільної енергії магнетно неупорядкованих ($\eta_m = 0$) систем, у т.ч. з максимальним близьким АФМ порядком ($\varepsilon_m = -0,25$), є більшими, ніж для систем, що магнетно упорядковуються ($\eta_m \neq 0$). Тобто виділення підґратниць за АФМ упорядкуванні є енергетично більш вигідним, ніж упорядкування лише на близьких відстанях. До того ж неповне далеке впорядкування ($0 < \eta_m < 1$ за $-0,25 < \varepsilon_m \leq 0$) спостерігається в області значень середньої електронної концентрації n , обмеженій лінією SG (див. рис. 2 і 3, а). Ця область є значно ширшою, ніж аналогічна область на МФД для магнетно неупорядкованих стопів, що обумовлено суттєво більш вузьким діапазоном значень n (в околі $n = 1$), в якому спостерігається повне далеке магнетне упорядкування, ніж у випадку повного близького упорядкування на відповідній МФД.

В цілому характер розподілу магнетних фаз на досліджуваних МФД зберігається той самий, що й на МФД для реального закону дисперсії. Це дозволяє використовувати напівеліптичну модель для подальшого комплексного дослідження на якісному рівні взаємного впливу атомного і магнетного впорядкувань з врахуванням внеску перебудови енергетичного спектра електронів в залежності від ступеней упорядкованості атомної та спінової підсистем.

Іншою відмінністю МФД у напівеліптичній моделі є відсутність точок перетину більшості ліній, які розмежовують різні магнетні фази (рис. 2). Водночас, як і у випадку реального закону дисперсії [11, 12], за обраних параметрів системи атомне розупорядкування пригнічує близьке магнетне упорядкування, що призводить до порогового характеру появи антиферомагнетного упорядкування (стан АФМ, який відповідає умові $\varepsilon_m = -0,25$, з'являється лише вище певного критичного значення кулонівського потенціалу, див. штрихову лінію на рис. 2).

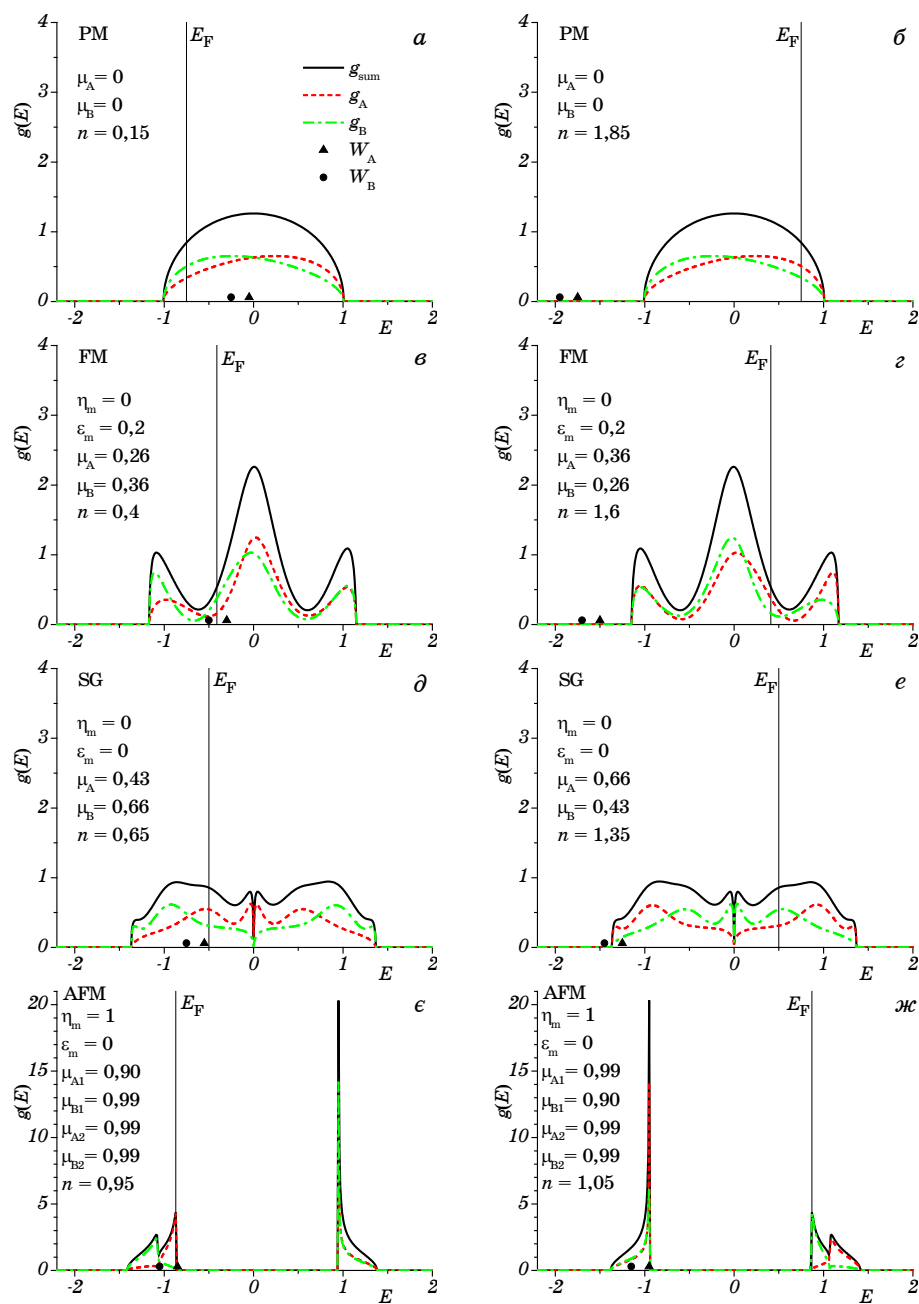


Рис. 1. Густина електронних станів бінарних атомно-розупорядкованих ОЦК-стопів заміщення для $U = 2$ та значень n , що симетричні відносно $n = 1$.

Fig. 1. Densities of electronic states of binary atomically disordered substitution b.c.c.-alloys for $U = 2$ and symmetric (relative to $n = 1$) values of n .

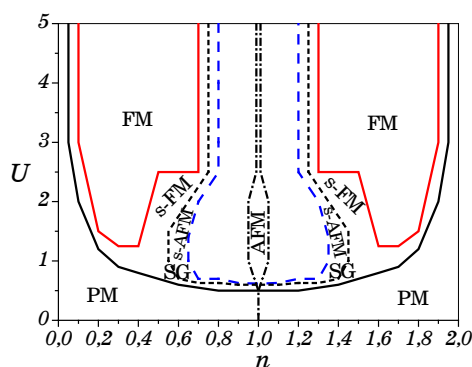


Рис. 2. Магнетні фазові діаграми бінарних атомно-розупорядкованих ОЦК-стопів заміщення у напівеліптичній моделі, розраховані за відсутності та наявності далекого магнетного порядку. Магнетно неупорядкованим ($\eta_m = 0$) стопам відповідає штрихова лінія повного близького AFM упорядкування ($\varepsilon_m = -0,25$); стопам, що магнетно упорядковуються ($\eta_m \neq 0$) відповідає штрих-пунктирна лінія повного далекого AFM упорядкування ($\eta_m = 1$). Решта границь областей на цих МФД збігаються. Потенціал домішкового розсіяння $W = -0,2$, концентрації компонентів стопів дорівнюють 0,5.

Fig. 2. Magnetic phase diagrams (MPDs) of substitution completely atomically disordered binary b.c.c.-alloys in a semi-elliptic model, calculated in the absence and presence of a long-range magnetic order. The dashed line corresponds to the completely short-range AFM ordering ($\varepsilon_m = -0.25$) for magnetically disordered alloys ($\eta_m = 0$); the dot-dashed line corresponds to the full long-range AFM ordering ($\eta_m = 1$) for magnetically ordered alloys ($\eta_m \neq 0$). The other boundaries of the regions on these MPDs coincide. The impurity scattering potential $W = -0.2$, the concentrations of the alloys components equal to 0.5.

У той же час, врахування далекого магнетного порядку знімає цей ефект — на МФД стопів, що магнетно упорядковуються, AFM стан з $\eta_m = 1$ поширюється й на значення $U \rightarrow 0$. Але, на відміну від МФД для однокомпонентної системи, де діапазон значень n поступово зменшується і прямує до 0 за $U \rightarrow 0$, у випадку далекого магнетного впорядкування AFM стан реалізується нижче критичного значення U лише за $n = 1$.

Це можна інтерпретувати, як тенденцію до пригнічення впливу атомного розупорядкування у стопах у разі встановлення далекого магнетного порядку. Водночас, як свідчать дані вставок на рис. 1, ϵ і μ , у разі встановлення AFM упорядкування за $n \neq 1$ величини магнетних моментів на різних сортах атомів і підґратницях є різними, що відображає суттєвий вплив атомного розупорядкування на розподіл спінової та зарядової густин по атомах різного сорту на різних підґратницях. У разі зменшення величини U до значень, менших за критичне, магнетні моменти стають рівними нулю і стоп переходить

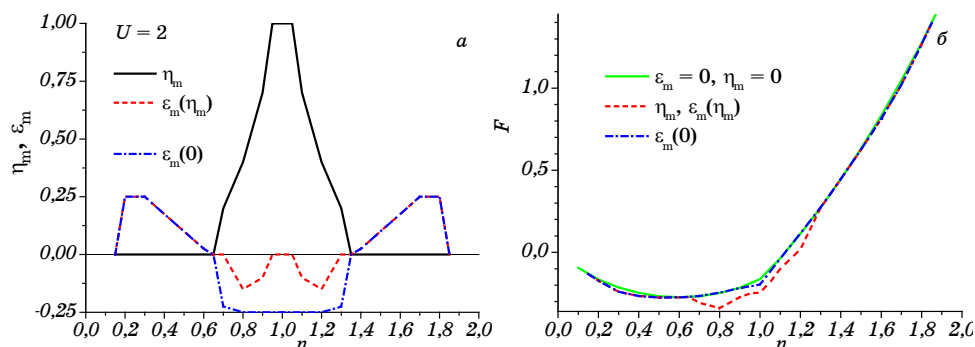


Рис. 3. Рівноважні значення параметрів магнетного впорядкування (а) та вільна енергія (в одиницях напівширини зони) (б) для бінарних атомно-розупорядкованих ОЦК-стопів заміщення з врахуванням одночасно далекого і близького магнетних порядків та лише близького порядку (на рис. б наведено також залежність $F(n)$ магнетно-розупорядкованого стопу — суцільна лінія).

Fig. 3. Equilibrium values of magnetic ordering parameters (a) and free energy (in units of zone's half-width) (b) for binary completely atomically disordered substitution b.c.c.-alloys with taking into account simultaneously long- and short-range magnetic orders and short-range magnetic order only (in Fig. б, for comparison, the dependence $F(n)$ of completely magnetically disordered alloys is also drawn by solid line).

до парамагнетного стану.

Значення $n = 1$ є особливим, оскільки за нього тенденція до електрон-діркової симетрії реалізується не на різних густинах станів за різних значень n , а на одній залежності $g(E)$. Еволюцію густини електронних станів та параметрів магнетної підсистеми стопу у випадку половинного заповнення зони та в залежності від величини U ілюструє рис. 4. Відразу зазначимо, що за усіх досліджених значень U реалізується АФМ стан з $\eta_m = 1$ та магнетними моментами, рівними 1, на усіх типах атомів та усіх підґратках стопу. Оскільки усі магнетні моменти є однаковими, це нівелює ефект впливу хаотичності атомної підсистеми на магнетну та поширює АФМ стан в область $U \rightarrow 0$, однак тільки за умови $n = 1$ та можливості встановлення (максимального) далекого магнетного порядку.

Зазначимо, що питання порушення електрон-діркової симетрії і відповідна асиметрія МФД відносно значення $n = 1$ атомно-розупорядкованих ОЦК-стопів заміщення стехіометричного складу залишається відкритим, оскільки розрахунки електронної структури з реальним законом дисперсії [11, 12] та у розглянутій у даній роботі напівеліптичній моделі дають різні результати: за реального закону дисперсії для значень n , симетричних відносно половинного заповнення зони, магнетні стани, як правило, не повторюються (на рівні

конкретних значень параметрів магнетного порядку), на відміну від напівеліптичної моделі (рис. 2), для якої має місце майже повна електрон-діркова симетрія МФД. Відомо, що в рамках іншого модельного підходу раніше вже спостерігався вплив особливостей Ван Хове, відсутніх у напівеліптичній моделі, на порушення електрон-діркової симетрії МФД [14].

Оскільки детальний аналіз електронної структури стопів з сильними електрон-електронними кореляціями у разі зміни магнетних фазових станів системи проведено вперше, то варто зауважити, що, на відміну від однокомпонентних сильнокорельованих систем, у стопах реалізуються механізми розсіювання електронів не лише на флуктуаціях зарядової та спінової густини, а й на флуктуаціях хімічного складу. Відтак для кожної компоненти стопу можна виділити її власний внесок у густину станів (див. парціальні внески компонент на рис. 1 і 4). Відповідні внески компонент зазнають кулонівського розщеплення в залежності від величини потенціалу U (в даній роботі для простоти він вважається однаковим для обох компонент стопу) та значень магнетних моментів на атомах різного сорту. Відстань між центрами хаббардівських зон є пропорційною добутку цих величин. Положення ж самих центрів хаббардівських зон $\varepsilon_{0s}^{\lambda m_\lambda} = W_0^\lambda + U_0^\lambda \bar{n}_{0-s}^{\lambda m_\lambda}$ визначаються добутками кулонівських потенціалів компонент ($U_0^\lambda = U$) і значень на даному вузлі середньої концентрації ($\bar{n}_{0-s}^{\lambda m_\lambda}$) електронів зі спіном s протилежного знаку відносно спіну електрона, чий рух розглядається, додатково ця величина залежить від сорту атому λ та проекції магнетного моменту m_λ на вузлі [9], а у випадку бінарного стопу до неї також додають відповідні атомні потенціали $W_0^\lambda = W_{A,B}$.

На рисунках 1 і 4 круглими та трикутними маркерами позначено положення атомних потенціалів компонент $W_{A,B}$ (різниця між якими є домішковим потенціалом розсіювання W , який в нашому випадку прийнятий рівним $-0,2$). Можна бачити, особливо для випадків $n > 1$, що характерні піки густини станів центровані не на самих потенціалах $W_{A,B}$, а на них з врахуванням зсуву за рахунок кулонівських доданків для кожної компоненти стопу. Чим більша електронна концентрація n (рис. 1) та/або кулонівський потенціал (рис. 4), тим більшим є цей зсув.

За малих (або близьких до 2) значень n електрони (дірки) фактично не відчують один(а) одного(у) і кореляційні ефекти, які призводили б до їх локалізації та/або утворення некомпенсованих магнетних моментів на розглядуваному вузлі, відсутні, тому хаббардівського розсування зон немає і ми маємо парамагнетний стан (див. перший рядок рис. 1). До того ж рівень Фермі лежить ліворуч (для дірок праворуч) від потенціалів розсіювання (з врахуванням кулонівських доданків). Далі повторювати усі міркування окремо для дірок не будемо, пославшись на наявність електрон-діркової симетрії.

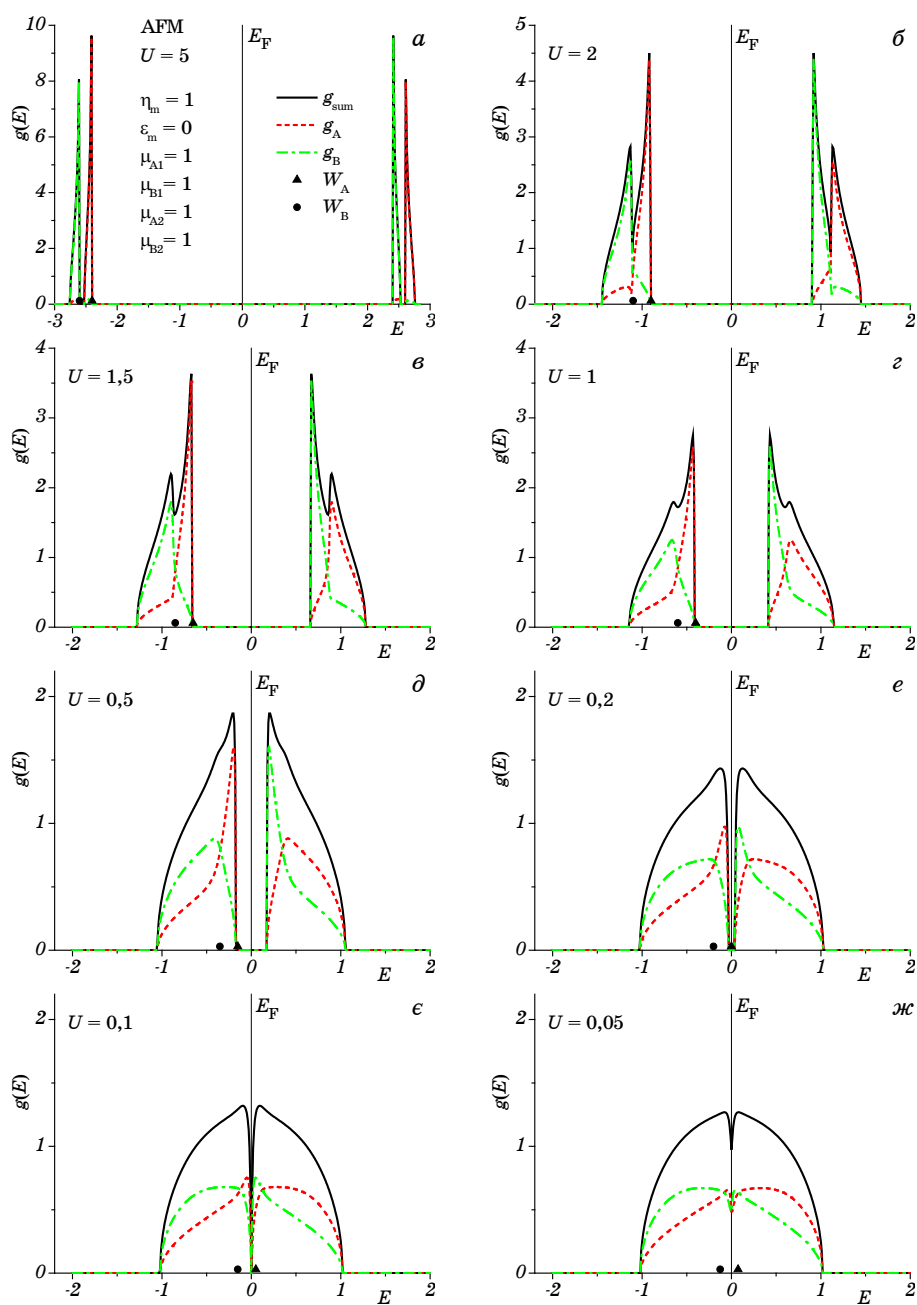


Рис. 4. Густина електронних станів досліджуваних стопів для $n = 1$ та різних значень U .

Fig. 4. Densities of electronic states of the investigated alloys for $n = 1$ and different values of U .

Як можна бачити з лівого стовпчика графіків на рис. 1, збільшення електронної концентрації n за фіксованих значень U призводить до зсуву рівня Фермі праворуч. Коли електронів стає достатньо, щоб енергетично вигідним стало блокування їх стрибків на вже зайняті іншими електронами вузли (на кожному такому вузлі, зайнятому двома електронами з протилежними спінами (однакові спіни забороняє принцип Паулі), до повної енергії системи додають енергію кулонівської взаємодії цих електронів), тоді електронам на сусідніх вузлах стає вигідно зорієнтувати свої спіни паралельно і цим збільшити ймовірність стрибків по ще вільних вузлах. Тобто система переходить у FM стан і в ній з'являються магнетні моменти через відповідний перерозподіл по кристалічних вузлах спінової густини. Водночас внесок розсіювання електронів на парах переважно однакових розсіюючих центрів (в даному випадку магнетних моментів одного знаку) є додатним на краях і у центрі енергетичного спектра, тому густина електронних станів феромагнетного стопу набуває характерної трипікової форми (другий рядок рис. 1).

З подальшим зростанням кількості електронів у системі стає все менше вільних вузлів і електронам на сусідніх вузлах з паралельними спінами стає все важче рухатися. Вони, з одного боку, локалізуються, а з іншого боку, маючи певну кінетичну енергію, вимушені орієнтуватися на сусідніх вузлах антипаралельно, щоб мати змогу рухатися по ґратниці без перевертання спіну. До цього з ростом n поступово зменшуються кореляції в їхній орієнтації феромагнетного типу, а ще далі наростають кореляції, характерні для антиферомагнетика (нижній рядок рис. 1), за певних значень n система проходить через стан з нульовим параметром кореляції в орієнтації вже достатньо великих за абсолютною величиною локалізованих магнетних моментів на сусідніх вузлах, тобто через стан спінового скла (передостанній рядок рис. 1).

Вже у разі наближення стопу до стану SG (зі збільшенням n) в енергетичному спектрі електронів починає формуватися енергетична квазіщілина. Водночас рівень Фермі зсувається праворуч відносно більшого зі значень атомних потенціалів (W_A) (рис. 1, δ – $ж$). Рівень Фермі потрапляє в область вже сформованої енергетичної щілини лише за значення $n = 1$ (рис. 4), коли встановлюється повне антиферомагнетне упорядкування з повною локалізацією електронів на своїх вузлах (стоп стає діелектриком). До цього саме на енергіях, близьких до атомних потенціалів, утворюються енергетичні щілини за $n = 1$ та великих значеннях U : спочатку лише на парціальних внесках компонент стопу (рис. 4, $б$), а потім і на сумарній густині станів (рис. 4, $а$).

Також звертає на себе увагу тенденція до утворення квазіщілини на рівні Фермі навіть за найменших досліджених значеннях U (рис. 4, $ж$) у разі встановлення максимального далекого антиферо-

магнетного порядку за половинного заповнення зони, хоча для з'ясування питання щодо ступеня локалізації електронів в цьому випадку слід розраховувати вже двочастинкову функцію Гріна (наприклад, електропровідність) стопу. Також видно, що за $n = 1$ кулонівська щілина починає закриватися, коли величина потенціалу U стає меншою за потенціал домішкового розсіяння W , а рівень Фермі зсувається ліворуч від більшого з атомних потенціалів (див. рис. 4, $e-j$).

3. ВИСНОВКИ

Отже, в рамках напівеліптичної моделі для вихідної густини електронних станів, яка не має особливостей Ван Хове, досліджено вплив далекого магнетного впорядкування на електронну структуру атомно-розупорядкованих бінарних ОЦК-стопів заміщення. Показано, що дана модель є цілком застосовною для детального якісного аналізу змін електронної структури та магнетних станів у разі зміни в широких межах параметрів досліджуваних стопів. На відміну від розрахунків з реальним законом дисперсії, у напівеліптичній моделі практично зберігається електрон-діркова симетрія і відповідна симетрія магнетних фазових діаграм як у випадку врахування лише близького, так і додатково далекого антиферромагнетного упорядкування. В цілому характер розподілу магнетних фаз на усіх вищезгаданих МФД зберігається.

Показано, що виділення підґратниць (тобто поява далекого порядку) за антиферромагнетного упорядкування є енергетично більш вигідним, ніж у разі антиферромагнетного упорядкування лише на близьких відстанях. Водночас за обраних параметрів системи атомне розупорядкування пригнічує близьке магнетне упорядкування, що призводить до порогового характеру появи антиферромагнетного упорядкування. Врахування ж далекого магнетного порядку знімає цей ефект і на МФД стопів, що магнетно упорядковуються, АФМ стан з максимальним далеким порядком поширюється й на значення кулонівського потенціалу $U \rightarrow 0$, але лише за значення середньої електронної концентрації $n = 1$. Це відображає тенденцію до пригнічення впливу атомного розупорядкування у стопах у разі встановлення далекого магнетного порядку завдяки реалізації електрон-діркової симетрії на одній енергетичній залежності густини електронних станів за половинного заповнення зони.

Перетин рівнем Фермі (зі збільшенням n) області атомних потенціалів призводить до суттєвих змін як форми енергетичного спектра електронів, так і магнетного стану системи. Водночас енергетична квазіщілина в енергетичному спектрі електронів починає формуватися у разі наближення стопу до стану SG, коли стають суттєвими ефекти локалізації електронів на вузлах кристалічної ґрат-

ниці, які досягають максимуму за $n = 1$ та можливості встановлення далекого магнетного порядку.

Роботу виконано в рамках Цільової програми фундаментальних досліджень НАН України «Перспективні фундаментальні дослідження та інноваційні розробки наноматеріалів і нанотехнологій для потреб промисловості, охорони здоров'я та сільського господарства» на 2020–2024 рр., проект № 22/20-Н. Третій співавтор також вдячний Національному фонду досліджень України (НФДУ) за грантову підтримку проекту «Регулювання розподілу атомів задля функціоналізації матеріалів на основі гібридної фази Fe_{16}N_2 -мартенситу, альтернативних постійним магнетам з рідкісноземельних інтерметалідів або пермендію» в рамках конкурсу НФДУ «Підтримка досліджень провідних та молодих вчених» (реєстраційний номер запиту 2020.02/0191).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. А. А. Смирнов, *Обобщенная теория упорядочивающихся сплавов* (Київ: Наукова думка: 1986).
2. Т. М. Радченко, В. А. Татаренко, *Успехи физ. мет.*, **9**, № 1: 1 (2008).
3. І. В. Вернигора, С. М. Бокоч, В. А. Татаренко, *Успехи физ. мет.*, **11**, № 3: 313 (2010).
4. S. M. Bokoch and V. A. Tatarenko, *Успехи физ. мет.*, **11**, № 4: 413 (2010).
5. Yu. A. Izyumov, *Phys. Usp.*, **38**: 385 (1995).
6. Yu. A. Izyumov and E. Z. Kurmaev, *Phys. Usp.*, **51**: 23 (2008).
7. Ю. А. Изюмов, В. И. Анисимов, *Электронная структура соединений с сильными корреляциями* (Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»: 2008).
8. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем* (Київ: Наукова думка: 1995).
9. S. P. Repetsky, V. A. Tatarenko, I. M. Melnyk, and E. G. Len, *Usp. Fiz. Met.*, **9**, No. 3: 259 (2008).
10. С. В. Николаев, Ю. С. Орлов, В. А. Дудников, *ЖЭТФ*, **158**, вып. 5 (11): 946 (2020).
11. В. В. Лизунов, Е. Г. Лень, И. Н. Мельник, Н. В. Ушаков, Т. С. Лень, В. А. Татаренко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**: 575 (2014).
12. В. В. Лизунов, Е. Г. Лень, Н. В. Ушаков, Т. С. Лень, В. А. Татаренко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**: 1405 (2015).
13. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *Теоретическая и математическая физика*, **131**: 832 (2002).
14. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *Phys. Rev. B*, **81**: 094407 (2010).

REFERENCES

1. A. A. Smirnov, *Obobshchennaya Teoriya Uporyadochivayushchikhsya Splavov*

- [Generalized Theory of Ordered Alloys] (Kiev: Naukova Dumka: 1986).
2. T. M. Radchenko and V. A. Tatarenko, *Usp. Fiz. Met.*, **9**, No. 1: 1 (2008).
3. I. V. Vernyhora, S. M. Bokoch, and V. A. Tatarenko, *Usp. Fiz. Met.*, **11**, No. 3: 313 (2010).
4. S. M. Bokoch and V. A. Tatarenko, *Usp. Fiz. Met.*, **11**, No. 4: 413 (2010).
5. Yu. A. Izyumov, *Phys. Usp.*, **38**: 385 (1995).
6. Yu. A. Izyumov and E. Z. Kurmaev, *Phys. Usp.*, **51**: 23 (2008).
7. Yu. A. Izyumov and V. I. Anisimov, *Elektronnaya Struktura Soyedineniy s Silnymi Korrelyatsiyami* [Electronic Structure of Compounds with Strong Correlations] (Moscow–Izhevsk: NITs ‘Regulyarnaya i Khaoticheskaya Dinamika’: 2008).
8. V. F. Los’ and S. P. Repetskiy, *Metody Teorii Neuporyadochennykh Sistem* [Methods of the Theory of Disordered Systems] (Kiev: Naukova Dumka: 1995).
9. S. P. Repetsky, V. A. Tatarenko, I. M. Melnyk, and E. G. Len, *Usp. Fiz. Met.*, **9**, No. 3: 259 (2008).
10. S. V. Nikolayev, Yu. S. Orlov, and V. A. Dudnikov, *ZhETF*, **158**, Iss. 5 (11): 946 (2020).
11. V. V. Lizunov, E. G. Len, I. M. Melnyk, M. V. Ushakov, T. S. Len, and V. A. Tatarenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**: 575 (2014).
12. V. V. Lizunov, E. G. Len, M. V. Ushakov, T. S. Len, and V. A. Tatarenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**: 1405 (2015).
13. S. P. Repetsky and T. D. Shatnii, *Theoretical and Mathematical Physics*, **131**: 832 (2002).
14. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *Phys. Rev. B*, **81**: 094407 (2010).