

Электронная структура коллинеарных состояний в магнитоупорядоченных фазах некоторых сплавов системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$

В.И. Вальков, А.В. Головчан

*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина*

E-mail: valkov@dpms.fti.ac.donetsk.ua

Статья поступила в редакцию 6 июля 2007 г., после переработки 21 августа 2007 г.

Из первых принципов при помощи пакета программ SPRKKR проведено исследование электронной и магнитной структур некоторых сплавов системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ с тетрагональной кристаллической решеткой $C38$ (группа симметрии $P4/nmm$). Рассмотрены различные варианты коллинеарных антиферромагнитных ($x = 1,29$) и ферромагнитных ($x = 1,29; 1,31; 1,35$) структур, магнитные моменты атомов которых лежат в базисной плоскости тетрагональной решетки. Показано, что в $\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$ наименьшей энергией обладает антиферромагнитная структура типа Fe_2As . Для определения возможной магнитной структуры ферромагнитной фазы, индуцируемой в исследованных сплавах сильным магнитным полем, проведено изучение четырех возможных ферромагнитных конфигураций, магнитная ячейка которых совпадает с кристаллографической. Обнаружено, что для одной из них зависимость намагниченности от концентрации Mn качественно удовлетворяет экспериментальным данным. Показано, что для всех рассматриваемых антиферромагнитных и ферромагнитных конфигураций изменение ориентации магнитных моментов не оказывает заметного влияния на их величину. Из сопоставления результатов расчетов с различными экспериментальными данными сделан вывод о целесообразности проведения уточняющих нейтронографических исследований системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ в области концентраций $1,29 \leq x \leq 1,52$.

З перших принципів за допомогою пакета програм SPRKKR проведено дослідження електронної та магнітної структур деяких сплавів системи $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ із тетрагональною кристалічною ґраткою $C38$ (група симетрії $P4/nmm$). Розглянуто різні варіанти колінеарних антиферромагнітних ($x = 1,29$) та ферромагнітних ($x = 1,29, 1,31, 1,35$) структур, магнітні моменти атомів яких лежать у базисній площині тетрагональної ґратки. Показано, що у $\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$ найменшу енергію має антиферромагнітна структура типу Fe_2As . Для визначення можливої магнітної структури ферромагнітної фази, яка індукована в досліджених сплавах сильним магнітним полем, проведено вивчення чотирьох можливих ферромагнітних конфігурацій, магнітна ґратка яких співпадає з кристаллографічною. Виявлено, що для однієї з них залежність намагніченості від концентрації Mn якісно задовольняє експериментальним даним. Показано, що для усіх розглянутих антиферромагнітних і ферромагнітних конфігурацій зміна орієнтації магнітних моментів не чинить значного впливу на їх величину. Із зіставлення результатів розрахунків з різними експериментальними даними зроблено висновок про доцільність проведення уточнюючих нейтронографічних досліджень системи $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ в області концентрацій $1,29 \leq x \leq 1,52$.

PACS: 71.20.Lp Интерметаллические соединения;
71.20.Be Переходные металлы и сплавы;
75.50.Ee Антиферромагнетики;
75.50.Gg Ферромагнетики;
75.10.Lp Зонные и коллективизированные модели.

Ключевые слова: пниктиды, антиферромагнетики, ферромагнетики, электронная структура, плотность электронных состояний.

Введение

Сплавы системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ обладают тетрагональной кристаллической структурой типа Cu_2Sb (пространственная группа $P4/nmm$, $C38$, рис. 1). Эта структура содержит два типа неэквивалентных катионных позиций I и II с тетраэдрическим и октаэдрическим анионным окружением. Антиферромагнитная (AF) структура исходных бинарных соединений Mn_2As и Fe_2As может быть описана с использованием двух магнитных подрешеток, каждая из которых представляет совокупность трех ближайших слоев (II-I-II), перпендикулярных тетрагональной оси ($4z$) и заселенных атомами в позициях I, II. Магнитные моменты атомов однотипных слоев (I-I'; II-II') различных подрешеток антипараллельны. Поскольку расстояние между двумя слоями I-I' вдоль тетрагональной оси соответствует периоду кристаллохимической ячейки c , то период магнитной ячейки вдоль этой оси в антиферромагнитной фазе равен $2c$. Антиферромагнитные структуры соединений Fe_2As и Mn_2As различаются направлением магнитных моментов атомов разнотипных слоев I-II — параллельны; в Mn_2As (AF2) — антипараллельны [1]. Возможно, конкуренция двух взаимоисключающих распределений спиновой плотности в магнитных подрешетках этих исходных бинарных соединений является причиной возникновения для некоторых сплавов системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ ($x \approx 1,29-1,52$, рис. 2) низкотемпературной ферримагнитной фазы с неколлинеарной магнитной структурой (CFi), обладающей нескомпенсированным магнитным моментом и удвоенным периодом магнитной ячейки [2-5].

Экспериментальные исследования полевых зависимостей намагниченности образца при низких температурах

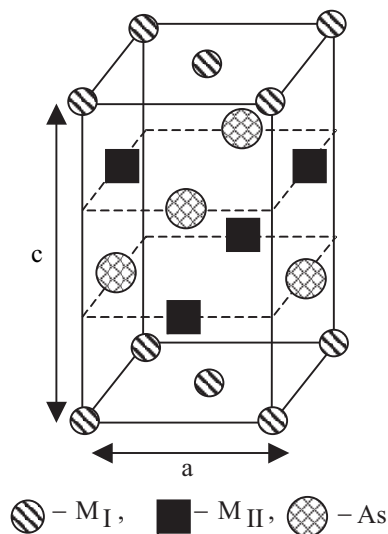


Рис. 1. Кристаллическая структура $C38$.

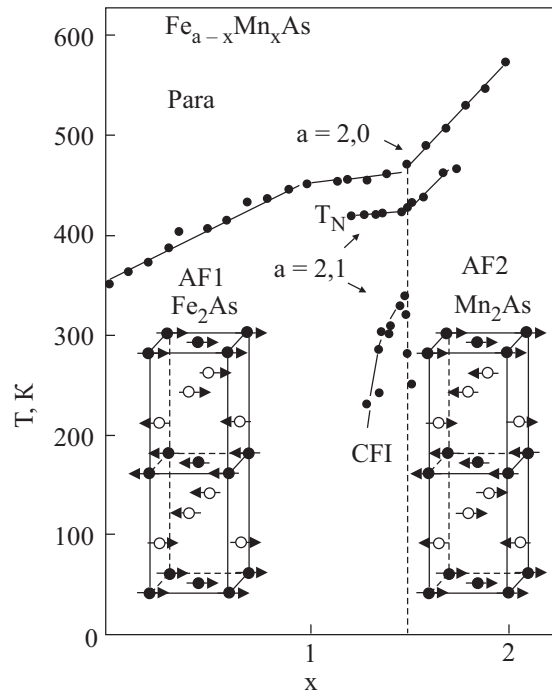


Рис. 2. Магнитная фазовая диаграмма $Fe_{2-x}Mn_xAs$ из работы [2].

вскрыли две особенности низкотемпературной ферримагнитной фазы CFi. В магнитных полях напряженностью до 450 кЭ наблюдается монотонный линейный рост намагниченности насыщения [6]. При дальнейшем возрастании напряженности магнитного поля можно наблюдать резкое увеличение намагниченности, которое может быть связано с потерей устойчивости фазой CFi и индуцированным полем фазовым переходом первого рода в новую фазу [7]. Намагниченность насыщения новой фазы в поле 550 кЭ в 1,5 раза превышает экстраполированную к этому полю намагниченность насыщения фазы CFi. Можно предположить, что новая фаза имеет одну из четырех коллинеарных ферримагнитных конфигураций, различающихся взаимными ориентациями магнитных моментов атомов железа и марганца.

В то же время на фоне богатого разнообразия экспериментальных результатов теоретические исследования электронной структуры системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ практически отсутствуют. Сегодня известен расчет электронной структуры лишь для Mn_2As [8] и $FeMnAs$ [9]. Поэтому теоретическое исследование влияния различного типа магнитного порядка на электронную структуру системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ является актуальной задачей в физике твердого тела, поскольку может быть полезно для приложений, связанных с возможностью использования магнитокалорических явлений, сопровождающих магнитные фазовые переходы в пниктидах переходных металлов.

Настоящая работа посвящена изучению из первых принципов влияния коллинеарных ферромагнитного ($x = 1,29; 1,31; 1,35$) и антиферромагнитного ($x = 1,29$) порядков на электронный спектр системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$.

Исходные данные

В качестве базового соединения для теоретических исследований электронной структуры антиферромагнитной фазы был выбран сплав $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$. Его выбор обусловлен тем, что по составу этот сплав наиболее близок к $Fe_{0,72}Mn_{1,28}As$, для которого в литературе имеются данные нейтронографии при различных температурах [5]. Согласно этим данным, суммарный магнитный момент атомов железа и марганца в тетраэдрических позициях направлен параллельно магнитным моментам ближайших атомов марганца в октаэдрических позициях, так что антиферромагнитная фаза в сплаве $Fe_{0,72}Mn_{1,28}As$ обладает структурой AF2. С другой стороны, согласно магнитоструктурной фазовой диаграмме, построенной для системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ на основании рентгеновских и магнитных измерений, сплав $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$, как и все сплавы с $x < 1,5$, имеет антиферромагнитную структуру AF1 [2], тогда как сплавы с $x > 1,5$ обладают структурой AF2. Поэтому результаты расчетов могут быть не только сопоставлены с экспериментальными данными, полученными различными способами, но и могут дать дополнительную информацию о корреляциях магнитных моментов железа и марганца в тетраэдрической подсистеме.

В настоящей работе полагалось, что антиферромагнитная фаза в $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$ обладает удвоенной по сравнению с кристаллографической (рис. 1) ячейкой и может иметь одну из четырех антиферромагнитных конфигураций, различающихся ориентацией магнитных моментов железа и марганца (табл. 1).

Таблица 1. Коллинеарные магнитные конфигурации.

	FM	FIM-I	FIM-II	FIM-III	AF1-1	AF1-2	AF2-1	AF2-2
Mn _I	→	←	→	←	←	→	→	←
Fe _I	→	→	←	←	←	←	→	→
Mn _{II}	⇒	⇒	⇒	⇒	←	←	←	←
Mn _{II}	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒
Mn _I	→	←	→	←	→	←	←	→
Fe _I	→	→	←	←	→	→	←	←
Mn _{II}	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒	⇒
Mn _{II}	⇒	⇒	⇒	⇒	←	←	←	←
Mn _{II}	→	←	→	←	←	→	→	←
Fe _I	→	→	←	←	←	←	→	→

Для ферромагнитной фазы, по предположению реализующейся в полях напряженностью более 550 кЭ, рассмотрены четыре коллинеарные ферромагнитные конфигурации с магнитной ячейкой, совпадающей с кристаллографической (табл. 1). Для заданного объема кристаллографической ячейки выбор конкретной магнитной структуры определен из энергетических соображений. Термодинамические и статистические особенности, обусловленные температурой, не рассматривали, и расчет проводили при температуре $T = 0$ для стехиометрического соединения.

Особенности кристаллической структуры и детали расчета

Для исследования влияния типа магнитного упорядочения на электронную структуру сплавов $Fe_{2-x}Mn_xAs$ применен полностью релятивистский метод Корринги–Кона–Ростокера (пакет SPRKKR [10]). При построении кристаллического потенциала использовано приближение атомной сферы. Обменно-корреляционная энергия вычислена в приближении локальной плотности без учета градиентных поправок [11]. Для рассматриваемого диапазона концентраций системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ при $x > 1$ атомы Fe занимают преимущественно позиции типа I (симметрия $2a-(0,0,0)$, $(0,5, 0,5, 0)$); атомы Mn — позиции II (симметрия $2c-(0, 0,5, z_1)$, $(0,5, 0,1-z_1)$) и частично позиции I; мышьяк занимает положения $2c-(0, 0,5, z_2)$, $(0,5, 0,1-z_2)$ пространственной группы $P4/nmm$. Значения параметров z_1 и z_2 составляют 0,33 и $-0,265$ для Mn_{II} и As соответственно. Постоянные кристаллической решетки для системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ взяты из работы [3]. Расчет электронной структуры сплава проведен в приближении когерентного потенциала для модели неупорядоченного сплава, при

этом предполагали, что атомы Fe_I и Mn_I распределены хаотически по тетраэдрическим позициям.

Результаты и их обсуждение

Мы рассчитали электронную структуру восьми видов коллинеарных магнитных конфигураций. Четыре типа антиферромагнитных и четыре типа ферромагнитных конфигураций, различающихся как ориентацией магнитных моментов Fe_I и Mn_I , так и ориентацией средних магнитных моментов в позициях I и II (табл. 1).

Как стало ясно из обработки рассчитанных электронных спектров, наиболее яркой интегральной характеристикой, которую можно сопоставить с экспериментально измеряемыми свойствами, являются спин-поляризованные зависимости плотности электронных состояний от энергии $DOS(E)$. Действительно, как видно на рис. 3 и 4, каждой магнитной конфигурации соответствует свое распределение электронных состояний по энергии и своя структура пиков. Общим свойством $DOS(E)$ для любой конфигурации является то, что электронные состояния в области энергии Ферми преимущественно $3d$ -типа.

На рис. 3 и 4 приведены спин-поляризованные парциальные плотности электронных состояний для антиферромагнитных (рис. 3) и ферромагнитных (рис. 4) конфигураций сплава $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$. Вертикальной линией обозначено положение уровня Ферми. Плотности электронных состояний имеют типичную многопиковую структуру, характерную для соединений $3d$ -металлов. Нижний одиночный пик образован $4s$ -состояниями As. Основная группа пиков, расположенная в области от $-0,2$ до $1,0$ Ридб и образованная $3d$ -электронами марганца и железа, обеспечивает проводящие свойства данного класса соединений.

Анализ результатов (рис. 3, рис. 4) позволяет сделать следующие выводы.

1. Ориентация магнитного момента Mn_I по разному влияет на форму парциальных плотностей состояний. Она оказывает слабое влияние на форму парциальных плотностей состояний Mn_{II} и Fe_I и более сильное — на форму парциальной плотности состояний Mn_I (рис. 3, а, б).

2. Значительные изменения формы полной плотности состояний происходят при переориентации среднего магнитного момента в узле I (рис. 3, а, в).

3. Удвоение решетки, сопровождающее возникновение в системе AF фазы, приводит к слабому изменению величин локальных магнитных моментов и незначительно изменяет форму парциальных плотностей состояний.

4. Парциальные и полная плотности электронных состояний ферромагнитных структур слабо зависят от концентрации Mn в рассматриваемом диапазоне.

Полученные в результате расчетов данные по величинам магнитных моментов и энергиям магнитных конфигураций относительно ферромагнитной конфигурации в расчете на формульную единицу приведены в табл. 2. Начало отсчета энергий ферромагнитных конфигураций соответствует пустой решетке. Сравнение полных энергий конфигураций показывает, что наименьшей энергией обладает конфигурация AF1–1. Несколько выше по энергии лежит конфигурация AF1–2 ($\Delta E = 0,00132$ Ридб ≈ 200 К). Такое близкое расположение конфигураций по энергии может выражаться в магнитном фазовом переходе AF1–1 \leftrightarrow AF1–2 при низких температурах. Этот переход связан с изменением ориентации магнитного момента Mn_I , которое приводит к уменьшению среднего магнитного момента в позиции I примерно в три раза (от $2,34 \mu_B$ в AF1–1 до $0,82 \mu_B$ в AF1–2). Магнитный момент Mn_{II} при этом практически не изменяется ($3,02 \mu_B$ и $3,07 \mu_B$ для AF1–1 и AF1–2 соответственно). Еще выше по энергии лежат четыре ферромагнитные конфигурации, магнитная ячейка которых совпадает с кристаллографической. И, наконец, конфигурации типа Mn_2As (AF2–1, AF2–2), одной из которых описывается, согласно [5], антиферромагнитная фаза в $Fe_{0,72}Mn_{1,28}As$, лежат выше всех по энергии ($\Delta E \approx 0,02$ Ридб ≈ 3000 К). Таким образом, согласно нашим расчетам, энергетически наиболее выгодной конфигурацией для антиферромагнитной фазы является конфигурация AF1–1. Это согласуется с магнитоструктурной фазовой диаграммой [2,7], построенной на основе косвенных измерений и противоречит данным нейтронографии [5], согласно которым антиферромагнитная фаза имеет магнитную структуру AF2.

Расхождение результатов расчета с данными нейтронографии [5] может быть вызвано, например, следующими причинами. Либо измеряемый в [5] образец не соответствовал необходимому диапазону концентраций по марганцу (информация о методике получения образцов в [5] отсутствует, а постоянные решетки по данным [5] для $x = 1,28$ сильно отличаются от постоянных решетки из работы [2] при тех же температурах), либо содержал вакансии по мышьяку. Влияние последнего фактора можно пояснить на примере расчетов электронной и магнитной структур нестехиометрических составов сплава $Fe_{0,69}Mn_{1,31}As$ при недостатках мышьяка. Согласно предварительным расчетам, проведенным нами для ферромагнитных конфигураций (табл. 1) системы $Fe_{0,69}Mn_{1,31}As_{1-y}$ ($y \geq 0$), изменение содержания мышьяка при заданном объеме и симметрии решетки может привести к кардинальному изменению энергетического баланса между различными типами ферромагнитных конфигураций и, как следствие, к изменению типа конфигурации с наименьшей энергией. Подобная ситуация не

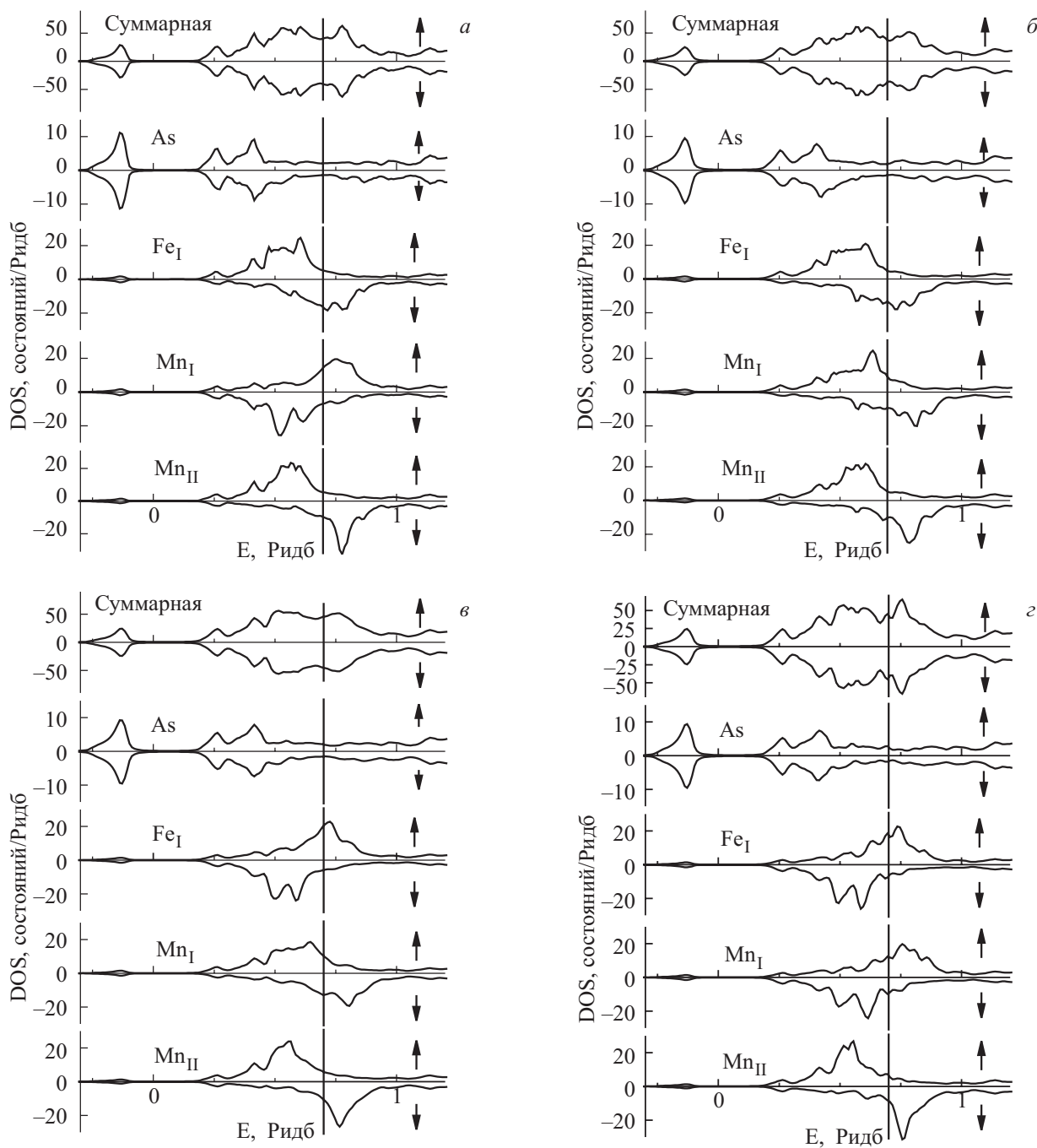


Рис. 3. Парциальные плотности состояний (DOS) $\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$ для структур AF1-2 (а), AF1-1 (б), AF2-2 (в), AF2-1 (г). Вертикальной линией обозначен уровень Ферми.

может быть исключена и для антиферромагнитной фазы исследуемого сплава, если предположить возможность не контролируемого отклонения содержания мышьяка и, как следствие, энергетическую инверсию между структурами AF1 и AF2.

Чтобы ответить на вопрос о возможной магнитной структуре высокополевой фазы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ ($x = 1,29-1,35$), реализующейся в сильных магнитных полях, мы провели расчет четырех коллинеарных магнитных конфигураций, отличающихся ориентацией

магнитных моментов атомов марганца и железа для различных концентраций Mn (см. табл. 2).

Из расчетных значений магнитных моментов для сплавов с $x = 1,29; 1,31; 1,35$ следует, что хотя магнитные моменты атомов марганца и железа слабо зависят от типа коллинеарной конфигурации, изменение среднего магнитного момента в тетраэдрических позициях может быть довольно значительным в зависимости от взаимной ориентации Mn_I и Fe_I (средний магнитный момент может изменяться от $0,7\mu_B$ до $2,29\mu_B$ при

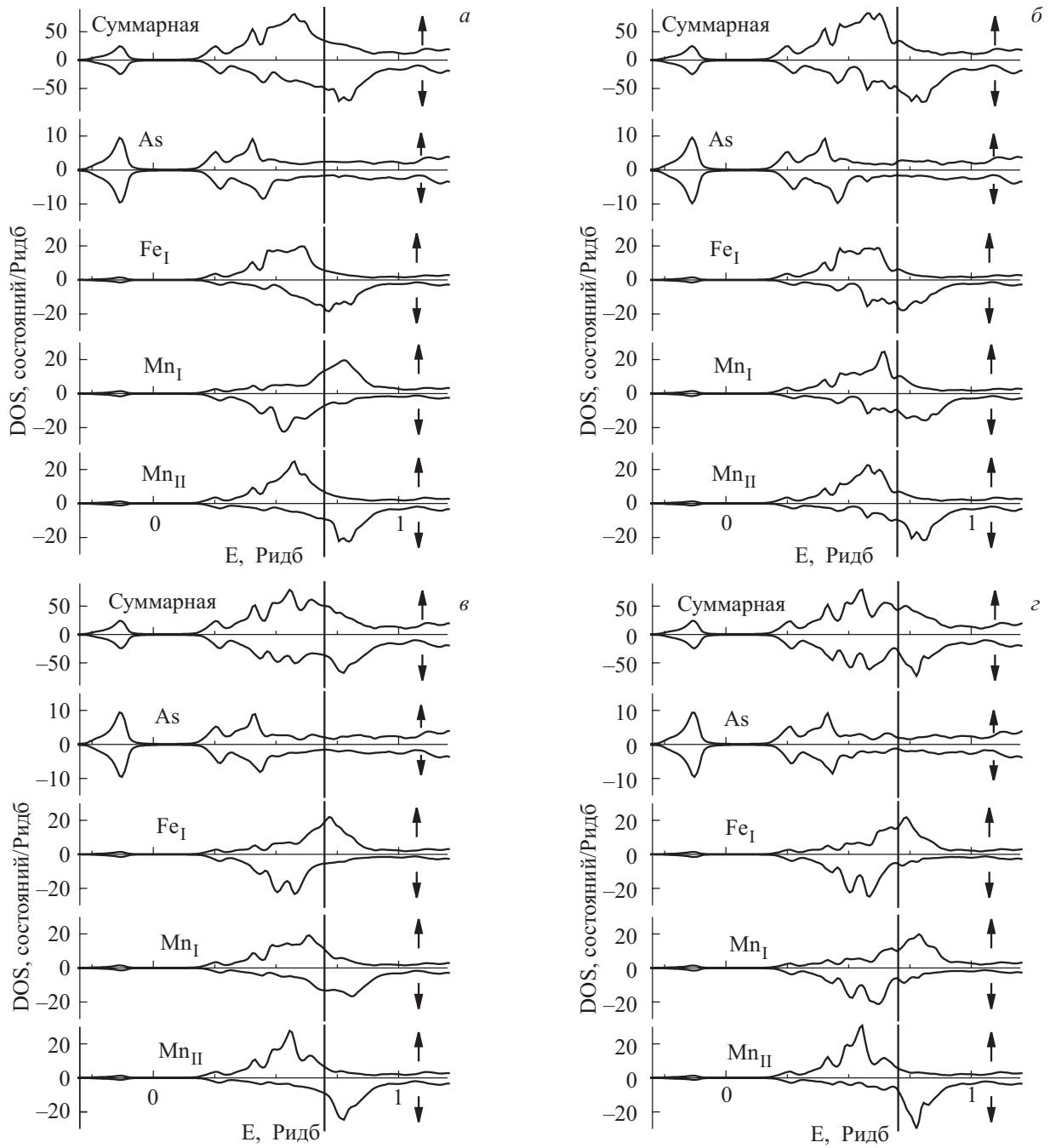


Рис. 4. Парциальные плотности состояний $\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$ для структур FIM-I (а), FM (б), FIM-II (в), FIM-III (г). Вертикальной линией обозначен уровень Ферми.

антипараллельной и параллельной ориентации соответственно). Этим, на наш взгляд, можно объяснить то изменение магнитного момента в узле I, о котором упоминается в [5]. В то же время магнитный момент Mn_{II} слабо зависит и от типа коллинеарной конфигурации (он меняется от $3\mu_B$ до $3,44\mu_B$), и от состава. Как видно из данных табл. 2, с ростом концентрации Mn меняется расстояние между ферромагнитными конфигурациями по энергии. Так, при $x = 1,29$ наименьшей энергией обладает FIM-I, несколько выше

лежит FM, затем FIM-III и еще выше FIM-II. При $x = 1,31$ порядок конфигураций не меняется, но расстояния между конфигурациями FIM-I, FM и FIM-III заметно уменьшаются. При $x = 1,35$ меняется их порядок по энергии: FIM-I, FIM-III, FM, FIM-II, что говорит о возможном изменении типа индуцированной в сильном магнитном поле магнитной конфигурации при увеличении концентрации Mn.

Экспериментальная зависимость намагниченности насыщения в расчете на формульную единицу в силь-

Таблица 2. Характеристики коллинеарных магнитных конфигураций, по данным расчетов

Тип структуры	$M(\text{Fe}_I), \mu_B$	$M(\text{Mn}), \mu_B$	$\langle M_I \rangle, \mu_B$	$M(\text{Mn}_{II}), \mu_B$	$M_I + M_{II} + M_A, \mu_B$	$E - E_{FM}/\text{форм. ед.}, \text{Ридб}$
$\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$, $a = 3,75 \text{ \AA}$, $c = 6,178 \text{ \AA}$, $E_{FM}/\text{форм. ед.} = -9304, 507065 \text{ Ридб}$						
FM	2,2073	2,2132	2,2090	2,9538	5,0172	0,0
FIM-I	2,2057	-2,6262	0,8045	3,0928	3,8087	-0,0006
FIM-II	-2,0855	2,3847	-0,7891	3,2608	2,4481	0,00525
FIM-III	-1,9789	-2,3288	-2,0804	3,4044	1,3441	0,000105
AF1-1	2,2858	2,4716	2,3397	3,0194	5,2792	-0,00309
AF1-2	2,2147	-2,5858	0,8226	3,0667	3,8613	-0,00177
AF2-1	-2,1334	-2,3673	-2,2012	3,3155	1,1782	0,00547
AF2-2	-2,0750	2,4547	-0,7614	3,2019	2,4677	0,007235
$\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$, $a = 3,753 \text{ \AA}$, $c = 6,194 \text{ \AA}$, $E_{FM}/\text{форм. ед.} = -9299, 94334 \text{ Ридб}$						
FM	2,2269	2,2280	2,2272	2,9740	5,0554	0,0
FIM-I	2,2216	-2,6444	0,7131	3,1161	3,7447	-0,00046
FIM-II	-2,1036	2,4216	-0,7008	3,2704	2,5696	0,00549
FIM-III	-1,9997	-2,3477	-2,1076	3,4187	1,3392	0,00006
$\text{Fe}_{0,65}\text{Mn}_{1,35}\text{As}$, $a = 3,76 \text{ \AA}$, $c = 6,225 \text{ \AA}$, $E_{FM}/\text{форм. ед.} = -9290, 8149 \text{ Ридб}$						
FM	2,2647	2,2634	2,2642	3,0209	5,1390	0,0
FIM-I	2,2525	-2,6794	0,5263	3,1623	3,6108	-0,001
FIM-II	-2,1398	2,4867	-0,5205	3,2913	2,7377	0,0051
FIM-III	-2,0407	-2,3886	-2,1625	3,4469	1,3136	-0,0009

ных магнитных полях ($H \approx 530\text{--}560 \text{ кЭ}$) изменяется от $1,96\mu_B$ для $\text{Fe}_{0,71}\text{Mn}_{1,29}\text{As}$ до $2,785\mu_B$ для $\text{Fe}_{0,65}\text{Mn}_{1,35}\text{As}$ [6]. Согласно расчетам (табл. 2), такое возрастание магнитного момента соответствует только конфигурации FIM-II. С этой точки зрения высокополевые фазы наиболее близки к типу FIM-II.

Следует отметить, что рассчитанные значения намагниченности для всех коллинеарных конфигураций больше, чем экспериментальные [6]. Это может быть связано с тем, что даже в магнитных полях порядка 550 кЭ в этих материалах не достигается коллинеарный ферромагнетизм и сохраняется антиферромагнитная компонента полного магнитного момента, приводящая к сохранению неколлинеарности ферромагнитного состояния. Такая точка зрения согласуется с модельными кривым намагничивания, которые получены при помощи рассчитанной из первых принципов немагнитной плотности электронных состояний $\text{DOS}(E)$ для образца $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$ [12].

Заключение

В настоящей работе проведено исследование электронной и магнитной структур $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ при $x = 1,29; 1,31; 1,35$. Рассмотрены различные варианты коллинеарных магнитных конфигураций, магнитные моменты которых лежат в базисной плоскости.

Установлено, что в рассмотренном сплаве носители магнетизма активно участвуют в явлениях переноса, и локальные магнитные моменты на соответствующих центрах, которые могут непосредственно фиксироваться методами нейтронной дифракции, образуются коллективизированными $3d$ -электронами в результате контактного внутриатомного обменного взаимодействия.

Обнаружена возможность антиферромагнитного фазового перехода, связанного с изменением ориентации магнитных моментов атомов Mn_I , при сохранении AF1-структуры. Такой переход выражается в изменении величины среднего магнитного момента в узле I при сохранении магнитного момента Mn_{II} .

Обнаружено хорошее согласие между расчетными (табл. 2) и экспериментальными ($M_I = 1,01\mu_B$, $M_{II} =$

$= 3,17\mu_B$) значениями полных величин магнитных моментов в позициях I, II.

С другой стороны, выявлено противоречие между расчетами энергетической стабильности антиферромагнитных конфигураций и нейтронографическими данными о магнитной структуре антиферромагнитной фазы сплава $\text{Fe}_{0,72}\text{Mn}_{1,28}\text{As}$, близкого по составу к исследуемому. Возможно, это противоречие может стимулировать дальнейшие нейтронографические исследования системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$.

Из анализа рассчитанных зависимостей намагниченности ферромагнитных конфигураций от концентрации марганца показано, что как минимум одна из них (FIM-II) качественно удовлетворяет экспериментальным результатам, полученным в очень сильных импульсных магнитных полях.

Работа выполнена в рамках исследований проекта №14.1/024 ГФФИ Украины.

1. S. Yoshii and H. Katsuraki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **22**, 674 (1967).
2. T. Kanomata, T. Goto, and H. Ido, *J. Phys. Soc. Jpn.* **43**, 1178 (1977).
3. R.M. Rosenberg, W.H. Cloud, F.J. Darnell, R.B. Flippen, and S.R. Butler, *J. Appl. Phys.* **40**, 1361 (1969).
4. T. Goto, *J. Magn. Magn. Mater.* **51–57**, 931(1986).
5. V. Baron, M. Neronin, H. Rundlof, and R. Tellgren, *J. Magn. Magn. Mater.* **169**, 271 (1997).
6. В.И. Вальков, И.Ф. Грибанов, А.В. Головчан, Б.М. Тодрис, *ФНТ* **31**, 1277 (2005).
7. K. Sugiyama, T. Kanomata, H. Ido, and M. Date, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 1558 (1988).
8. Z. Yang, K. Zhang, and X. Xie, *Phys. Rev.* **B58**, 339 (1998).
9. J. Tobola, M. Vacmann, D. Fruchart, P. Wolfers, S. Kaprzyk, and A.A. Koumina, *J. Alloys Comp.* **317–318**, 274 (2001).
10. The Munich SPR-KKR package, version 3.6, H. Ebert et al., <http://olymp.cup.uni-muenchen.de/ak/ebert/SPRKKR>; H. Ebert, in: *Lecture Notes in Physics*, H. Dreysre (ed.), Springer, Berlin (2000), vol. 535, p. 191.
11. S.H. Vosko and L. Wilk, *Phys. Rev.* **B22**, 3812 (1980).
12. В.И. Вальков, А.В. Головчан, *ФНТ* **33**, 1109 (2007).

Electronic structure of collinear states in magnetically ordered phases of some alloys of system $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$

V.I. Val'kov and A.V. Golovchan

The electronic and magnetic structures of some $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ alloys with tetragonal crystal structure $C38$ (symmetry group $P4/nmm$) were investigated from the first principles by using SPRKKR program package. Different types of collinear antiferromagnetic ($x = 1.29$) and ferrimagnetic ($x = 1.29$; 1.31; 1.35) structures with the atomic magnetic moments that are in the basic plane of the tetragonal lattice were considered. It is shown that the minimum energy in $\text{Fe}_{0.71}\text{Mn}_{1.29}\text{As}$ has an antiferromagnetic structure of Fe_2As type. To determine a possible magnetic structure of the ferrimagnetic phase induced in these alloys by strong magnetic field, four possible ferrimagnetic configurations with the magnetic unit cell coinciding with the crystallographic one were studied. It is found, that the Mn concentration dependence of magnetization for one of the configurations is in qualitative agreement with experimental data. It is shown that for each of the antiferromagnetic and ferrimagnetic configurations considered the change of magnetic alignment does not affect noticeably the value of magnetic moments. From the comparison of our data with different experimental results it follows that it is worth while to perform a more refined neutron diffraction study of the $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ system at $1.29 \leq x \leq 1.52$.

PACS: 71.20.Lp Intermetallic compounds;
71.20.Be Transition metals and alloys;
75.50.Ee Antiferromagnetics;
75.50.Gg Ferrimagnetics;
75.10.Lp Band and itinerant models.

Keywords: pnictides, antiferromagnetics, ferrimagnetics, electronic structure, density of electronic states.