

РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СОЕДИНЕНИЯХ Cu_2Sb И Mn_2Sb

В. М. Рыжковский. Т. Д. Соколовский

Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси
220072, г. Минск, ул. П. Бровки, 17

Определение энергетической зонной структуры электронов в кристалле представляет большой интерес не только само по себе, но также необходимо для понимания электронных свойств материалов и их магнитных состояний. Энергетические зоны электронов можно рассчитать с помощью методов квантовой механики без использования экспериментальных данных. Такому успеху способствовало открытие новых методов решения квантовомеханических задач, эффективность которых усилилась с применением современной техники. Это можно видеть на примере ячеечного метода Вигнера-Зейтца [1], который был дополнен новыми идеями Слэтером [2], а затем получил дальнейшее развитие в работах Саффрена и Слэтера [3,4] и известен под названием метода присоединенных плоских волн (ППВ). Как показали расчеты, метод ППВ обеспечивает наиболее приемлемые результаты [5] с физической точки зрения.

Интерметаллические соединения типа Mn_2Sb обладают разнообразными полезными магнитными свойствами. Известно, что эти свойства определяются характером и особенностями зонной структуры кристаллов. Поэтому важно как в методическом, так и в принципиальном плане определение зонной структуры диамагнетика Cu_2Sb и ферромагнетика Mn_2Sb в качестве примера для использования при расчетах зонной структуры других соединений аналогичного структурного типа.

Расчеты плотности состояний электронов в соединениях Cu_2Sb и Mn_2Sb выполнены нами методом ППВ [4]. Пниктид марганца Mn_2Sb имеет тетрагональную структуру типа Cu_2Sb с пространственной группой симметрии D_{4h}^7 . Его элементарная ячейка образована шестью атомами, из которых четыре атома марганца являются катионами двух типов, и два атома сурьмы, которые являются анионами.

В методе ППВ рассматривается модель кристалла, которая состоит из сферических ячеек (остовов) радиуса R с центрами в ядрах атомов. В этих ячейках действует сферический потенциал, а в пространстве между ячейками потенциал постоянен. Для этих предельных случаев можно записать выражения плоской волны в общем виде:

$$\begin{aligned} \Phi_k(r) &= \exp[ikr] \quad \text{при } r > R, \\ \Phi_k(r) &= \sum_L [i^l a_L R_l(r, E) Y_L(r)] \quad \text{при } r \leq R, \end{aligned} \quad (1)$$

где $Y_L(r)$ - сферическая гармоника, зависящая от направляющих косинусов вектора r , $R_l(r, E)$ - радиальная волновая функция, удовлетворяющая уравнению Шредингера.

$$[-d^2/dr^2 + V(r) + l(l+1)/r^2](ru) = Eru, \quad (2)$$

где $V(r)$ - потенциал внутри сферы радиуса R атома, E - энергия электрона.

Сшивая две волны (1) по точкам сферы радиуса R и не допуская других общих точек, получаем присоединенную плоскую волну. Коэффициент a_L выбирается так, чтобы обеспечить непрерывность присоединенной плоской волны на сфере радиуса R атома.

Хотя функции типа (1), а также функция ППВ не удовлетворяют условию периодичности Блоха, но оказалось возможным составить такую суперпозицию этих функций, которая является Блоховской функцией. При этом выполняется необходимое и достаточное условие связи между собственным значением энергии E и волновым вектором k в виде детерминанта:

$$|A(k, E) - B(k, E)| = 0, \quad (3)$$

где $A(k, E)$, $B(k, E)$ - матричные элементы, которые являются функциями энергии E и

волнового вектора k для заданных геометрических параметров кристалла.

Начальные значения центрально-симметрического потенциала внутри остовов атомов кристалла построены по радиальным волновым функциям валентных электронов атомов марганца и сурьмы. Эти функции определены по методу Хартри – Фока с применением метода Ритца и представлены на рисунке 1.

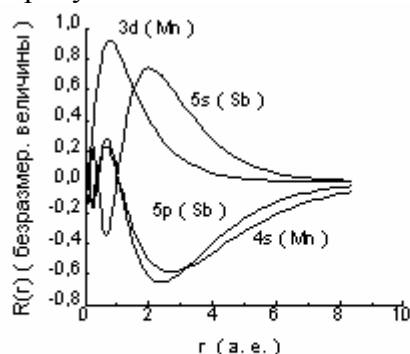


Рис. 1. Радиальные волновые функции валентных электронов атомов марганца и сурьмы

Обменно-корреляционный потенциал определен пропорционально кубическому корню электронной плотности в соответствии со статистическим методом Слэтера [6].

Электронная плотность немагнитных состояний рассчитана в данной работе с учетом различного числа волновых векторов. При этом координаты k выбирались с постоянным шагом на каждой из трех осей первой зоны Бриллюэна. Для каждого набора волновых векторов строилась гистограмма электронной плотности состояний. Так получен ряд гистограмм, сходящихся к электронной плотности соединения Mn_2Sb , рассчитанной по 500 волновым векторам, что с учетом симметрии соответствует 8000 значениям волнового вектора первой зоны Бриллюэна. Электронная плотность немагнитных состояний элементарной ячейки соединения Mn_2Sb показана на рисунке 2 (сплошная кривая). Для сравнения на этом же рисунке представлена плотность состояний электронов в соединении Cu_2Sb (пунктирная кривая), которая опубликована нами в [7].

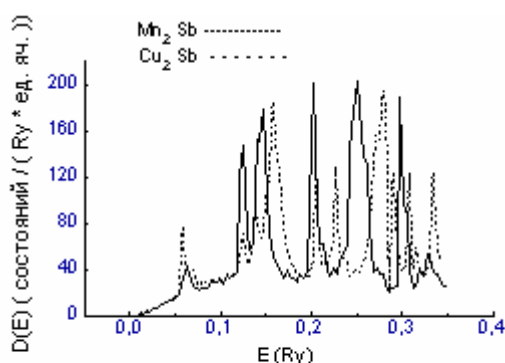


Рис. 2. Электронная плотность немагнитных состояний Mn_2Sb (сплошная кривая) и Cu_2Sb (пунктирная кривая).

Известно, что магнитная единичная ячейка соединения Mn_2Sb совпадает с кристаллографической единичной ячейкой. Однако вследствие разной симметрии двух типов узлов атомов марганца отмечается отличие этих атомов в магнитном отношении. Так

значения магнитных моментов атомов марганца существенно различаются друг от друга: если для Mn (I) он равен $-2,12 \mu_B$, то для Mn (II) он равен $3,62 \mu_B$.

В модели пниктидов марганца предполагается, что основными электронами, которые обеспечивают взаимодействие между атомами кристалла являются 3d – электроны. Поскольку 3d-оболочки заняты частично, то они могут заполняться за счет гибридизации, например, с 4s- электронами

Расчеты зонной структуры магнитных состояний ферримагнетика Mn_2Sb проведены методом самосогласованного поля ППВ. При этом начальные конфигурации валентных электронов для Mn (I) и Mn (II) являются различными и, в частности,

$(3d^{3,5} 4s^1) + (3d^{1,5} 4s^1)$ для Mn (I) и $(3d^{0,5} 4s^1) + (3d^{4,5} 4s^1)$ для Mn (II).

Результаты расчета показаны на рис. 3 при направлении спина - вверх (рис. 3 -а) и при направлении спина - вниз (рис. 3 -б).

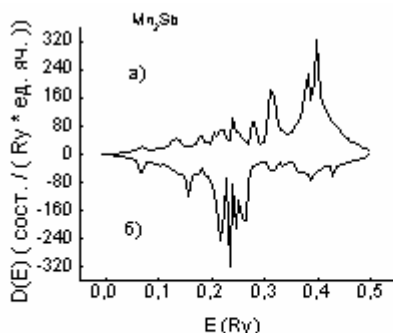


Рис. 3. Электронная плотность состояний ферримагнетика Mn_2Sb :
а) Направление спина - вверх ;
б) Направление спина - вниз .

Как видно из рисунка 3, плотность энергетических состояний электронов соединения Mn_2Sb можно условно разделить на три части: 1) плотность состояний электронов сравнительно высоких энергий, которые изменяются на интервале ($0.35 Ry < E < 0.50 Ry$); 2) плотность состояний электронов низких энергий которые изменяются на интервале ($0.01 Ry < E < 0.20 Ry$); 3) плотность состояний электронов средних энергий, которые изменяются на интервале ($0.20 Ry < E < 0.35 Ry$). Как известно [8], этой классификации можно поставить в соответствие антисвязывающие, связывающие и несвязывающие группы зон.

Список литературы

- [1]. E. Wigner, F. Seitz . Phys. Rev. **43**, 804 (1933).
- [2]. J. C. Slater . Phys. Rev. **51** , 846 (1937)
- [3]. J. C. Slater . Phys. Rev. **92**, 3 , 603(1953)
- [4]. M. M. Saffren , J. C. Slater . Phys. Rev. **92**, 5 , 1126(1953) .
- [5]. Дж. Займан. Вычисление Блоховских функций. Пер. с англ. под ред. проф. М. И. Каганова. Издат. “Мир“ . М. 1973 . 160 с.
- [6]. Дж. Слэтер. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. Пер. с англ. под ред. акад. С. В. Вонсовского и проф. А. К. Чиркова. 658 с.
- [7]. В. М. Рыжковский, Т. Д. Соколовский . Вестник БФФИ , 4, 30 (2004)
- [8] M.Suzuki , M.Shirai , K. J. Motizuki . J.Phys.: Condens.Matter **4**, L33(1992)