

УДК 538.115

©1993

ВЛИЯНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА СПЛАВА $Ni_{1-x}Mn_{1+x}$ НА ТЕМПЕРАТУРУ НЕЕЛЯ

Е.Е. Слядников

Антиферромагнитное упорядочение в сплавах $Ni_{1-x}Mn_{1+x}$, близких по составу к эквиатомному, принято связывать с особой топологией поверхности Ферми — нестингом плоских участков в парамагнитной фазе вдоль направления $X - R$. Цель настоящей работы — изучение физического механизма уменьшения температуры Нееля при отклонении сплава $NiMn$ от стехиометрического состава, путем численного исследования уравнения на $T_N(x)$.

Тенденцию к антиферромагнетизму в упорядоченных сплавах $Ni_{1-x}Mn_{1+x}$, близких по составу к эквиатомному, принято связывать с особой топологией поверхности Ферми — нестингом плоских участков в парамагнитной фазе вдоль направления $X - R$, приводящей к неустойчивости высокотемпературной фазы относительно волны спиновой плотности [1]. Результаты измерения температуры магнитного перехода T_N в сплаве свидетельствуют о более резком уменьшении $|dT_N/dx|$ при увеличении содержания Mn , чем при избытке Ni [2]. Ясно, что в рамках модели волны спиновой плотности это может быть объяснено из предположения о более сильном ухудшении нестинга при росте концентрации Mn и о слабом изменении особенности поверхности Ферми при добавлении Ni . Цель настоящей работы — изучение физического механизма уменьшения температуры Нееля при отклонении сплава $NiMn$ от стехиометрического состава путем численного исследования уравнения для $T_N(x)$.

Исходя из модели волны спиновой плотности с особенностями, характерными для систем данного типа, уравнение для температуры перехода записываем в виде (1)

$$\ln \frac{T_N(x)}{T_N^0(x)} = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \operatorname{Re} \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\nu - i\mu}{2\pi T_N}\right) + \frac{1}{gN(x)} \frac{\delta}{\delta + 1}, \quad (1)$$

где при $x < 0$

$$\nu = 4\pi N(x) \left[|x|V^2 + \frac{1}{3}(1 - |x|)J^2 S(S+1) \right],$$

$$\delta = \frac{(1 - |x|) J^2 S(S+1)}{3g T_N(x)},$$

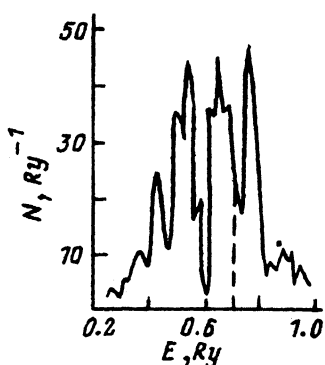


Рис. 1. Плотность энергетических состояний соединения NiMn.

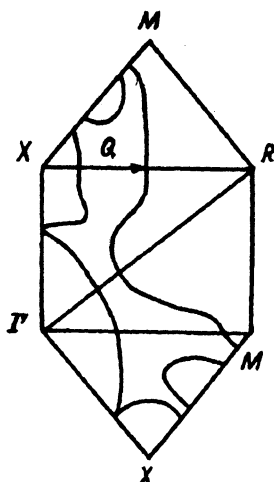


Рис. 2. Сечение поверхности Ферми соединения NiMn.

$$\nu = 2\pi N(x) \left[xv^2 + \frac{1}{3} S(S+1)(2J^2 + xI^2) \right],$$

$$\delta = \frac{1}{3} \frac{J^2}{g} \frac{S(S+1)}{T_N(x)}.$$

Здесь

$$T_N(x) = 2\omega \exp(-1/gN(x))\gamma/\pi,$$

g — константа электрон-электронного взаимодействия, 2ω — ширина зоны $x'_3 - R'_{12}$, $N(x)$ — плотность электронных состояний на уровне Ферми, S — величина локального спина на Mn, а V, J, v, I — матричные элементы прямого и обменного рассеяния электронов плоских участков на подрешетках Mn и Ni соответственно.

Характерные значения этих параметров зависят от состава сплава. Поскольку в настоящее время вид этой зависимости неизвестен, для качественного анализа фазовой диаграммы положим матричные элементы рассеяния, константу g концентрационно независимыми. Тогда в соответствии с нашим предположением параметрами, определяющими зависимость T_N от состава, будут плотность электронных состояний на уровне Ферми и химический потенциал $\mu(x)$. Значения физических величин, входящих в уравнение (1), были получены из расчета электронной структуры эквивалентного упорядоченного соединения NiMn [3]. Плотность электронных состояний имеет характерную двухпиковую структуру, где высокоэнергетический пик формируется состояниями Mn, а низкоэнергетический — состояниями Ni (рис. 1) [3,4]. Уровень Ферми (~ 0.69 Ry) попадает на крутой подъем слева от локального минимума (~ 0.7 Ry). Сечение поверхности Ферми (рис. 2) четко воспроизводит особенность на $X - R$ направлении с величиной вектора наложения плоских участков $|Q| = 0.48$ [3].

Для качественного анализа зависимости $N(x)$ и $\mu(x)$ воспользуемся моделью "жесткой" зоны. Тогда при избыточном содержании Mn число электронов на атом становится меньше 8,5, что приведет к росту $N(x)$,

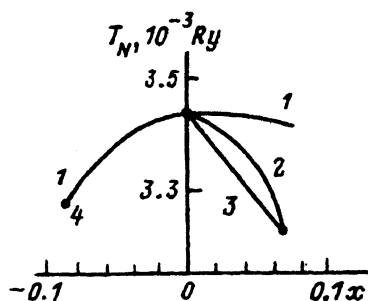


Рис. 3. Зависимость температуры Нееля от состава сплава $Ni_{1-x}Mn_{1+x}$.

понижению E_F , уменьшению значения $|Q|$ и соответственно к существенному ухудшению нестинга. При росте содержания Ni $N(x)$ изменится незначительно, так как E_F будет находиться в окрестности локального минимума. Однако в случае избытка Ni изменение $|Q|$ будет более сложным. При увеличении содержания Ni сначала произойдет улучшение нестинга ($|Q| \rightarrow 1/2$), а при дальнейшем росте его концентрации происходит разрушение особенности поверхности Ферми ($|Q| > 1/2$). Используя приведенные рассуждения, можно исследовать поведение $T_N(x)$, предполагая, что

$$\mu(x) = \mu_0 + x\mu', \quad N(x) = N(0) + xN'$$

для малых x .

Остановимся на способе выбора параметров уравнения (1). Константа электронного взаимодействия g была оценена из условия совпадения щели в точке A электронного спектра антиферромагнитной фазы NiMn и щели, рассчитанной по формуле

$$\Delta = 2\omega \exp(-1/gN(0)).$$

Ширина зоны 2ω , химический потенциал $\mu(x)$ и значение $N(0)$ были взяты из зонного расчета [3]. Поскольку потенциал рассеяния электронов плоских участков центрирован на узлах Mn, то $V, J \gg v, I$ [1]. Свободными параметрами остаются значения V, J . Они были определены подгонкой под экспериментальные значения V, J в точках $x = 0.0$ и $x = -0.09$. Значения параметров, использованных при решении уравнения (1), следующие (все энергии — в ридбергах):

ω	μ	$N(0)$	V	g	J	S	Δ
0.089	0.003	28.03	2.53	0.025	0.017	4	0.043

Результаты расчета температуры Нееля сплава $Ni_{1-x}Mn_{1+x}$ представлены на рис. 3 в сравнении с экспериментальными данными (точки 4) [2].

Численный анализ уравнения (1) показывает, что для случая $x < 0$ рассчитанная кривая $T_N(x)$ совпадает с экспериментальной (рис. 3, кривая 1) при $\mu' \ll \mu_0$, $N' \ll N(0)$. Следовательно, уменьшение T_N при увеличении содержания Ni в основном определяется примесным рассеянием электронов плоских участков (параметр V) на атомах Ni в подрешетке Mn. Однако при $x > 0$ совпадение экспериментальной и теоретической

кривых возможно для двух режимов: 1) $\mu' \ll \mu_0$, $N' \sim N(0)$ (рис. 3, кривая 2); 2) $\mu' \sim \mu_0$, $N' \ll N(0)$ (рис. 3, кривая 3). Решение уравнения (1) показывает, что величина $N_N(x)$ более чувствительна к изменению μ' , чем к изменению N' . Поэтому уменьшение температуры Нееля при увеличении содержания Mn главным образом происходит вследствие ухудшения нестинга на $X - R$ направлении поверхности Ферми.

В заключение автор благодарит фонд "РЭГО" за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] Слядников Е.Е., Тугушев В.В. // ФТТ. 1990. Т. 32. N 8. С. 2247-2254.
- [2] Kren E. // J. Phys. Chem. Solids. 1968. V. 29. N 1. P. 101-108.
- [3] Слядников Е.Е., Подпорин А.Г. // Труды Всесоюзной конф. "Мартенситные превращения в твердом теле". Косов, 1991. С. 46-50.
- [4] Егорушкин В.Е., Кульков С.Н., Кулькова С.Е. // ЖЭТФ. 1982. Т. 84. N 2. С. 599-605.

Сибирский
физико-технический
институт
Томск

Поступило в Редакцию
7 декабря 1992 года.