

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СОЕДИНЕНИЯ $Mn_3Sb$

А.В. Головчан, В.И. Вальков  
Донецкий физико – технический институт им. А.А.Галкина  
Национальной академии наук Украины  
[valkov@dpms.fti.ac.donetsk.ua](mailto:valkov@dpms.fti.ac.donetsk.ua)

Как известно, в системе Mn-Sb существуют два соединения  $MnSb$  и  $Mn_2Sb$  с никель-арсенидной ( $NiAs$ ) и тетрагональной ( $Cu_2Sb$ ) кристаллическими структурами соответственно. Недавно, под воздействием высокого давления и температуры в этой системе было синтезировано новое соединение  $Mn_3Sb$  [1] с кубической структурой. Соединение  $MnSb$  представляет собой ферромагнетик с магнитным моментом  $M(Mn) = 3.79\mu_B$ , а  $Mn_2Sb$  - ферримагнетик с магнитными моментами атомов  $M(Mn_I) = 1.5\mu_B$ ,  $M(Mn_{II}) = -2.7\mu_B$ .

Поэтому представляет интерес магнитная структура нового соединения -  $Mn_3Sb$ , по которому еще не имеется данных нейтронографии. Нами была предпринята попытка расчета электронной структуры и свойств основного состояния  $Mn_3Sb$  из первых принципов.

Соединение  $Mn_3Sb$  обладает группой симметрии  $Pm\bar{3}m(221)$ , причем атомы Mn занимают положение  $3c(0,1/2,1/2)$ , а атомы Sb - положение  $1a(0,0,0)$ . Расчеты проводились полностью релятивистским ККР методом SPRKKR[3], с использованием приближения атомной сферы(ASA) для кристаллического потенциала и приближения локальной плотности(LDA) для обменно-корреляционной энергии.

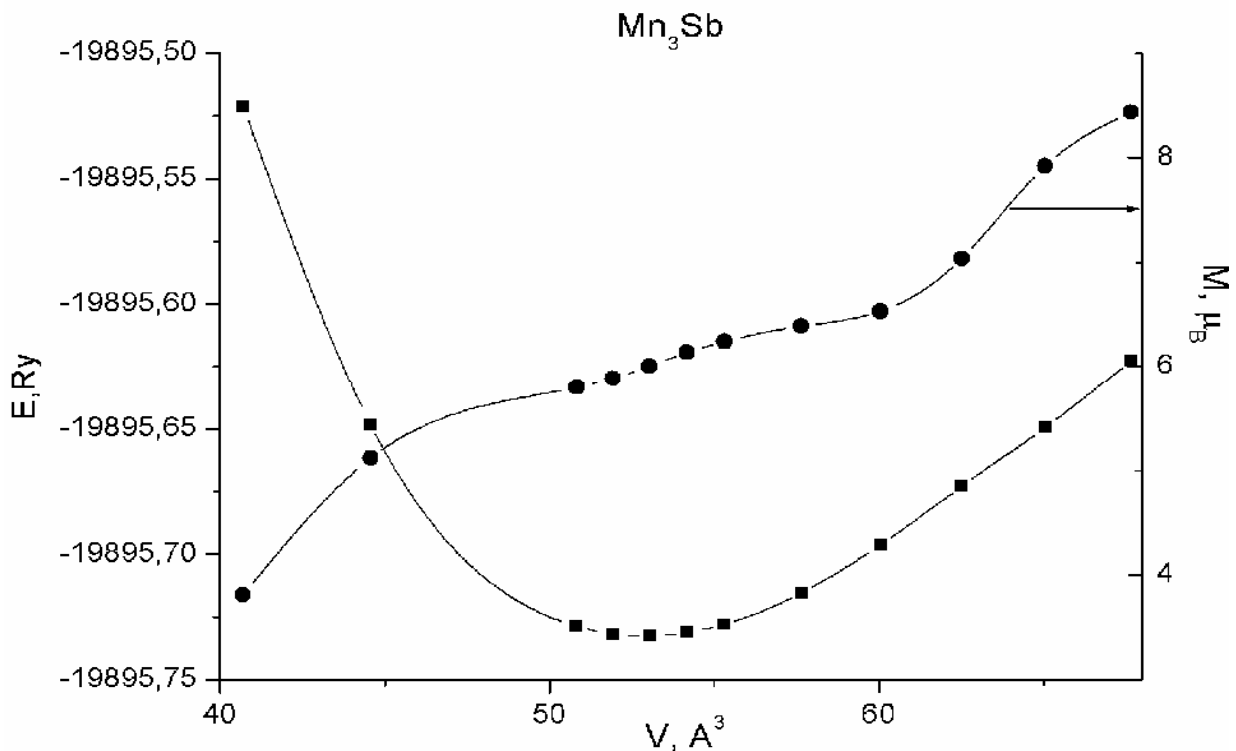


Рис.2. Зависимость полной энергии и магнитного момента  $Mn_3Sb$  от объема элементарной ячейки.

На рис.1 приведены зависимость полной энергии и магнитного момента элементарной ячейки от объема элементарной ячейки. Минимуму энергии соответствует объем  $V \approx 54 \text{ \AA}^3$ , а атмосферному давлению -  $V_0 \approx 64 \text{ \AA}^3$ . Подобное «занижение» равновесного объема соединений 3d-металлов характерно для LDA приближения и связано как с недостаточным учетом градиента электронной плотности, так и с пренебрежением температурными эффектами.

В магнитном отношении (согласно проведенным расчетам)  $Mn_3Sb$  – ферромагнетик с магнитными моментами атомов  $M(Mn) = 2.6366 \mu_B$ ,  $M(Sb) = -0.1865 \mu_B$ .

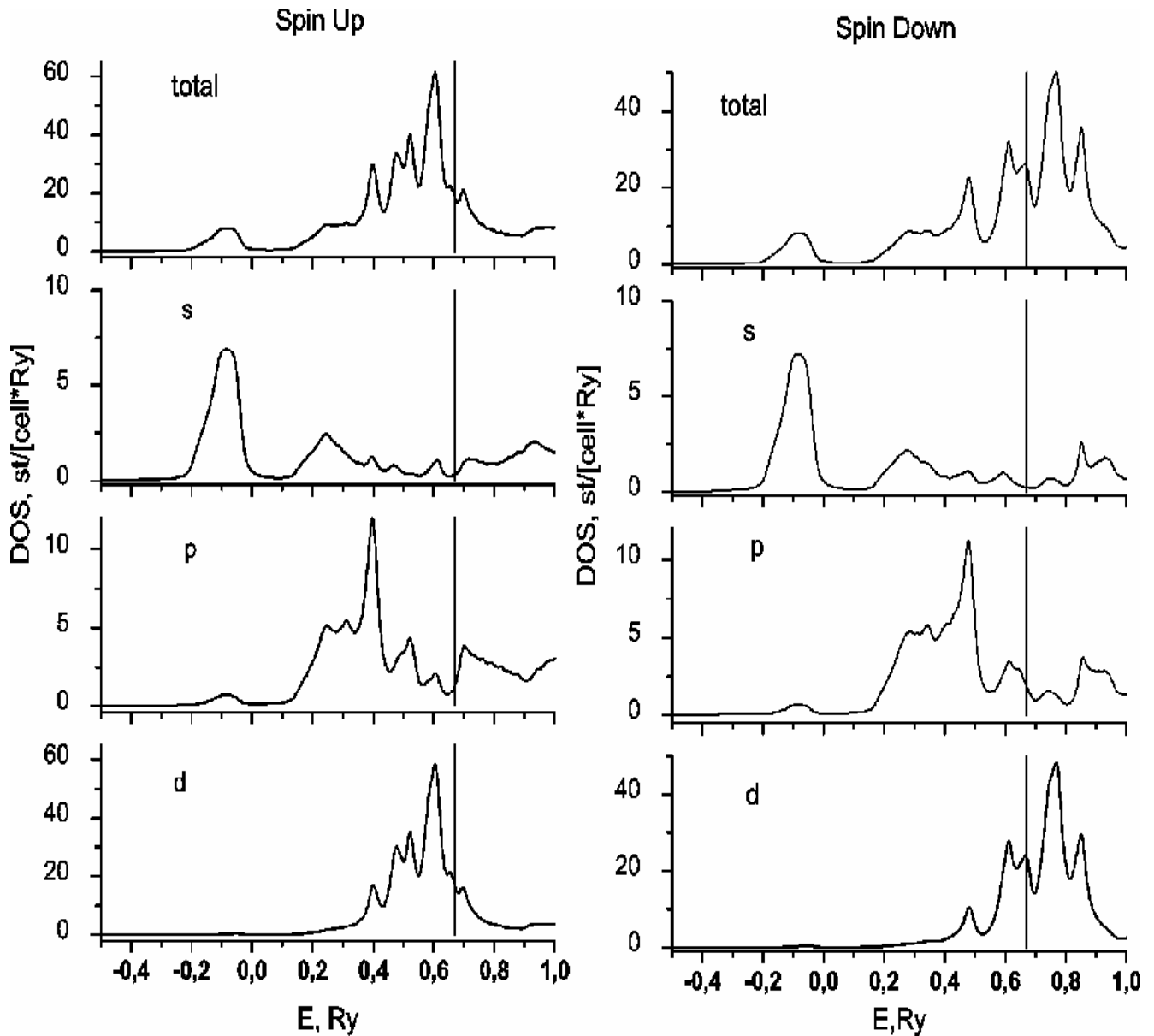


Рис.2. Плотность состояний  $Mn_3Sb$  при атмосферном давлении( $V=64 \text{ \AA}^3$ ).

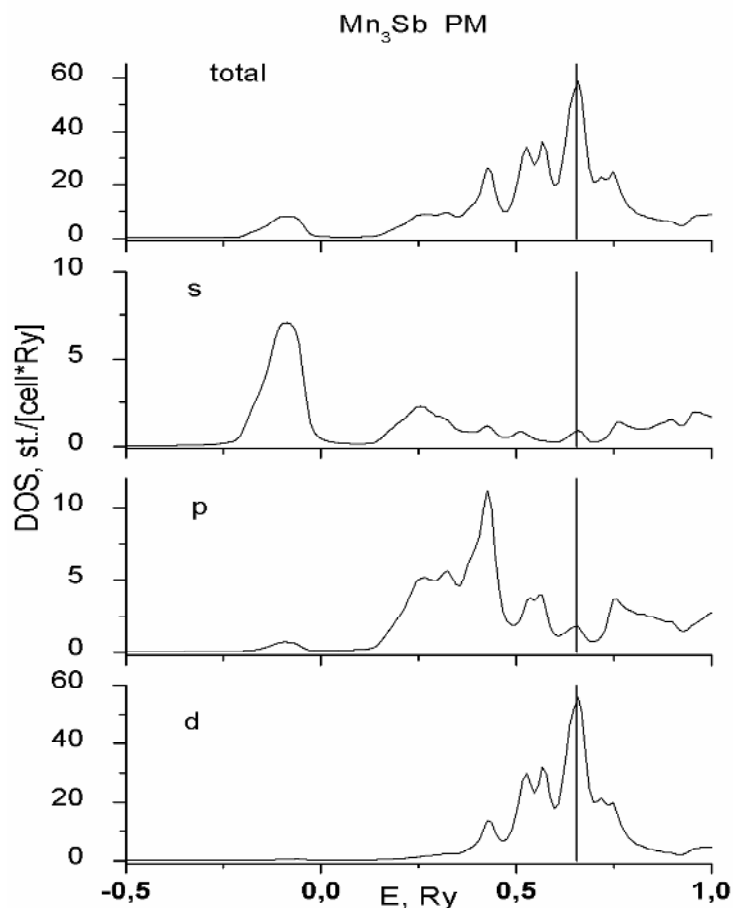


Рис.3. Плотность состояний немагнитного  $Mn_3Sb$  при атмосферном давлении. Вертикальной линией показан уровень Ферми.

Возможность существования спиновых спиралей и волн спиновой плотности нами не исследовалась. На рис.2,3 приведены соответственно спин-поляризованная и немагнитная плотности состояний  $Mn_3Sb$  при атмосферном давлении. Как видно из рис.2,3 данное соединение представляет собой металл. Состояния на уровне Ферми -  $d$  - типа со слабой примесью  $s$  - и  $p$  - состояний  $Sb$ .

Таким образом,  $Mn_3Sb$  представляет собой ферромагнетик в широком диапазоне объемов элементарной решетки. Последнее дает возможность прогнозировать устойчивость магнитной структуры данного соединения под давлением.

1. В.С. Гончаров, В.М. Рыжковский Неорганические материалы, 2005, т.41, №5, с.1-3
2. S.Yu.Savrasov, D.Yu.Savrasov. Phys.Rev.**B46** 12181(1992), MindLab, <http://physics.njit.edu/~savrasov/>
3. The Munich SPR-KKR package, version 2.1, H.Ebert et al, <http://olymp.cup.uni-muenchen.de/ak/ebert/SPRKKR>; H Ebert, Fully relativistic band structure calculations for magnetic solids – Formalism and Application, in Electronic Structure and Physical Properties of Solids, editor: H. Dreyss'e, Lecture Notes in Physics, vol. 535, p. 191, Springer Berlin.