

ELECTRONIC STRUCTURE AND PROPERTIES

PACSnumbers: 05.30.Rt, 71.10.Fd, 71.20.Be, 71.23.-k, 71.27.+a, 71.28.+d, 75.10.Lp, 71.30.+h

Взаємний вплив близьких атомного і магнетного впорядкувань у бінарних стопах заміщення

Т. Д. Шатній*, Є. Г. Ленъ**, В. В. Лізунов*, Т. С. Ленъ***,
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

Методом когерентного потенціалу, що базується на кластерному розкладі для функції Гріна неупорядкованої системи, в рамках однозонної моделі Хаббарда досліджуються взаємоузгоджені атомне і магнетне близькі впорядкування у бінарних стопах заміщення з сильними електронними кореляціями при $T = 0$ К. В змінних U - n (потенціал кулонівського відштовхування–електронна концентрація) у напівеліптичній моделі для вихідної густини електронних станів побудовано магнетні (МФД) та атомні (АФД) фазові діаграми у випадку рівної концентрації компонент ОЦК-стопу. Встановлено, що за значень U , які перевищують значення для верхньої межі появи парамагнетної фази, в центральній частині МФД (в околі $n = 1$)

Corresponding author: Tetiana Dmytrivna Shatnii
E-mail: t.shatnii@gmail.com

*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: T. D. Shatnii, E. G. Len, V. V. Lizunov, T. S. Len, and M. V. Ushakov, Mutual Influence of Short-Range Atomic and Magnetic Orderings in Substitutional Binary Alloys, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 43, No. 9: 1269–1288 (2021) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.43.09.1269.

статичні флуктуації зарядової та спінової густин призводять до різниці у величинах електронних концентрацій та магнетних моментів на атомах різного сорту, що сприяє пригніченню атомного упорядкування (сприяє атомному розшаруванню). У парамагнетній області атомному впорядкуванню при віддаленні від $n = 1$ перешкоджає тільки збільшення різниці між значеннями концентрацій електронів на атомах різного сорту і спостерігається фазове розшарування згідно правил Юм-Розері. Магнетна підсистема стопу, як і у випадку однокомпонентних систем та цілком атомно-розупорядкованих стопів, зберігає тенденцію до реалізації антиферромагнетного впорядкування в центральній частині МФД (поблизу $n = 1$). Однак границі магнетних фаз зміщуються під впливом атомного впорядкування, порушуючи електрон-діркову симетрію МФД, характерну для однокомпонентних систем.

Ключові слова: атомно- і магнетно-невпорядковані стопи, сильні електрон-електронні кореляції, електронна структура, параметри атомного і магнетного близьких порядків, атомна і магнетна фазові діаграми.

The interconsistently atomic and magnetic short-range orderings in binary substitutional alloys with strong electron-electron correlations are investigated at $T = 0$ K by the coherent potential method based on cluster expansion for the Green's function of a disordered system in the framework of the one-band Hubbard model. The magnetic (MPD) and atomic (APD) phase diagrams in $U-n$ variables (potential of the Coulomb repulsion–electron concentration) in the semi-elliptic model for the initial density of electronic states are constructed in the case of equal concentrations of the b.c.c.-alloy components. As determined, at values of U , exceeding one for an upper bound of the paramagnetic phase appearance, in central part of MPD (near $n = 1$) the static fluctuations of the charge and spin densities lead to a difference in the values of electron concentrations and magnetic moments on atoms of different types, which contributes to suppression of the atomic order (promotes the atomic separation). In the paramagnetic region with moving away $n = 1$, the atomic ordering is suppressed due to an increasing of a difference between the values of the electron concentrations on atoms of various types only and phase separation is observed according to the Hume-Rothery rules. The magnetic subsystem of the alloy, as in the case of one-component systems and completely atomically disordered alloys, retains a tendency to realization of antiferromagnetic order in the central part of the MPD (near $n = 1$). However, the boundaries of the magnetic phases are shifted due to influence of atomic ordering, breaking the electron-hole symmetry of the MPD, which is characteristic of one-component systems.

Key words: atomically and magnetically disordered alloys, strong electron-electron correlations, electronic structure, parameters of atomic and magnetic short-range orders, atomic and magnetic phase diagrams.

(Отримано 23 червня 2021 р.)

1. ВСТУП

У стані термодинамічної рівноваги за низьких температур, коли

ентропія вже слабо впливає на властивості системи, на перший план виступає квантова природа речовини. За температури 0 К, недосяжної на експерименті, але теоретично допустимої, мають бути відсутні термодинамічні флуктуації, які б могли призвести до зміни стану системи і, відповідно, до фазових переходів. Однак можливість останніх зберігається за рахунок квантових флуктуацій за зміни інших (окрім температури) керуючих параметрів, наприклад, тиску, зовнішніх полів, зміни хімічного складу (електронної концентрації, кулонівської взаємодії електронів) тощо. Такі фазові переходи називають квантовими і вони відображають можливість для системи змінити її основний квантово-механічний стан (як правило змішаний) за рахунок зміни величини керуючого параметра [1, 2]. Квантові фазові переходи є неперервними, як і традиційні переходи II роду, за яких відсутні границі між конкуруючими фазами. До таких переходів відносяться як переходи типу магнетний порядок–магнетний безлад, що можуть відбуватися за рахунок зміни і керуючого параметра, і температури, так і переходи типу метал–діелектрик, що відбуваються лише за рахунок зміни керуючого параметра (температурно-незалежні). Нас будуть цікавити обидва типи таких переходів, за яких різкі зміни відбуваються не у функціях стану системи, а у певних параметрах порядку, що супроводжується зміною симетрії системи.

Взаємодія електронів суттєво ускладнює поведінку квантово-механічної системи багатьох частинок. Ефективна електрон-електронна взаємодія не лише змінює енергетичний розподіл електронів та основний стан системи, призводячи до зміни умов конкуренції між різними фазами в околах точок фазових переходів, а й визначає залежність характеристик системи від зовнішніх параметрів, тобто від керуючих параметрів. Можливість значних змін фізичних властивостей сильнокорельованих систем при малих змінах керуючих параметрів обумовлює великий практичний інтерес до таких матеріалів.

Важливо підкреслити, що у досліджуваних в даній роботі стопах з сильними електрон-електронними кореляціями не лише взаємодія між носіями заряду і спіну визначає фізичні властивості системи, а й ступінь локалізації електронних станів, обумовлений наявністю неупорядкованості як атомної, так і магнетної підсистем. Для повноцінного дослідження локалізації електронів слід розраховувати двочастинкові функції Гріна (ФГ), які визначають, наприклад, електропровідність системи. Однак й одночастинкові ФГ несуть у собі часткову інформацію щодо локалізації станів, якої цілком достатньо для опису магнетних фазових переходів. Тому ми звужимо загальну задачу дослідження квантових фазових переходів і розглянемо поведінку лише одночастинкової функції Гріна, яка визначає розподіл електронів за енергіями та вільну енергію системи з врахуванням як сильної взаємодії між електронами, так і різ-

них варіантів і ступенів атомного і магнетного порядків (останнє є можливим завдяки використанню кластерного розкладу для ФГ). Оскільки загальна теорія квантових фазових переходів аналізує поведінку системи лише в околі точки фазового переходу і не дає інформації щодо розподілу фаз в залежності від усього спектру значень керуючих параметрів, власне який нас і цікавить, ми будемо досліджувати вплив перебудови енергетичного спектру електронів за зміни таких керуючих параметрів, як електронна концентрація, кулонівська взаємодія між електронами на одному вузлі та ступінь впорядкованості атомної підсистеми бінарного стопу заміщення, на магнетне упорядкування, а саме, на величини магнетних моментів на атомах різного сорту та параметри кореляції в орієнтації цих моментів на сусідніх вузлах, які й визначають тип та ступінь впорядкованості магнетних фаз. При цьому питання поведінки системи в околі точок фазових переходів залишаться поза нашого розгляду. Для розв'язання поставленої задачі буде використано узагальнену на випадок стопів модель Хаббарда [3, 4] та метод когерентного потенціалу з розкладанням ФГ за внесками від розсіювання електронів на кластерах з різною кількістю розсіюючих центрів [5, 6]. Розрахунки, для простоти, буде виконано в однозонному наближенні з врахуванням у розкладі ФГ лише розсіювання на парах та з використанням напівеліптичної моделі для вихідної густини станів, яка якісно відтворює магнетну фазову діаграму ОЦК-стопів заміщення з сильними електронними кореляціями [7].

Зауважимо, що з точки зору квантових фазових переходів параметр атомного упорядкування є зовнішнім керуючим параметром, який може впливати на магнетне упорядкування. Однак не можна нехтувати й впливом магнетного упорядкування на атомне [6, 8, 9], оскільки ще в процесі наближення до 0 К система з тим чи іншим типом магнетного упорядкування має змогу переходити між різними рівноважними станами атомної підсистеми за рахунок термодинамічних флуктуацій. Крім того, за певних умов (коли амплітуда нульових коливань атомів стає порівняною з періодом ґратниці) за 0 К також є можливим рух атомів завдяки квантовим ефектам делокалізації дефектів (утворенню дефектонів, у випадку вакансій — вакансіонів) та флуктуаціям складу (утворенню флуктуонів, зокрема фазонів) без втрати періодичності ґратниці. Такі колективні ефекти можуть призводити, наприклад, до локального фазового розшарування в кристалічній системі з домішками [10]. Взагалі, екстраполяція на низькі температури даних фазових діаграм одно і двокомпонентних систем, в яких можливі фазові переходи як I, так і II роду, є складною задачею, розв'язок якої часто супроводжується помилками, викликаними, наприклад, неврахуванням третього закону термодинаміки [11]. При цьому питання врахування квантових фазових переходів взагалі не піднімається. В даній роботі вперше проводиться дослідження взаємного впливу близьких

атомного та магнетного впорядкувань та їх спільного впливу на електронні і магнетні характеристики бінарних стопів заміщення з сильними електронними кореляціями (СЕК) з безпосереднім врахуванням перебудови енергетичного спектру електронів за температури 0 К. Додаткове врахування далеких атомного і магнетного порядків може збагатити картину взаємочину атомної і магнетної підсистем [7] і буде наступним кроком досліджень. Нами також чисельно досліджуються зміни магнетних і атомних фазових діаграм бінарних стопів заміщення за одночасного визначення рівноважних параметрів атомного і магнетного впорядкувань в порівнянні з аналогічними діаграмами для стопів у нерівноважних станах повного як атомного, так і магнетного розупорядкування.

2. ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

В узагальненій моделі Хаббарда для стопів з сильними електронними кореляціями багатоелектронний гамільтоніан неупорядкованої системи можна представити у вигляді [3, 6]:

$$H = \sum_{n,s} W_n \mathbf{a}_{ns}^+ \mathbf{a}_{ns} + \sum_{n,n' \neq n,s} h_{n,n'} \mathbf{a}_{ns}^+ \mathbf{a}_{n's} + \sum_{n,s,s' \neq s} U_n \mathbf{n}_{ns} \mathbf{n}_{ns'}, \quad (1)$$

де \mathbf{a}_{ns}^+ , \mathbf{a}_{ns} — оператори народження та знищення електрону в стані, який описується узагальненим вектором Ван'є $|ns\rangle$, n — номер вузла кристалічної ґратниці, $s = \pm 1/2$ — проекція спіну електрону на вісь z , $\mathbf{n}_{ns} = \mathbf{a}_{ns}^+ \mathbf{a}_{ns}$ — оператор кількості електронів у стані $|ns\rangle$, W_n — діагональний за індексами вузлів матричний елемент одноелектронного гамільтоніану, що випадково приймає значення W_n^A або W_n^B в залежності від того, який атом (А чи В) знаходиться у вузлі n , $h_{n,n'}$ — недіагональний матричний елемент гамільтоніану (інтеграл перескоку), який вважається відмінним від 0 лише для найближчих сусідів (перша координаційна сфера навколо обраного вузла n) та однаковим для них усіх ($h_{n,n'} = h_{01}$), U_n — описує енергію кулонівського відштовхування електронів з протилежними спінами на одному вузлі. Кулонівське відштовхування електронів на сусідніх вузлах не враховується.

Перехід до одноелектронного гамільтоніану системи з сильними електронними кореляціями в наближенні корельованого випадкового поля [12] має вигляд:

$$H = \sum_s H_s, \quad (2)$$

$$H_s = \sum_n |ns\rangle W_{ns} \langle ns| + \sum_{n,n' \neq n} |ns\rangle h_{n,n'} \langle n's|,$$

де

$$W_{ns} = W_n + U_n \sum_{s' \neq s} \langle \mathbf{n}_{ns'} \rangle, \quad (3)$$

$\langle \mathbf{n}_{ns'} \rangle$ — усереднене значення числа електронів у вузлі n зі спіном, протилежним спіну електрона, рух якого розглядається. Ця величина залежить від сорту атома у вузлі n .

Як вже зазначалося, числові дослідження базуються на методі когерентного потенціалу з врахуванням двочастинкового розсіювання в T -матриці повної функції Гріна неупорядкованого стопу з сильними електронними кореляціями [5, 6]. Тому для визначення усереднених величин потрібно також враховувати парні атомні і магнетні кореляції в ймовірностях розташування атомів і локалізованих магнетних моментів на сусідніх вузлах ґратниці.

Повна густина електронних станів на один атом дорівнює (через тотожність вузлів ґратниці далі розглядатимемо 0-й вузол):

$$g(E) = \sum_{\lambda, m_\lambda, s} P_0^{\lambda, m_\lambda} g_{0s}^{\lambda, m_\lambda}(E). \quad (4)$$

де P_0^{λ, m_λ} — ймовірність знайти у вузлі (0) атом сорту λ з проекцією локалізованого магнетного моменту m_λ , $g_{0s}^{\lambda, m_\lambda}(E)$ — умовна парціальна густина електронних станів, яка визначається за формулою

$$g_{0s}^{\lambda, m_\lambda}(E) = \mp \pi^{-1} \text{Im} \langle G_{00}^s(E^\pm) \rangle \Big|_{(0)=\lambda, m_\lambda}. \quad (5)$$

Тут $G_{00}^s(E^\pm)$ — діагональний матричний елемент одночастинкової функції Гріна стопу (для електронів зі спіном s), а усереднення проводиться за умови, що у вузлі (0) знаходиться атом сорту λ з проекцією локалізованого магнетного моменту m_λ .

Число електронів зі спіном s на вузлі (0) за умови, що на цьому вузлі знаходиться атом сорту λ з проекцією магнетного моменту m_λ :

$$n_{0s}^{\lambda, m_\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E') g_{0s}^{\lambda, m_\lambda}(E') dE', \quad (6)$$

де $f(E)$ — функція розподілу Фермі, яка за 0 К лише обмежує інтегрування енергією Фермі.

Можна записати наступні співвідношення для магнетних моментів і чисел електронів на вузлі (0):

$$n_0^{\lambda, m_\lambda} = n_{0s}^{\lambda, m_\lambda} + n_{0-s}^{\lambda, m_\lambda}, \quad m_\lambda \equiv m_0^\lambda = n_{0s}^{\lambda, m_\lambda} - n_{0-s}^{\lambda, m_\lambda}. \quad (7)$$

Середня концентрація електронів n на атом дається виразом, що з врахуванням (6) визначає енергію Фермі E_F :

$$n = \sum_{\lambda, m_\lambda, s} P_0^{\lambda, m_\lambda} n_{0s}^{\lambda, m_\lambda}. \quad (8)$$

Ймовірності знаходження певних атомів і локалізованих магнетних моментів на сусідніх парах вузлів, що потрібні для визначення внесків у функцію Гріна розсіювання на кластерах з двох розсіюючих центрів, обиралися у вигляді добутку незалежних ймовірностей для атомної і магнетної підсистем:

$$P_{0,n'}^{\lambda,m_\lambda,\lambda',m_{\lambda'}} = P_{0,n'}^{\lambda,\lambda'} P_{0,n'}^{m_\lambda,m_{\lambda'}}. \quad (9)$$

Аналогічне припущення зроблено й щодо ймовірностей заповнення одного (0-го) вузла атомами і магнетними моментами певних сортів (λ та m_λ): $P_0^{\lambda,m_\lambda} = P_0^\lambda P_0^{m_\lambda}$.

Введені в (9) ймовірності для атомної ($P_{0,n'}^{\lambda,\lambda'}$) і магнетної ($P_{0,n'}^{m_\lambda,m_{\lambda'}}$) підсистем пов'язані відповідно з параметрами атомних ε_a і магнетних ε_m кореляцій (які визначаються [3, 4] через умовні ймовірності заповнення сусідніх вузлів атомами одного сорту і однакової орієнтації магнетними моментами відповідно):

$$\begin{cases} P_{0,n'}^{\lambda,\lambda'} = P_0^\lambda P_{n'}^{\lambda'} + \varepsilon_a (\delta_{A_0,\lambda_0} - \delta_{B_0,\lambda_n}) (\delta_{A_{n'},\lambda_{n'}} - \delta_{B_{n'},\lambda_{n'}}) \\ P_{0,n'}^{m_\lambda,m_{\lambda'}} = P_0^{m_\lambda} P_{n'}^{m_{\lambda'}} + \varepsilon_m (\delta_{m_\lambda^A,m_0^\lambda} - \delta_{m_\lambda^B,m_0^\lambda}) (\delta_{m_{\lambda'}^A,m_{\lambda'}^\lambda} - \delta_{m_{\lambda'}^B,m_{\lambda'}^\lambda}) \end{cases}, \quad (10)$$

де $\delta_{a,b}$ — символ Кронекера, P_0^λ дорівнює концентрації компоненти λ стопу. За відсутності магнетного поля ймовірності знайти на обраному вузлі (0) різні за знаком проекції локалізованих магнетних моментів $m_\lambda = \mu_\lambda^\pm$ є однаковими і дорівнюють $P_0^{\mu_\lambda^\pm} = P_0^{\mu_\lambda} = 0,5$, тому спонтанна намагніченість буде відсутня.

Вільна енергія стопу за температури 0 К визначається виразом:

$$F = - \sum_{\lambda,m_\lambda} U_0^\lambda P_0^{\lambda,m_\lambda} [(n_0^{\lambda,m_\lambda})^2 - (m_0^\lambda)^2]/4 + \int_{-\infty}^{\infty} f(E') g(E') E' dE'. \quad (11)$$

Рівноважні значення параметрів близьких магнетного ε_m та атомного ε_a впорядкувань визначаються з умови мінімуму вільної енергії за цими параметрами (при фіксованих значеннях енергії кулонівської взаємодії U_0^λ , діагональних матричних елементів W_0^λ та середньої електронної концентрації n на атом). При цьому взаємоузгоджений розрахунок параметрів атомного і магнетного впорядкувань враховує зміну за рахунок зміни кожного з них положення рівня Фермі в енергетичному спектрі електронів, перерозподілу зарядової та спінової густин на атомах (в статичному наближенні) та перебудову електронної структури завдяки зміні діагонального матричного елементу W_{0s} (3) гамільтоніану (2) в одноелектронному наближенні.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

В роботі на базі узагальненої однозонної моделі Хаббарда проведено

дослідження за температури 0 К взаємного впливу магнетного та атомного впорядкувань бінарного стопу заміщення A_xB_{1-x} стехіометричного складу ($x = P_0^A = P_0^B = 0,5$) в залежності від кулонівського потенціалу відштовхування електронів з протилежними спінами на одному вузлі $U = U_0^A = U_0^B$ (однакового для атомів різного сорту) та середньої електронної концентрації n (на атом). Числові розрахунки проведено в напівеліптичній моделі для вихідної густини станів компонентів стопу. Потенціал домішкового розсіяння $W = W_0^B - W_0^A$ обрано рівним $-0,2$. Енергія вимірюється в одиницях напівширини вихідної енергетичної зони стопу, а локалізовані магнетні моменти — у магнетонах Бора μ_B . Рівноважні значення магнетних моментів μ_λ^\pm на атомах сорту $\lambda = [A, B]$ та параметрів порядку $\varepsilon_m, \varepsilon_a$ знаходяться з умови мінімуму вільної енергії (11).

Представлені на рис. 1 і 2 у координатах $U-n$ магнетні (МФД) і атомні (АФД) фазові діаграми розраховано з врахуванням магнетного та/або атомного впорядкувань. Принцип побудови фазових діаграм детально викладено в [3, 4]. У цих роботах з використанням реального закону дисперсії було побудовано та проаналізовано МФД атомно-розупорядкованих ОЦК-стопів заміщення з певним потенціалом домішкового розсіяння W . Для таких систем в роботі [4] було також досліджено МФД за різних значень концентрації x компонента А стопу A_xB_{1-x} .

Області на МФД (рис. 1 та 2, а, б) виділено за наступними прави-

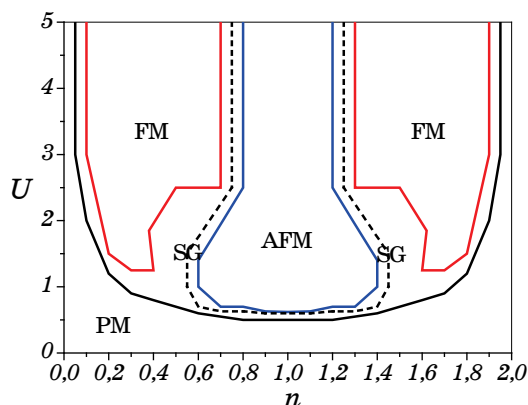


Рис. 1. Магнетна фазова діаграма (МФД) у змінних $U-n$ цілком атомно-розупорядкованих ($\varepsilon_a = 0$) нерівноважних бінарних стопів заміщення, розрахована у напівеліптичній моделі. Потенціал домішкового розсіяння $W = -0,2$; концентрації компонентів стопів дорівнюють 0,5.

Fig. 1. Magnetic phase diagram (MPD) of a completely atomically disordered ($\varepsilon_a = 0$) nonequilibrium substitutional binary alloys in the semi-elliptic model. The impurity scattering potential $W = -0.2$; the concentrations of the alloys components equal to 0.5.

лами: за умови $m \neq 0$ значенню $\epsilon_m = -0,25$ відповідає повне антиферомагнетне (AFM), а $\epsilon_m = 0,25$ — повне феромагнетне (FM) впорядкування; за менших кореляцій в орієнтації магнетних моментів на сусідніх вузлах реалізуються стани або з неповним антиферомагнетним (s-AFM) ($-0,25 < \epsilon_m < 0$), або з неповним феромагнетним (s-FM) ($0 < \epsilon_m < 0,25$) впорядкуванням, які утворюють перехідні області між AFM і FM, що розділені пунктирною лінією, яка відповідає стану спінового скла (SG) ($\epsilon_m = 0$ при $m \neq 0$); парамагнетна фаза (PM) характеризується значеннями $m = 0$.

Аналогічно на діаграмах атомного впорядкування (атомних фазових діаграмах — АФД) (рис. 2, в, г) використовуються позначен-

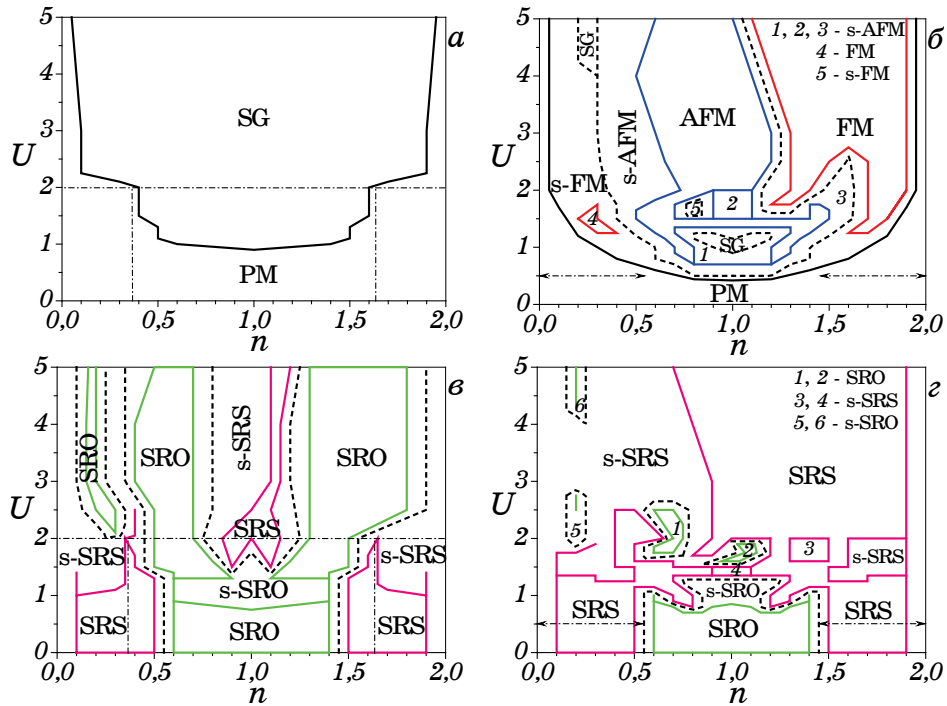


Рис. 2. Магнетні фазові діаграми для цілком магнетно-непорядкованого ($\epsilon_m = 0$) нерівноважного ступу (а) та ступу з рівноважними значеннями параметрів атомного (ϵ_a) і магнетного (ϵ_m) близьких порядків (б); в, г — атомні фазові діаграми (АФД) бінарних ступів заміщення з СЕК, що відповідають МФД, наведеним на рис. а і б. Інші параметри як на рис. 1.

Fig. 2. MPDs for magnetically completely disordered ($\epsilon_m = 0$) nonequilibrium alloys (a) and alloys with equilibrium values of parameters of atomic (ϵ_a) and magnetic (ϵ_m) short-range orders (b); в, г—atomic phase diagrams (APDs) of substitutional binary alloys with strong electron correlations (SECs) corresponding to the above MPDs on Figs. a and б. The other parameters as in Fig. 1.

ня: для повних близьких атомних упорядкування і розшарування — SRO ($\epsilon_a = -0,25$) і SRS ($\epsilon_a = 0,25$) відповідно; для областей з неповними атомними упорядкуванням і розшаруванням — s-SRO і s-SRS відповідно; пунктирна лінія відповідає границі розмежування цих фаз ($\epsilon_a = 0$) — атомно-розупорядкованим стопам (Dis.).

МФД у напівеліптичній моделі для атомно-розупорядкованих стопів (рис. 1) якісно узгоджується з МФД [3, 4] за реального закону дисперсії електронів в аналогічних стопах, але зі значно меншими порушеннями електрон-діркової симетрії. При цьому зберігається пороговий характер антиферромагнетного упорядкування для атомно-розупорядкованих стопів, який зникає при врахуванні далекого магнетного порядку [7]. В даній роботі ми обмежимося магнетним і атомним впорядкуванням лише на близьких відстанях. Врахування далекого атомного і магнетного порядків суттєво ускладнює розрахунки і буде виконано окремо. Воно може, як у [7], дещо змінити не лише кількісні показники магнетного і атомного упорядкування стопів при зміні керуючих параметрів (U , n) за температури 0 K , а й якісну картину розподілу магнетних та атомних фаз упорядкування, особливо в області малих значень U та $n \cong 1$.

Значно більшу асиметрію (відносно $n = 1$) демонструє АФД магнетно-розупорядкованого стопу (рис. 2, *в*). Перехід до рівноважних значень одночасно обох параметрів порядку (ϵ_a , ϵ_m) призводить до суттєвої перебудови електронної структури стопу (рис. 3) та зміни його магнетних властивостей (рис. 4) й самого характеру магнетного і атомного впорядкувань (рис. 2, *б*, *г*). Так, за більш-менш симетричних розподілів спінової (рис. 4, *е*) та зарядової (рис. 4, *з*) густин на атомах різного сорту спостерігається значне порушення електрон-діркової симетрії через відмінність параметрів атомного і магнетного порядків (рис. 4, *в*) по різні сторони від $n = 1$, що й відбивається на асиметрії МФД (рис. 2, *б*) відносно половинного заповнення зони.

Оскільки порушення цієї симетрії в першу чергу проявляється на АФД як нерівноважних магнетно-розупорядкованих стопів (рис. 2, *в*), так і стопів з рівноважними магнетним і атомним упорядкуваннями (рис. 2, *г*), то причиною розбіжності у магнетних властивостях бінарних стопів заміщення з превалюванням внесків від електронного та діркового типу носіїв заряду є саме атомна підсистема.

Відмінності у властивостях стопів по різні сторони від лінії $n = 1$ пов'язані з різними парціальними внесками компонент А і В у густину станів (порівн. рис. 3, *г-е* та *и-к*) та в середню концентрацію електронів на атомах різного сорту (рис. 4, *з*), а також з положенням рівня Фермі в енергетичному спектрі електронів та особливостями самого спектру (рис. 3). Саме електронна структура таких стопів визначає різні значення величин їхніх магнетних моментів на атомах А і В (рис. 4, *е*) та різні значення параметрів кореляції в

орієнтації цих моментів (рис. 2 та 4, *в*).

При цьому не можна виключати й можливого впливу на асиметрію фазових діаграм стопів (рис. 2), що можуть упорядковуватися за типом близького атомного та/або магнетного упорядкування, точності розрахунків, оскільки, як вже зазначалося, застосований метод не призначений для розгляду близьких околіть ліній розмежування фаз на АФД і МФД (в цих областях, окрім неврахування динамічних квантових осциляцій спінової і зарядової густин, починають відчуватися й обмеження використовуваних нами методу

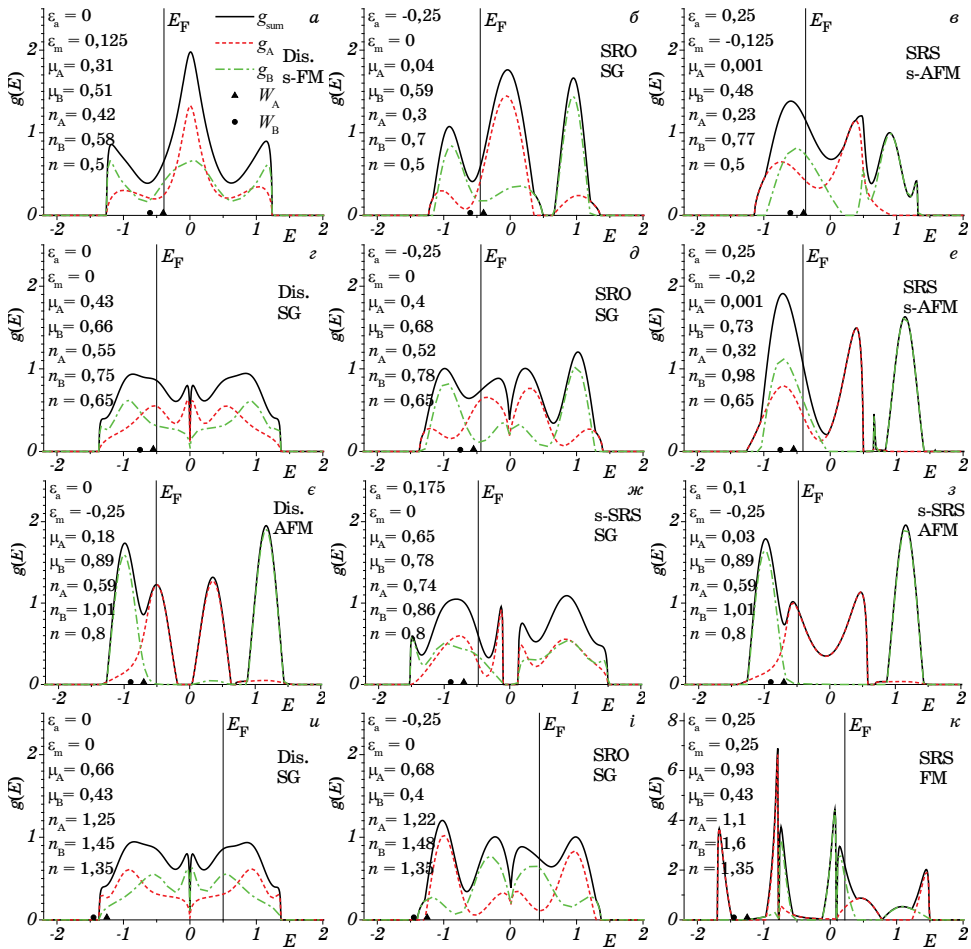


Рис. 3. Густини електронних станів для стопів ($W = -0.2, U = 2$): з $\epsilon_a = 0$ (*a, z, e, u*), з $\epsilon_m = 0$ (*б, д, ж, і*), з рівноважними значеннями ϵ_a і ϵ_m (*в, е, з, к*).

Fig. 3. Densities of electronic states for alloys ($W = -0.2, U = 2$): with $\epsilon_a = 0$ (*a, z, e, u*), with $\epsilon_m = 0$ (*б, д, ж, і*), with equilibrium values of both ϵ_a and ϵ_m (*в, е, з, к*).

когерентного потенціалу та його кластерного узагальнення).

У бінарних стопах заміщення з обмеженою розчинністю компонент або нестехіометричним складом мало б за 0 К спостерігатися атомне розшарування, і лише для стехіометричних складів та за умови відсутності обмежень на розчинність компонент може стати рівноважною однорідна атомно-упорядкована фаза [11]. Отже, атомне упорядкування за низьких температур має бути чутливим до порушення умов Юм-Розері утворення твердих розчинів заміщення, у т.ч. за рахунок перерозподілу по різних компонентах стопу зарядової та спінової густин. Характер такого перерозподілу визначається як домішковим потенціалом розсіяння, так і СЕК, які відповідають, зокрема, за тип магнетного упорядкування.

Ми розглядаємо лише ОЦК-стопи і вважатимемо, що обмежилися тими з них, обидва компоненти яких у чистому вигляді мають ОЦК-ґратницю. Тоді для розглядуваних систем перше правило Юм-Розері автоматично виконуватиметься. Також нами не враховується можлива різниця у розмірах атомів, які утворюють стоп заміщення, як і обумовлена нею енергія пружної деформації ґратниці. Отже, ми обмежуємо розгляд стопами, для яких різниця в атомних радіусах компонент не впливає суттєво на їх властивості. Такі стопи задовольняють другому правилу Юм-Розері. Існує велика кількість бінарних стопів, у т.ч. з СЕК, які задовольняють вищенаведеним умовам й здатність яких утворювати тверді розчини переважно обумовлена останніми двома правилами Юм-Розері (про більшу розчинність за близьких значень валентності та електронегативності компонент стопу) [14, 15]. При цьому змінна валентність перехідних металів у таких стопах та залежність їх стабільності від концентрації зонних електронів починаючи з ранішніх робіт [14] пояснювалися домінуючим внеском електронної структури у їх властивості. Останні дослідження цього питання [15] дали пояснення особливостей зв'язку атомної та електронної структур багатьох класів таких речовин, включаючи фази Лавеса (хоч вони і мають різні розміри утворюючих їх атомів), на основі першопринципних розрахунків електронної структури та аналізу процесів формування в околі рівня Фермі (квазі)щілин в енергетичних спектрах електронів завдяки процесам розсіяння останніх на границях зон Бріллюена.

Як відомо [15], утворення квазіщілини на рівні Фермі сприяє стабілізації відповідної фази завдяки перерозподілу електронів з найбільшою кінетичною енергією в більш глибокі стани. Було підраховано, що утворення псевдощілини на рівні Фермі шириною 0,5–1 еВ і висотою 0,2–0,6 від густини станів вільних електронів може знизити енергію електронів розглядуваної системи на 30–50 ккал/моль порівняно з енергією вільних електронів. Проте, оцінка вигаду в енергії за рахунок утворення псевдощілини на рівні Фермі в кожній реальній системі є складним завданням, оскільки ніхто не знає, які фа-

зи насправді конкурують з фазою, яку ми розглядаємо. При цьому у роботі [15] фактично обґрунтовується теза, що для розглядуваних систем формування псевдощільни на рівні Фермі є цілком достатнім для стабілізації відповідної фази.

Зазначимо, що псевдощільни на рівні Фермі може сформуватися двома способами: по-перше, внаслідок гібридизації станів різних атомів, які складають стоп, по-друге, в результаті інтерференції зонних електронів (з енергіями в околі енергії Фермі) на деяких системах площин кристалічної ґратниці, яким відповідають точки дотику поверхні Фермі до граней однієї з зон Бріллюена. Саме останній варіант утворення квазіщільни уможливорює пояснення залежності структурних станів стопів від електронної концентрації (правила

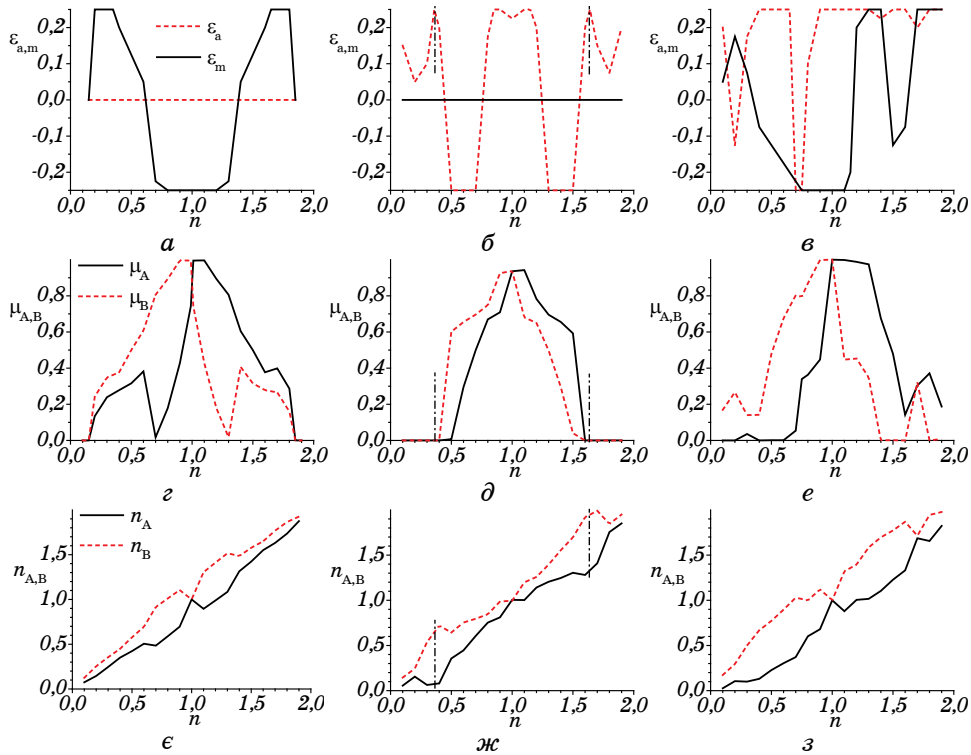


Рис. 4. Зміна параметрів ϵ_a та ϵ_m (а-в), значень магнетних моментів (г-е) та електронних концентрацій (є-з) на атомах різного сорту в залежності від n для стопів ($U = 2$): з $\epsilon_a = 0$ (а, г, є), з $\epsilon_m = 0$ (б, д, ж), з рівноважними значеннями ϵ_a і ϵ_m (в, е, з).

Fig. 4. Dependences of parameters ϵ_a and ϵ_m (a–в), values of magnetic moments (г–е) and electron concentrations (є–з) at atoms of different types on n ($U = 2$): with $\epsilon_a = 0$ (а, г, є), with $\epsilon_m = 0$ (б, д, ж), with equilibrium values of both ϵ_a and ϵ_m (в, е, з).

концентрацій Юм-Розері).

В рамках даної роботи ми також розглядаємо стопи, властивості яких переважно визначаються їх електронною структурою. Але, на відміну від роботи [15], ми розглядаємо стопи не у цілком атомно-упорядкованому стані за відсутності магнетного упорядкування, а за рівноважних значень близького атомного і магнетного порядків та відповідних розподілах зарядової та спінової густин на атомах різного сорту (рис. 4). Це уможливило, наприклад, утворення квазіщільн на повній та/або парціальних густинах станів (рис. 3) за рахунок як атомного, так і магнетного упорядкування. Це забезпечує конкуренцію різних фаз на АФД і МФД більш складним способом — через взаємний вплив атомного і магнетного порядків.

Виходячи з діаграм на рис. 2, можна зробити висновок, що як за нерівноважного магнетно-розупорядкованого стану (*a*, *e*), так і за рівноважних умов (*б*, *г*) найбільш сприятливим для атомного близького упорядкування стопу стехіометричного складу є парамагнетний стан його спінової підсистеми поблизу половинного заповнення зони. За малих значень U нульові магнетні моменти на обох компонентах стопу залишають останній в найбільш однорідному стані. При цьому близькі значення електронної концентрації на атомах різного сорту (рис. 5) свідчать про більш-менш однорідний розподіл у стопі й зарядової густини.

В обох випадках, представлених на рис. 2, з віддаленням по електронній концентрації від половинного заповнення та за відносно малих значень U , що залишають систему парамагнетною, зростає різниця між кількостями електронів на атомах різного сорту (див., наприклад, штрих-пунктирні лінії на рис. 2, *a*, *e* та рис. 4, *б*, *д*, *ж*, які відмічають значення n , що відповідають максимальній вищезгаданій різниці при $U=2$, а також відповідні діапазони n для $U=0,5$, позначені горизонтальними стрілочками на рис. 2, *б*, *г* та рис. 5, *б*), а відтак зростає й неоднорідність стопу. Таким чином, саме неоднорідність розподілу зарядової густини по атомах різного сорту обумовлює (як і має бути за правилами Юм-Розері) атомне розшарування в парамагнетному стопі при 0 К.

За штучно нав'язаної системі хаотичної орієнтації відмінних від нуля магнетних моментів на атомах різного сорту ($\epsilon_m = 0$, рис. 2, *e*) атомне упорядкування стопу у переважно нерівноважному стані спінового скла (за великих значень U) є вигідним лише за умови віддалення від лінії $n = 1$ — в область, де магнетні моменти на атомах обох сортів є відносно малими (рис. 4, *д*) і ефекти хаотизації спінової підсистеми не сильно впливають на атомне упорядкування; відмінності в розподілах зарядової густини по атомах різного сорту також є відносно малими (рис. 4, *ж*). При наближенні до половинного заповнення зони різниця між концентраціями електронів на атомах різного сорту зменшується (рис. 4, *ж*), а величина

магнетних моментів зростає (рис. 4, *д*) разом з ефектами хаотизації у спіновій підсистемі, що призводить до енергетичної вигідності розшарування в атомній підсистемі. Отже, порушення розчинності компонент стопу стехіометричного складу при 0 К є можливим за рахунок неоднорідності в розподілі як зарядової, так і спінової густин по атомах різного сорту.

Зазначимо схожість розподілів різних типів упорядкувань на АФД магнетно-розупорядкованого (рис. 2, *в*) і МФД атомно-розупорядкованого (рис. 1) стопів, що є наслідком подібності опису магнетної і атомної підсистем в рамках використовуваного нами варіанту зведення багаточастинкової моделі Хаббарда до одночастинкової задачі способом [12], дещо схожим на стопну аналогію [13].

Мінімізація вільної енергії (11) стопів одночасно за обома параметрами близького порядку (ϵ_a та ϵ_m) найбільш суттєво змінює АФД рівноважних стопів (рис. 2, *з*) порівняно з розглянутими вище нерівноважними варіантами магнетно- ($\epsilon_m = 0$, рис. 2, *в*) та атомно-розупорядкованих ($\epsilon_a = 0$, рис. 1) стопів (в останньому випадку АФД не наведено через її тривіальність — на усій площині $U-n$ наявний лише атомно-розупорядкований стан, на відміну від цього випадку, МФД (рис. 2, *а*) магнетно-розупорядкованого стопу є значно багатшою через наявність, окрім фази спінового скла, ще й парамагнетної фази). Зазначимо, що найменших змін зазнає область АФД (рис. 2, *з*), яка відповідає на МФД (рис. 2, *б*) області парамагнетної фази, а найбільших змін — область великих значень U , де майже скрізь рівноважним стає атомне розшарування, спричинене зростанням (при збільшенні U) за рахунок кореляційних ефектів в електронній підсистемі ролі статичних спінових і зарядових флуктуацій, які й призводять до порушення однорідності оточення будь-якого обраного атому, а від-

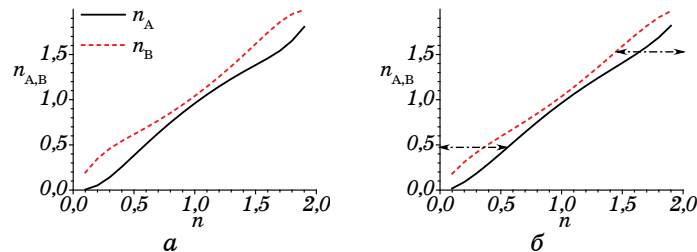


Рис. 5. Залежності електронних концентрацій на атомах різного сорту від n для стопів з парамагнетної області МФД на рис. 2, *б* при $U = 0$ (*а*) та $U = 0,5$ (*б*).

Fig. 5. Dependences of electron concentrations at atoms of different types on n for alloys from paramagnetic region on MPD in Fig. 2, *б* at $U = 0$ (*а*) and $U = 0,5$ (*б*).

так порушують тонку умову необмеженої розчинності компонент стопу при 0 К.

Не дивлячись на вищерозглянуті значні зміни на АФД (рис. 2, *з*), основні тенденції магнетного впорядкування рівноважного по обом параметрам порядку стопу (рис. 2, *б*) залишаються подібними до МФД атомно-розупорядкованого стопу (рис. 1). Так, за значень U , більших певного критичного значення (що відповідає границі з парамагнетиком), в центральній частині МФД на рис. 2, *б* спостерігається переважно антиферомагнетне впорядкування, а ближче до країв (по n) — феромагнетне. При цьому лінії розмежування з парамагнетиком на рис. 2, *а* і *б* схожі лише в самих загальних рисах. Наприклад, зберігається пороговий характер встановлення антиферомагнетного порядку в околі $n = 1$, але навіть критичне значення U є більшим приблизно у 2 рази у випадку магнетно-розупорядкованого стопу (рис. 2, *а*). Останнє підтверджує зв'язок цього ефекту з конкуренцією між атомним і магнетним упорядкуваннями. В даному випадку атомний близький порядок пригнічує магнетне близьке упорядкування (нагадаємо, що врахування далекого магнетного порядку призводить до зникнення цього ефекту [7]). Також з порівняння рис. 1 і 2, *б* можна бачити, що порушення електрондіркової симетрії у випадку рівноважного за обома параметрами порядку стопу проявляється у суттєвому розширенні області феромагнетного упорядкування за значень електронної концентрації $n > 1$ та у домінуванні антиферомагнетного упорядкування за значень $n \leq 1$, за яких майже зникає повне FM упорядкування. Спостерігається також поява двох широких областей спінового скла (SG): одна знаходиться в середині s-AFM фази в околі $n \cong 1$ і $U \cong 1$, а друга виникає посеред s-FM фази за великих значень кулонівського потенціалу ($U > 4$) при $n \cong 0,2$. В обох випадках цей ефект супроводжується появою на АФД (рис. 2, *з*) за тих самих значень U і n областей з неповним близьким атомним упорядкуванням (s-SRO).

Наявні відмінності в розподілі фаз на вищерозглянутих АФД та МФД стопів з СЕК пояснюються взаємним впливом атомного і магнетного впорядкувань. Можливість такого взаємочину обумовлена залежністю енергії кулонівської взаємодії електронів на одному вузлі від електронної концентрації не лише через положення рівня Фермі в енергетичному спектрі, а й через значно більш суттєву перебудову цього спектру у випадку встановлення того чи іншого ступеня атомного та/або магнетного порядків, а також за рахунок відмінності від 0 та між собою значень магнетних моментів на атомах різного сорту. Добуток магнетного моменту на атомі певного сорту на величину U визначає ступінь розсування по енергії хаббардівських підзон на парціальному внеску в густину електронних станів від відповідного компонента стопу. При цьому, як випливає з рис. 3, штучне послаблення кореляційних ефектів в орієнтації маг-

нетних моментів за рахунок умови $\epsilon_m = 0$ (друга колонка графіків на рис. 3) не робить вплив перебудови енергетичного спектру електронів у випадку магнетно-розупорядкованих стопів менш суттєвим, ніж у випадках атомно-розупорядкованих стопів (перша колонка графіків на рис. 3) та стопів з обома (атомним і магнетним) рівноважними значеннями параметрів порядку (третья колонка графіків на рис. 3), оскільки в усіх цих випадках залишається суттєвим вплив на енергетичний розподіл електронів їх розсіяння на магнетних моментах атомів (навіть хаотично орієнтованих), що й призводить до перебудови електронної структури, зокрема, до кулонівського розсування підзон та утворення енергетичних квазіщілин на парціальних та повній густині станів. Іншою причиною утворення квазіщілин в магнетних стопах може бути атомне упорядкування. Зазначимо, що провали на густині станів, які виникають при близькому атомному та/або магнетному упорядкуванні, перетворюються на повноцінні енергетичні щілини лише при встановленні далекого порядку, коли відбувається зміна об'єму зони Бріллюена.

Отже, через електронну структуру величини магнетних моментів на атомах різного сорту та кореляції в їх орієнтації на сусідніх вузлах залежать як від внутрішніх (концентрація компонент та хімічний склад стопу, середня концентрація електронів, тип кристалічної ґратниці та ступінь упорядкованості атомів, які її заповнюють), так і від зовнішніх (тиск, магнетне поле, в загальному випадку й температура) керівних параметрів, зміна яких обумовлює можливість квантових фазових переходів між різними основними станами стопу навіть при $T \rightarrow 0$ К. Вплив електронної структури на атомне і магнетне впорядкування є домінуючим для систем з сильними електрон-електронними кореляціями. Саме такі системи є вкрай важливими для сучасних технологій через високу чутливість їх фізичних властивостей до найменших змін внутрішніх та/або зовнішніх керуючих параметрів.

Запропонований в даній роботі підхід до самоузгодженого врахування атомних і магнетних кореляцій дозволяє досліджувати перебудову електронної структури, прогнозувати тенденції зміни атомного і магнетного стану стопів та визначати різні електронні і магнетні властивості систем з сильними електронними кореляціями. За необхідності даний метод дозволяє враховувати для функції Гріна розсіяння на кластерах з більшим числом центрів розсіяння та узагальнити параметри атомного і магнетного впорядкування на випадок врахування відповідних кореляцій на необхідній кількості координаційних сфер, а також на випадок далекого атомного і магнетного упорядкування. Одержані результати уможливають не лише числове дослідження впливу недосконалостей будови атомної і магнетної підсистем стопів з СЕК, пов'язаних з різним ступенем їх впорядкованості, а й інтерпретацію відповідних експе-

риментальних результатів, у т.ч. одержаних в рамках таких методів визначення розподілів електронів за імпульсами та/або енергіями, як спектроскопія анігіляції позитронів та фотоелектронна спектроскопія з кутовим розділенням.

4. ВИСНОВКИ

Використаний в роботі підхід дозволив дослідити при $T \rightarrow 0$ К взаємний вплив магнетного й атомного упорядкувань та їх вплив на структуру і магнетні властивості бінарних стопів заміщення з СЕК в залежності від змін кулонівського потенціалу відштовхування електронів на одному вузлі та середньої електронної концентрації.

В рамках запропонованого в роботі підходу вперше побудовано як МФД стопів, так і їх АФД, які дають уявлення про розподіли фаз у площині керуючих параметрів $U-n$ магнетного і атомного упорядкувань відповідно. Показано, що в цілому характер розподілу магнетних фаз на одержаних в рамках даної і попередніх [3, 4, 7] робіт МФД зберігається. Проте, на відміну від розрахунків з врахуванням далекого магнетного порядку для атомно-роупорядкованих стопів [7], стопи з рівноважними і нерівноважними параметрами атомного і магнетного близьких порядків за обраних параметрів у напівеліптичній моделі, як і за реального закону дисперсії [3, 4], проявляють пороговий характер появи антиферромагнетного упорядкування в околі $n = 1$, що відображає тенденцію до пригнічення за малих значень U атомним порядком близького магнетного упорядкування. У порівнянні з нерівноважними випадками цілком атомно- і цілком магнетно-розупорядкованих стопів, у випадку бінарного стопу заміщення при одночасному врахуванні рівноважних значень обох (атомного і магнетного) параметрів порядку найменших змін АФД зазнає в околі парамагнетної фази, де є мінімальним вплив ефектів електронних кореляцій. При цьому за більших значень U на АФД для рівноважних станів атомної і магнетної підсистем стопів можна бачити значне пригнічення близького атомного упорядкування (SRO) під впливом магнетного впорядкування з переважанням тенденції до атомного розшарування (SRS). Оскільки у процесі наближення до 0 К бінарний стоп заміщення може залишитися упорядкованим лише за умови наявності необмеженої розчинності його компонент та стехіометричного складу (тобто за цілковитої однорідності утворюваної інтерметалідної фази), то можна зробити висновок, що за певних значень U і n різні величини середніх електронних концентрацій і магнетних моментів на атомах різного сорту та деякий ступінь хаотизації в орієнтації останніх на сусідніх вузлах, порушуючи однорідність стопу, зменшують взаємну розчинність його компонент, що й призводять до розшарування стопу на окремі фази А і В. При цьому за інших значень U і n на АФД спо-

стерігається близьке упорядкування бінарного стопу, що можна розцінювати як тенденцію до реалізації необмеженої розчинності компонент стопу та утворення однорідного інтерметаліду АВ (за встановлення далекого атомного порядку).

Встановлено, що для самоузгоджених рівноважних значень параметрів атомного і магнетного близьких порядків електрон-діркова симетрія і відповідна симетрія магнетної фазової діаграми не зберігаються. При цьому для значень U , більших за критичні, та за значень $n \leq 1$ перевагу має антиферромагнетне упорядкування, а за значень $n > 1$ — ферромагнетне.

Найвні відмінності в розподілах фаз на досліджуваних АФД і МФД пояснюються залежністю енергії кулонівської взаємодії електронів на одному вузлі від електронної концентрації не лише через положення рівня Фермі в енергетичному спектрі електронів, а й через значно більш суттєву перебудову цього спектру при атомному упорядкуванні стопу, а також завдяки внеску у перебудову спектру як величини U , так і величин магнетних моментів і кореляцій в їх орієнтації на сусідніх вузлах. До того ж магнетні моменти, як і середні значення електронної концентрації у певному вузлі, здебільшого є різними для атомів різного сорту. Усе це впливає на локальне оточення обраного атома та ступінь однорідності можливих областей упорядкованості навколо нього, а відтак й на схильність до реалізації або атомного упорядкування, або розшарування.

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 № 22/21-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 пермендюру» в рамках конкурсу НФДУ «Підтримка досліджень провідних та молодих вчених» (реєстраційний номер запиту 2020.02/0191).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. S. M. Stishov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **174**: 853 (2004) (in Russian).
2. V. F. Gantmakher and V. T. Dolgoplov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **178**: 3 (2008) (in Russian).
3. 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) (in Russian).
4. V. V. Lizunov, E. G. Len, M. V. Ushakov, T. S. Len, and V. A. Tatarenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**: 1405 (2015) (in Russian).

5. S. P. Repetsky and T. D. Shatnii, *Theoretical and Mathematical Physics*, **131**: 832 (2002).
6. S. P. Repetsky, V. A. Tatarenko, I. M. Melnyk, and E. G. Len, *Usp. Fiz. Met.*, **9**, No. 3: 259 (2008) (in Ukrainian).
7. E. G. Len, T. D. Shatnii, V. V. Lizunov, T. S. Len, and M. V. Ushakov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 8: 1005 (2021).
8. A. A. Smirnov, *Obobshchennaya Teoriya Uporyadochivayushchikhsya Splavov* [Generalized Theory of Ordered Alloys] (Kyiv: Naukova Dumka: 1986).
9. I. V. Vernyhora, S. M. Bokoch, and V. A. Tatarenko, *Usp. Fiz. Met.*, **11**, No. 3: 313 (2010).
10. D. I. Pushkarov, *Pisma v JETP*, **27**, Iss. 6: 359 (1978)
11. D. E. Laughlin and T. B. Massalski, *Progress in Materials Science*, **120**, Article Number 100715 (2021).
12. A. N. Andriotis, E. N. Economou, L. Qiming, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **47**, No. 15: 9208 (1993).
13. Yu. A. Izyumov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **165**: 403 (1995) (in Russian).
14. H. Jones F.R.S., *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science: Series 7*, **44**, No. 355: 907 (1953).
15. U. Mizutani and H. Sato, *Crystals*, **7**: 9 (2017).