

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СЛАБЫЙ ЗОННЫЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ Mn_3Si

А.В. Власов, Э.Т. Кулатов, А.А. Повзнер

В формализме функционала локальной плотности проведен расчет электронного спектра низшего силицида марганца. Исследованы неустойчивость относительно возбуждения волн спиновой плотности и влияние спин-флуктуационных эффектов на антиферромагнетизм Mn_3Si .

Согласно теории зонного антиферромагнетизма (АФ) переходных металлов и их соединений, важной причиной образования волн спиновой плотности (ВСП) является триплетное спаривание электронов и дырок почти конгруэнтных участков поверхности Ферми (ПФ) /1/. Для многих металлических АФМ, однако, такие участки составляют небольшую долю полной ПФ, и имеется мощный электронный резервуар, система магнитных моментов которого, взаимодействуя через бозе-конденсат электронно-дырочных пар, инициирует формирование ВСП с волновым вектором q_0 равным вектору нестинга q_N /2/. Другой причиной зонного АФ может быть обменное взаимодействие коллективизированных электронов резервуара, приводящее к потере устойчивости парамагнитного состояния при выполнении критерия Стонера: $D^{-1}(q_0) = 1 - I\chi_0(q_0) < 0$, где $\chi_0(q)$ — восприимчивость невзаимодействующих электронов, I — параметр обменного взаимодействия.

В настоящем сообщении исследуется ВСП-неустойчивость в слабом зонном АФ Mn_3Si , для которого ранее были проведены эксперименты по рассеянию нейтронов (в том числе неупругому) /3, 4/, однако информация о его электронной структуре отсутствовала. В данной работе выполнен самосогласованный расчет зонной структуры Mn_3Si в парамагнитной фазе методом ЛМТО /5/ с учетом комбинированных поправочных членов. Высший силицид марганца кристаллизуется в упорядоченной структуре типа DO_3 (пространственная группа $O_h^5 - Fm\bar{3}m$), атомы Mn в которой занимают три положения, А, В и С, а атом Si — положение D, причем узлы сортов А и С эквивалентны. Таким образом, в Mn_3Si присутствуют три неэквивалентных сорта атомов: $Mn_A(C)$, Mn_B и Si_D . Параметр элементарной ячейки $a = 5,722$ А. Плотность электронных состояний (ПЭС) и ПФ рассчитывались на сетке из 240 к-точек в 1/48 части гранецентрированной кубической зоны Бриллюэна. Базисный набор в разложении волновых функций включал s-, p- и d-орбитали на каждом атоме.

На рис. 1 изображена функция ПЭС, из которого видно, что уровень Ферми E_F , соответствующий заполнению валентной зоны до 25-и электронов, расположен вблизи локального максимума ПЭС. Величина $N(E_F)$ довольно высока (122,9 сост./ (Ру.эл.яч.)). Отражением неэквивалентности узлов $Mn_A(C)$ и Mn_B является различие локальных d-ПЭС как на всем энергетическом интервале валентной зоны, так и на уровне Ферми (28,5 и 61,1 сост./ (Ру.ат.)). Следует отметить, что на обоих узлах Mn перекрыт стонеровский порог неустойчивости магнитного состояния, приблизительно равный 18 сост./ (Ру.ат.).

ПФ расположена в зонах с 10-й по 14-ю, сечения которой изображены на рис. 2. Характерным для топологии рассчитанной ПФ является отсутствие нестинга на векторе $q_0 = 0,500(1, 1, 1)$. В то же время имеется плоский участок ПФ в 13-й зоне, практически совпадающий с границей перестроенной АФМ зоны Бриллюэна, симметрия которой — простая кубическая ($O_h^1 - Pm\bar{3}m$, тип CsCl). Вектор нестинга q_N в этом случае равен $0,500(1, 0, 0)$.

Итак, наряду с параметром АФ порядка с волновым вектором $q_0 = 0,425(1, 1, 1)$ в Mn_3Si могла бы реализоваться неустойчивость с образованием ВСП с вектором $q_N = 0,500(1, 0, 0)$. Возможность существования двух параметров порядка ($\Delta(q_0)$ и $\Delta(q_N)$) в основном состоянии можно проанализировать исходя из термодинамического потенциала резервуара, представленного рядом по степеням $\Delta_N = |\Delta(q_N)|$ и $\Delta_0 = |\Delta(q_0)|$, и потенциала нестингующихся участков, описываемых известными из /1, 2, 6/ соотношениями.

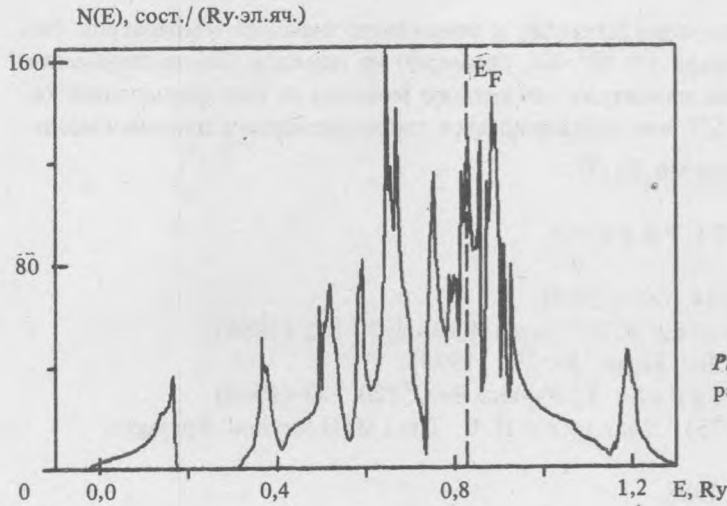
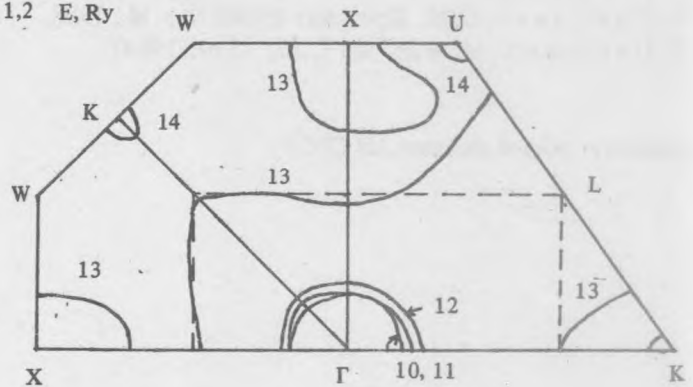


Рис. 1. Плотность электронных состояний Mn_3Si в парамагнитной фазе.

Рис. 2. Поверхность Ферми Mn_3Si в парамагнитной фазе. Цифрами обозначены номера зон. Пунктирные линии — границы перестроенной АФМ зоны Бриллюэна.



Из условия устойчивости ($\partial\Omega/\partial\Delta = 0$) следует, что в рассматриваемом случае, когда векторы q_N и q_0 заметно отличаются друг от друга, а для факторов обменного усиления справедливо неравенство: $|D^{-1}(q_0)| \gg |D^{-1}(q_N)|$, — ориентирующее взаимодействие магнитных моментов резервуара через бозе-конденсат электронно-дырочных пар подавляется их прямым взаимодействием. Кроме того, в условиях, когда параметр неконгруэнтности электрон-дырочных участков $\delta\mu \gg \Delta_N$ ($\delta\mu \sim 10^{-1}$ эВ, $\Delta_N \sim 10^{-2}$ эВ), последний эффект усиливается, и триплетное спаривание не приводит к образованию ВСП.

Рассмотрим теперь влияние спиновых флуктуаций на АФ Mn_3Si . Термодинамический потенциал электронов резервуара (в отсутствие электрон-дырочного спаривания участков) с учетом АФ спиновых флуктуаций (амплитуды $\langle m^2 \rangle^{1/2}$), имеющих квазиимпульсы, "локализованные" вблизи вектора q_0 (которому, согласно /4/, отвечает заметное обменное усиление: $|D(q_0)| \approx 10$), можно записать в виде:

$$\Omega_p = T \sum_{ka} \ln [1 + \exp(\epsilon_p^{(a)}(k)/T)], \quad (1)$$

где антиферромагнитное расщепление электронного спектра сохраняется даже выше точки Нееля:

$$\epsilon_p^{\pm}(k) = (\epsilon_k + \epsilon_{k+q_0}/2) \pm \sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_{k+q_0}/2)^2 + \Delta_0^2 + \langle m^2 \rangle}, \quad (2)$$

$\langle m^2 \rangle = \langle m_{\parallel}^2 \rangle + 2\langle m_{\perp}^2 \rangle$, а амплитуды продольных ($\langle m_{\parallel}^2 \rangle$) и поперечных ($\langle m_{\perp}^2 \rangle$) спиновых флуктуаций рассчитаны по методике, описанной в /6/. При этом использованы параметры, характеризующие пространственную и частотную дисперсию восприимчивости не взаимодействующих электронов ($\chi_0(q, \omega) \approx \chi_0(0) + A|q - q_0|^2 + i\omega C/q_0$), полученные из сопоставления восприимчивости резервуара $\chi(q, \omega)$ с интенсивностью рассеяния нейтронов /4/: $A \approx 1$ эВ⁻¹, $C \approx 80$ q₀ эВ⁻².

Согласно нашим оценкам, АФ спиновые флуктуации приводят к понижению значений температуры Нелля, рассчитанной по теории среднего поля Стонера ($\approx 10^2$ К), примерно на порядок (на эксперименте наблюдается $T_N \approx 25,8$ К). При этом изменение амплитуды магнитного момента за счет флуктуаций характеризуется отношением $\eta = (\Delta_0^2/m^2)_{T_N} \approx 5/3$, что подтверждается сопоставлением с данными исследований магнитного вклада в тепловое расширение Mn_3Si [7].

ЛИТЕРАТУРА

1. Куликов Н. И., Тугушев В. В. УФН, 144, 643 (1984).
2. Кулатов Э. Т., Куликов Н. И., Тугушев В. В. Труды ИОФАН, 3, 122 (1986).
3. Tomiyoshi S., Watanabe H. J. Phys. Soc. Japan, 39, 295 (1975).
4. Tomiyoshi S., Funahachi H., Yamaguchi Y. Physica B+C, 120, 143 (1983).
5. Andersen O. K. Phys. Rev., B12, 3060 (1975); Skriver H. L. The LMTO Method, Springer, New York, 1984.
6. Толкачев О. М. Препринт ФИАН № 5, М., 1988.
7. Бармин С. М. и др. ФТТ, 26, 1510 (1984).

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 6 июля 1990 г.