

Электронный механизм структурных фазовых переходов в арсениде марганца

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 26 января 2004 г., после переработки 10 марта 2004 г.

Проведено обобщение спин-флуктуационной теории магнетизма для магнетиков со сложной кристаллической и магнитной структурой. Получено выражение для свободной энергии системы коллективизированных p -, d -электронов, описываемой гамильтонианом Хаббарда, при учете статических смещений ионных остовов, приводящих к изменению симметрии решетки. При расчете свободной энергии использовано приближение однородных локальных полей. Разработанный подход применен для изучения конкуренции магнитного и структурного параметров порядка в ферромагнитном MnAs при $T = 0$. Показано, что появление структурных искажений исходной никель-арсенидной решетки (отличного от нуля параметра структурного порядка) приводит к понижению средней энергии зонных электронов. Конкуренция электронной энергии и энергии ион-ионного взаимодействия обеспечивает возможность стабилизации этих искажений. Взаимодействие параметров структурного и магнитного порядков ответственно за подавление структурных искажений. Показано, что появление в системе намагниченности (спонтанной или индуцированной магнитным полем) может привести к восстановлению исходной никель-арсенидной структуры. Подобный магнитоструктурный переход наблюдается экспериментально.

Проведено узагальнення спин-флуктуаційної теорії магнетизму для магнетиків зі складною кристалічною та магнітною структурою. Отримано вирази для вільної енергії системи колективізованих p -, d -електронів, яка описується гамільтоніаном Хаббарда, при врахуванні статичних зсувів іонних остовів, що приводить до зміни симетрії ґратки. При розрахунку вільної енергії використано наближення однорідних локальних полів. Розроблений підхід застосовано для вивчення конкуренції магнітного та структурного параметрів порядку в феромагнітному MnAs при $T = 0$. Показано, що виникнення структурних викривлень вихідної нікель-арсенідної ґрати (відмінного від нуля параметру структурного порядку) приводить до зниження середньої енергії зонних електронів. Конкуренція електронної енергії та енергії іон-іонної взаємодії забезпечує можливість стабілізації цих викривлень. Взаємодія параметрів структурного та магнітного порядків відповідає за пригнічення структурних викривлень. Показано, що поява в системі намагніченості (спонтанної або індукованої магнітним полем) може привести до відновлення вихідної нікель-арсенідної структури. Подібний магнитоструктурний перехід спостерігається експериментально.

PACS: 75.10.Lp

1. Введение

В последнее время вновь возрастает интерес к изучению электронной структуры арсенида марганца как одного из компонентов системы $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$, являющейся перспективным материалом для спинтроники [1–3]. Поэтому актуальной остается проблема взаимосвязи структурных и магнитоструктур-

ных фазовых переходов (ФП) в арсениде марганца, до сих пор не получившая микроскопического обоснования. Структурный ФП типа смещения из парамагнитного (ПМ) состояния с гексагональной кристаллической структурой $B8_1$ (пространственная группа $P6_3/mmc$) в ПМ состояние с ромбической кристаллической структурой $B31$ (пространствен-

ная группа P_{nma}) является переходом второго рода и происходит при $T_t = 400$ К. Магнитоструктурный ФП первого рода из ПМ фазы $B31$ в ферромагнитную (ФМ) фазу $B8_1$ происходит при $T_C = 313$ К и сопровождается большим магнитообъемным эффектом. Температуры ФП смещаются под действием магнитного поля и гидростатического давления.

В феноменологических моделях фазовых переходов в арсениде марганца [4–7] на основе симметрично-группового анализа определены магнитные и структурные параметры порядка и установлен ряд важных, экспериментально проверяемых соотношений между симметрией кристаллической решетки, упругими постоянными и магнитными состояниями системы, определяющими фазовую P – T – H -диаграмму. Естественно, что в этом и других [8] подходах механизм структурных и магнитоструктурных превращений не может быть понят, а магнитные и кристаллоструктурные свойства рассматриваются вне взаимосвязи с зонной структурой. Однако даже в работах [2,3,9–14], в которых учитывалась коллективизация носителей магнетизма и проводились расчеты из первых принципов зонной структуры $MnAs$, для кристаллографических фаз $B8_1$ (ПМ, ФМ) и $B31$ (ПМ) механизм возникновения парамагнитного структурного $B8_1$ (ПМ) \leftrightarrow $B31$ (ПМ) и магнитоструктурного $B8_1$ (ФМ) \leftrightarrow $B31$ (ПМ) фазовых переходов не был раскрыт. Так, например, в [13] основное внимание уделено моделированию некоторых особенностей магнитного поведения $MnAs$, обусловленных структурным переходом $B8_1$ (ПМ) \leftrightarrow $B31$ (ПМ). Однако расчеты проведены в рамках спин-флуктуационной теории для однозонного гамильтониана Хаббарда с использованием модельной кусочно-линейной аппроксимации для электронной плотности состояний. При этом свободная энергия системы построена без введения параметра структурного порядка, что не позволило энергетически обосновать возможность возникновения структуры $B31$.

Цель настоящей работы:

1) расчет свободной энергии системы взаимодействующих электронов в решетке с базисом при учете флуктуирующих ферромагнитного и структурного параметров порядка;

2) анализ возможности возникновения кристаллоструктурного и магнитоструктурного ФП в $MnAs$ как следствия определенной зависимости зонной энергии p -, d -электронов от структурной конфигурации атомов Mn и As .

Вначале целесообразно рассмотреть проблемы ФП в $MnAs$ с позиции симметрично-группового подхода, для чего проанализируем результаты работ [5–7].

2. Симметричный анализ магнитных и кристаллографических переходов в $MnAs$

Наиболее последовательное феноменологическое описание ФП в арсениде марганца было проведено в [5–7]. В этих работах определены параметры структурного и магнитного порядков и построены инварианты, описывающие их взаимосвязь и связь с упругими деформациями решетки относительно наиболее симметричной никель-арсенидной кристаллической структуры ПМ($B8_1$). В работах [6,7] в качестве магнитного и структурного параметров порядка выбраны вектор ферромагнетизма \mathbf{m} и компонента неприводимого вектора смещения марганца $\phi = g_z/b\sqrt{3}$ из наборов неприводимых магнитных векторов (1) и неприводимых векторов смещений магнитных ионов (2) для элементарной кристаллохимической ячейки исходной ПМ фазы ($B8_1$) в ромбической установке (рис. 1,а):

$$\begin{aligned} m_1 &= M_1 + M_2 + M_3 + M_4 = m, \\ m_2 &= M_1 - M_2 + M_3 - M_4, \\ m_3 &= M_1 + M_2 - M_3 - M_4, \\ m_4 &= M_1 - M_2 - M_3 + M_4; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} f &= u_1 + u_2 + u_3 + u_4, \\ g &= u_1 - u_2 + u_3 - u_4, \\ c &= u_1 + u_2 - u_3 - u_4, \\ a &= u_1 - u_2 - u_3 + u_4; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} f_1 &= u_5 + u_6 + u_7 + u_8, \\ g_1 &= u_5 - u_6 - u_7 + u_8, \\ c_1 &= u_5 + u_6 - u_7 - u_8, \\ a_1 &= u_5 - u_6 + u_7 - u_8; \end{aligned} \quad (3)$$

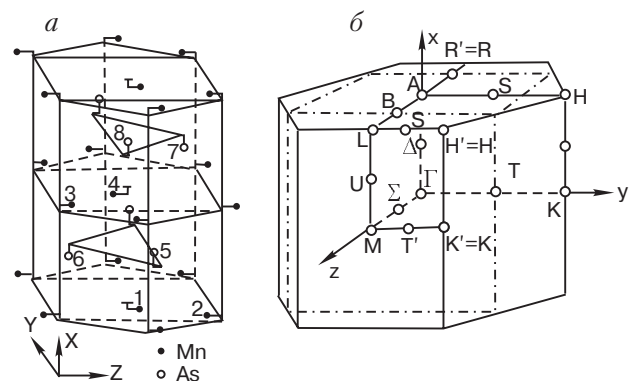


Рис. 1. а – Элементарная кристаллографическая ячейка $MnAs$ в ромбической установке. б – Зона Бриллюэна исходной никель-арсенидной решетки (сплошные линии) с пространственной группой симметрии $P6_3/mmc$. В результате структурного перехода $P6_3/mmc$ – P_{nma} границы зоны Бриллюэна сжимаются вдоль оси z . Новые границы показаны штрих-пунктирной линией.

M_i — намагниченность i -той магнитной подрешетки системы MnAs, u_n — вектор смещения атомов n -й подрешетки, $|u_n| = |u_{n'}|$, $n \in 1-4$; $|u_m| = |u_{m'}|$, $m \in 5-8$.

Согласно [6], выражение для полной плотности неравновесного термодинамического потенциала (ПТП) системы Ω не учитывает энергетических вкладов от смещений мышьяка и имеет вид

$$\Omega = \Omega(m) + \Omega(\varphi) + \Omega(u) + \Omega(m, u) + \Omega(u, \varphi) + \Omega(m, \varphi), \quad (4)$$

где $\Omega(m)$ и $\Omega(\varphi)$ — ПТП магнитной и структурно-искаженной решеточной подсистем; $\Omega(u)$ и $\Omega(m, u)$ — плотности упругой и магнитоупругой энергии; $\Omega(\varphi, u)$ и $\Omega(\varphi, m) = \frac{1}{2} \delta m^2 \varphi^2$ — ПТП, характеризующие связь структурных искажений с упругими деформациями u и намагниченностью m соответственно. При этом постулируется, что коэффициенты $a_m(T)$ и $a_\varphi(T')$ при квадратичных членах разложения $\Omega(m)$ и $\Omega(\varphi)$ в степенной ряд по m и φ линейно зависят от температуры и при ее понижении могут изменить знак. Рассчитанные на основании ПТП (4) фазовые диаграммы описывают последовательность структурного и магнитоструктурного переходов $P6_3/mmc(\text{ПМ})-P_{nma}(\text{ПМ})-P6_3/mmc(\text{ФМ})$, но, очевидно, причина изменения знака $a_\varphi(T')$ и физическая природа коэффициента δ , а значит, и механизм этих переходов остаются за пределами этого подхода.

Ниже рассмотрена модель магнитоструктурных переходов в арсениде марганца с позиции единой энергетической основы — электронной зонной структуры, ответственной за особенности структурных, магнитных и транспортных свойств. При этом, в отличие от [6], учтено, что реальный переход $B8_1-B31$ сопровождается двухкомпонентными смещениями ионов марганца и мышьяка вдоль осей z и x . Для марганца эти смещения описываются неприводимым вектором смещений \mathbf{g} , а для мышьяка — \mathbf{a}_1 (2), (3). Поэтому количественной мерой искажений решетки $B8_1$ могут быть значения параметров $\varphi = \pm |g_z|/c$, $\varepsilon = \pm |g_x|/a \ll \varphi$ для марганца и $\varphi_1 = \pm |a_{1x}|/a$, $\varepsilon_1 = \pm |a_{1z}|/c \ll \varphi_1$ для мышьяка, построенные из термодинамически усредненных значений индивидуальных смещений ионов u_n . Тогда математическое описание структурного перехода $B8_1-B31$ состоит из расчета свободной энергии системы ионов и коллективизированных электронов как функции этих параметров $F(\varphi, \varepsilon, \varphi_1, \varepsilon_1)$ и выяснения условий появления минимума этой функции при отличных от нуля значениях аргументов. При этом в практических вычислениях ограничимся использованием только параметров φ и φ_1 .

3. Гамильтониан системы

Поскольку результаты экспериментальных и теоретических исследований MnAs указывают на локальный характер формирования спиновой плотности [9,11] и участие d -электронов в создании зоны проводимости [9,10], для описания магнитных свойств MnAs целесообразно использовать гамильтониан Хаббарда [15].

Гамильтониан Хаббарда для магнетика с несколькими ионами в элементарной ячейке, допускающей смещение этих ионов к новому положению равновесия, имеет вид

$$H_e = H_0 + H_1, \quad (5)$$

$$H_0 = \sum_{i,j} \sum_{\sigma m, n'} \sum_{j m'} t_{nim, n' j m'} (\varphi, \varphi_1) a_{ni, m\sigma}^+ a_{n' j, m' \sigma} = \sum_{k, \sigma} \sum_{n, n'} \sum_{m, m'} \gamma_{nm, n' m'} (k, \varphi, \varphi_1) c_{nm, k\sigma}^+ c_{n' m', k\sigma}, \quad (6)$$

$$t_{inm, jn' m'} (\varphi, \varphi_1) = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{nm, n' m'} (\mathbf{k}, \varphi, \varphi_1) \times \exp \{i\mathbf{k} (\mathbf{R}_{in} - \mathbf{R}_{jn'})\}, \quad (7)$$

$$a_{ni, m\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_k c_{nk, m\sigma} \exp (ikR_{ni}), \quad (8)$$

$a_{nm, j\sigma}^+ / a_{nm, j\sigma}$ — фермиевские операторы рождения/уничтожения электрона на m -й орбитали n -го иона в j -й ячейке с проекцией спина σ на ось квантования z , $\sum_j = N_0$ — число элементарных ячеек с $\sum_n = N_L = 8$ атомами на ячейку (4 атома Mn и 4 атома As); R_{ni} — вектор трансляций n -й подрешетки в ромбической установке, интегралы переноса $t_{nim, n' j m'} (\varphi, \varphi_1)$ рассчитываются по Харрисону [16]. Позиции атомов марганца и мышьяка в ромбической ячейке с учетом смещений, описываемых параметрами φ и φ_1 , приведены в табл. 1. Параметры

Таблица 1

Позиции атомов в структуре $B31$

№	Позиции Mn	№	Позиции As
1	$(0, 0, \frac{c\varphi}{4})$	5	$(\frac{a}{4}(1 + \varphi_1), \frac{b}{2}, \frac{c}{6})$
2	$(0, \frac{b}{2}, \frac{c}{2} - \frac{c\varphi}{4})$	6	$(\frac{a}{4}(1 - \varphi_1), 0, -\frac{c}{3})$
3	$(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2} + \frac{c\varphi}{4})$	7	$(\frac{a}{2} + \frac{a}{4}(1 - \varphi_1), 0, \frac{c}{3})$
4	$(\frac{a}{2}, 0, -\frac{c\varphi}{4})$	8	$(\frac{a}{2} + \frac{a}{4}(1 + \varphi_1), \frac{b}{2}, -\frac{c}{6})$

решетки определены так, что $a||x, b||y, c||z$ ($c = b\sqrt{3}$) (рис. 1,а).

Выражения (5)–(8) учитывают только средние смещения ионов, описываемые параметрами φ, φ_1 . Взаимодействием электронов с тепловыми флуктуациями смещений δu_{ni} пренебрегаем.

Гамильтониан внутриионного взаимодействия электронов H_1 запишем в виде

$$H_1 = -J \sum_j \sum_{n \in M_n} (\mathbf{S}_{nj})^2 + \mathbf{H} \sum_j \sum_{n \in M_n} \mathbf{S}_{nj} \equiv -\frac{1}{4} J \sum_{l,j} (\mathbf{M}_{l,j})^2 + g \mathbf{H} \sum_j \mathbf{M}_{1,j}, \quad (9)$$

$$S_{nj}^\alpha = \sum_m S_{nmj}^\alpha, \quad (10)$$

$$S_{nmj}^\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} a_{nm,j\sigma}^+ \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha a_{nm,j\sigma'}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} M_{1j} &= S_{1j} + S_{2j} + S_{3j} + S_{4j}, \\ M_{2j} &= S_{1j} - S_{2j} + S_{3j} - S_{4j}, \\ M_{3j} &= S_{1j} + S_{2j} - S_{3j} - S_{4j}, \\ M_{4j} &= S_{1j} - S_{2j} - S_{3j} + S_{4j}. \end{aligned} \quad (12)$$

В выражении для гамильтониана внутриионного взаимодействия электронов H_1 , представленного в двух эквивалентных формах, индекс n нумерует только магнитоактивные ионы марганца ($n \in 1-4$). Использование второй формы, на наш взгляд, более рационально для соединений, содержащих несколько магнитоактивных ионов в кристаллохимической ячейке j . Индексы l нумеруют четыре конфигурации спиновых операторов в ячейке j , соответствующие четырем неприводимым магнитным векторам (1); J – внутриионный обменный интеграл; \mathbf{H} – внешнее магнитное поле; $\tau_{\sigma\sigma'}$ – вектор матриц Паули, $g = -2$ – g -фактор электрона; $\alpha \in x, y, z$.

Полный модельный гамильтониан H системы коллективизированных электронов и ионов, учитывающий возможность изменения структурной конфигурации, запишем в виде

$$H = H_e(\varphi, \varphi_1) + W, \quad (13)$$

$$W = E_l + \frac{1}{2} \sum_{n,i,n',i'} A_{nin'i'} \exp(-|R_{ni} - R_{n'i'}|/\rho_{nm'}), \quad (14)$$

где энергия взаимодействия ионных остовов W содержит два вклада: энергию кулоновского взаимодействия точечных ионов, погруженных в нейтрализующий фон (первое слагаемое) и энергию ион-ионного отталкивания, обусловленную перекрытием их электронных плотностей (в форме Майера [17]).

Здесь R_{ni} – радиус-вектор иона ni , учитывающий средние значения смещений u_n и отклонения от средних δu_{ni} ; q_n – эффективный заряд иона n ; $A_{nin'i'}$ – параметры модели; $\rho_{nm'}$ – ионные радиусы. Для конкретных вычислений W удобно представить в виде разложения по отклонениям векторов смещений δu_{ni} , ограничившись гармоническим приближением

$$W = W_0(\varphi, \varphi_1) + \frac{1}{2} \sum_{n,i,\alpha,n',i',\alpha'} \frac{\partial^2 W(\varphi, \varphi_1)}{\partial \delta u_{ni\alpha} \partial \delta u_{n'i'\alpha'}} \times \delta u_{ni\alpha} \delta u_{n'i'\alpha'} \equiv W_0(\varphi, \varphi_1) + \Delta W(\varphi, \varphi_1, \delta u_{ni\alpha}, \delta u_{n'i'\alpha'}), \quad (15)$$

где первое слагаемое соответствует выражению (14) при средних значениях смещений $u_n, u_{n'}$, описываемых, как и в (7), (8), конфигурациями φ, φ_1 . Второе слагаемое может быть приведено к диагональному виду введением нормальных координат решетки $Q_l(q)$ ($l \in 3N_L$). Это основное слагаемое, определяющее температурно-зависимую часть свободной энергии решетки.

4. Свободная энергия

Свободная энергия системы с гамильтонианом (13) при постоянных давлении и объеме имеет вид

$$F = F_i\left(\varphi, \varphi, \frac{1}{\beta}\right) + F_e, \quad (16)$$

$$F_i\left(\varphi, \varphi, \frac{1}{\beta}\right) = W_0(\varphi, \varphi_1) + \Delta W\left(\varphi, \varphi, \frac{1}{\beta}\right), \quad (17)$$

$$\Delta W\left(\varphi, \varphi, \frac{1}{\beta}\right) = -\frac{1}{\beta} \ln \int \exp\{-\beta \Delta W(\varphi, \varphi, Q_l(q), Q_l'(q))\} \times dQ_{l_1}(q) \dots dQ_{l_{3n}}(q), \quad (18)$$

$$F_e = \Omega + \mu N, \quad N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad (19)$$

$$\Omega = \Omega_0 + \Delta \Omega, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \exp(-\beta \Omega_0) &= \text{Sp} \{ \exp(-\beta \tilde{H}_0) \} = \\ &= \text{Sp} \{ \exp[-\beta(H_0 - \mu N)] \}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\exp(-\Delta \Omega/T) = \left\langle T_\tau \exp \left[-\int_0^\beta H_1(\tau) d\tau \right] \right\rangle_{\tilde{H}_0}, \quad (22)$$

где $H_1(\tau) = \exp(\tau \tilde{H}_0) H_1 \exp(-\tau \tilde{H}_0)$,

$$\langle A \rangle_{\tilde{H}_0} = \text{Sp} \{ A \exp[\beta(\Omega_0 - \tilde{H}_0)] \}, \quad (23)$$

где \hat{A} — произвольный оператор, μ — химический потенциал, T_τ — оператор упорядочения по мнимому времени, Ω — термодинамический потенциал (ТП) системы, $\beta = 1/T$.

Расчет свободной энергии системы взаимодействующих электронов F_e — сложная многочастичная задача, один из методов решения которой основан на сведении ее к одночастичной задаче о взаимодействии электронов с флуктуирующими в пространстве и времени случайными полями [18]. Ниже этот метод будет применен для вычисления выражения (22), определяющего магнитный вклад $\Delta\Omega$ в полную свободную энергию F (о других подходах к данной проблеме см. в обзоре [19]).

Используя преобразование Стратоновича — Хаббарда [20, 21], выражение (22) можно представить в виде

$$\exp(-\beta\Delta\Omega) = \int \prod_{q \neq 0} \prod_l \frac{d\eta_{l,q}(\tau)}{\pi^3} \frac{d\eta_{l,0}(\tau)}{\pi^{3/2}} e^{-\beta\psi\{\eta_{l,q}\}}, \quad (24)$$

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_1,$$

$$\begin{aligned} \Psi_0 = & \beta^{-2} N_0 \sum_{q \neq 0} \sum_l \sum_{\alpha=+,-,z} \int_0^\beta |\eta_{l,q}^\alpha(\tau)|^2 d\tau + \\ & + \beta^{-2} N_0 \sum_{l,\alpha} \int_0^\beta \left| \eta_{l,0}^\alpha(\tau) - \frac{gH_l^\alpha}{C} \right|^2 d\tau, \quad (25) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_1 = & -\beta^{-1} \ln \left\langle T_\tau \exp \left(-\beta \sum_\alpha \tilde{H}_1^\alpha \right) \right\rangle_{\tilde{H}_0} = \\ = & -\beta^{-1} \left\langle T_\tau \exp \left(-\beta \sum_\alpha \tilde{H}_1^\alpha \right) \right\rangle_{\tilde{H}_{0,c}}, \quad (26) \end{aligned}$$

$$\eta_j(\tau) = \sum_{q,\omega} \eta_{q\omega} e^{-i(qR_j + \omega\tau)},$$

$$\eta_{q\omega} = (N_0\beta)^{-1} \sum_j \int_0^\beta \eta_j(\tau) e^{-i(qR_j + \omega\tau)} d\tau,$$

$$\text{где } \tilde{H}_1^\alpha = N_0\beta^{-1}C \sum_l \sum_q \int_0^\beta (\eta_{l,q}^{\alpha+}(\tau))^* M_{l,q}^\alpha(\tau) d\tau, \quad \alpha =$$

$= z, +, -; q$ — волновой вектор, принадлежащий пер-

вой зоне Бриллюэна для структуры B31; $C = \sqrt{J/\beta}$, $\eta_{lq}(\tau) = \sum_\omega \eta_{l,q\omega} e^{-i\omega\tau}$, $\eta_{l,q}^\pm(\tau) = \eta_{l,q}^x(\tau) \pm \eta_{l,q}^y(\tau)$, $M_{l,q}^\alpha(\tau)$ и $(\eta_{l,q}^{\alpha+}(\tau))^*$ — α -фурье-компонента оператора l -го неприводимого магнитного вектора (1) и сопряженная ей компонента флуктуирующего обменного поля.

Поскольку в настоящей работе рассмотрена низкотемпературная стабилизация единственной ФМ фазы, мы допускаем, что основной вклад в Ψ_1 и в ТП вносят фурье-компоненты $\eta_{1q}(\tau) \equiv \eta_q(\tau)$ поля η_{1j} , соответствующего ФМ конфигурации операторов спина M_{1j} . Вкладами остальных фурье-компонент полей $\eta_{l \neq 1,j}$, описывающих три типа антиферромагнитных (АФМ) конфигураций операторов спина, будем пренебрегать.

Существует много методов расчета функционала Ψ_1 . Однако большинство из них разработаны для достаточно простых гамильтонианов. В данной работе мы будем использовать приближение однородных локальных полей — подход, предложенный авторами [22] и получивший дальнейшее развитие в работах [23–25], так как его обобщение на случай магнетиков с несколькими магнитными атомами в элементарной ячейке является наименее трудоемким.

С учетом поправки второго порядка, учитывающей квадратичные флуктуации поля $\sum_{q\omega \neq 0} X_{q\omega} |\eta_{q\omega}|^2$, выражение $\Psi_1\{\eta, \varphi, \varphi_1\}$ в приближении однородных локальных полей для материала с элементарной ячейкой, базис которой содержит четыре «немагнитных» (As) и четыре «магнитных» (Mn) иона с неэквивалентными электронными p - d -состояниями Блоха, имеет вид

$$\Psi_1\{\eta, \varphi, \varphi_1\} = L(\eta, \varphi, \varphi_1) + \beta^{-1} \sum_{(q\omega) \neq 0} X_{q\omega} |\eta_{q\omega}|^2, \quad (27)$$

$$L\{\eta, \varphi, \varphi_1\} = -\beta^{-1} \sum_{S=1}^{32} \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_k \ln \{1 +$$

$$+ \exp[-\beta(E_{S\sigma}(k, \varphi, \varphi_1, C\eta/2) - \mu)] - \Omega_0\}, \quad (28)$$

где $E_{S\sigma}(k, \varphi, \varphi_1, C\eta/2)$ — «подмагниченный» случайным полем η энергетический спектр зонных электронов, который определяется из решения секулярного уравнения

$$\det \begin{vmatrix} \gamma_{nm,n',m'}^{\text{Mn-Mn}}(k, \varphi, \varphi_1) - \sigma C\eta/2 - E\delta_{nm,n'm'} & t_{nm,n',m'}^{\text{Mn-As}} \\ t_{nm,n',m'}^{\text{As-Mn}} & \gamma_{nm,n',m'}^{\text{As-As}}(k, \varphi, \varphi_1) - E\delta_{nm,n'm'} \end{vmatrix} = 0, \quad (29)$$

где матрицы $\gamma_{nm,n',m'}^{\text{Mn-Mn}}(k, \varphi, \varphi_1)$, $\gamma_{nm,n',m'}^{\text{As-As}}(k, \varphi, \varphi_1)$, $t_{nm,n',m'}^{\text{Mn-As}}(k, \varphi, \varphi_1)$, $t_{nm,n',m'}^{\text{As-Mn}}(k, \varphi, \varphi_1)$ имеют размеры 20×20 , 12×12 , 12×20 и 20×12 соответственно.

Вклад квадратичных длинноволновых флуктуаций поля может быть промоделирован функцией

$$F_e \{m, \varphi, \varphi_1\} = -\beta^{-1} \sum_{S, k, \sigma} \ln \left[1 + \exp \left\{ -\beta \left(E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g} \right) - \mu \right) \right\} \right] + \mu N + \frac{J}{4g^2} \sum_{(q, \omega) \neq 0} |\mathbf{m}_{q\omega}|^2 (1 + X_{q\omega}) + \frac{JN_0}{4g^2} \mathbf{M}^2 - \beta^{-1} \sum_{(q, \omega) \neq 0} \sum_{\alpha=x,y,z} \ln m_{q\omega}^\alpha, \quad (30)$$

$$m^2 = \left(\mathbf{M} + \frac{2g^2}{J} \mathbf{H} \right)^2 + \frac{1}{N_0} \sum_{(q, \omega) \neq 0} \mathbf{m}_{q\omega}^2, \quad (31)$$

где магнитный момент, определенный как $\mathbf{M} = -\partial F_e / \partial \mathbf{H}$, совпадает с перевалочным значением переменной \mathbf{M} .

5. Анализ механизма структурных переходов в MnAs

Основные положения рассматриваемой модели структурных переходов в MnAs опираются на экспериментальные факты и вытекающие из них очевидные следствия, наиболее важными среди которых являются следующие:

1) переход $B8_1-B31$, описываемый параметрами (φ, φ_1) , приводит к удвоению исходной элементарной ячейки $B8_1$ и изменению положения границ зоны Бриллюэна (рис. 1, б);

2) на новых границах зоны Бриллюэна может (в зависимости от структурных факторов подрешеток марганца и мышьяка) происходить снятие вырождения некоторых состояний электронного энергетического спектра и образование локальных щелей, разделяющих эти состояния.

Основные положения модели:

– Образование щелей, величина которых зависит от параметров (φ, φ_1) , приводит к понижению зонной энергии электронов. Предполагается, что это понижение особенно эффективно, если уровень Ферми пересекает часть щелей.

– Конкуренция между свободной энергией электронной подсистемы $F_e \{m, \varphi, \varphi_1\}$ и модельной энергией взаимодействия ионных остовов $F_i(\varphi, \varphi_1, 1/\beta)$ определяет температурный диапазон $(0 \leq T \leq T_t)$ стабильности структуры $B31$.

– Перераспределение электронов по спиновым подзонам, возникающее в результате появления од-

Линдхарда [23] $X_{q\omega} \cong aq^2 - ib\omega/q$ либо рассчитан точно (Приложение А).

После некоторых переобозначений переменных интегрирования $\eta_{q\omega}^\alpha$ и взятия интегралов (24) методом перевала окончательное выражение для свободной энергии электронной системы $F_e \{m, \varphi, \varphi_1\}$ приобретает вид (Приложение А)

нородной намагниченности, может стать причиной неустойчивости структуры $B31$ при $T < T_t$ и привести к магнитоструктурному переходу от $B31$ (ПМ) к $B8_1$ (ФМ).

Поскольку в настоящей работе мы анализируем принципиальную возможность структурного и магнитоструктурного переходов, дальнейшее рассмотрение проведем при $T = 0$. Проблемные вопросы, связанные с температурно-индуцированными структурным и магнитоструктурным переходами с использованием данной идеологии, не рассматриваем.

5.1. Выражение для свободной энергии при $T = 0$

При $T = 0$ свободная энергия системы в расчете на элементарную ячейку и уравнение для химического потенциала определяются выражениями, при выводе которых использовано соотношение

$$\sum_k = \frac{VN_0}{(2\pi)^3} \int d^3k:$$

$$F \{M, \varphi, \varphi_1\} = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{S, \sigma} \int d^3k E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{JM}{4g} \right) \times \Theta \left(\mu - E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{JM}{4g} \right) \right) + \frac{J}{4g^2} M^2 + \frac{W(\varphi, \varphi_1)}{N_0} + W_1(\varphi, \varphi_1), \quad (32)$$

$$\frac{N}{N_0} = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \int d^3k \Theta \left(\mu - E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{JM}{4g} \right) \right), \quad (33)$$

Выражение (32) можно рассматривать как неравновесную свободную энергию системы, характеризуемую двумя структурными (φ, φ_1) и одним магнитным M параметрами порядка, равновесные значения которых соответствуют минимуму $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$; V — объем элементарной ячейки кристалла; N_0 — число элементарных ячеек в кристалле; $\Theta(x)$ — функция Хэвисайда;

$$W_1(\varphi, \varphi_1) = K(\varphi^2 + \varphi_1^2), \quad (34)$$

$W_1(\varphi, \varphi_1)$ — поправка к $W(\varphi, \varphi_1)/N_0$, обусловленная использованием «грубого» приближения для энергии ион-ионного отталкивания, не учитывающего несферичность ионного потенциала и тонкую структуру косвенного ион-ионного взаимодействия.

5.2. Влияние структурных искажений на свободную энергию

На рис. 2 приведены контурные диаграммы $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$ в координатах (φ, φ_1) , рассчитанные при двух фиксированных значениях магнитного момента на ячейку. Во всех расчетах число электронов на ячейку равно $N/N_0 = 40$ ($N/N_0 = 4(n_p + n_d)$, где число p -электронов $As\ n_p = 3$, а эффективное число d -электронов $Mn\ n_d = 7$ за счет перехода s -электронов Mn в зону проводимости), а значения расчетных параметров приведены в табл. 2.

Как видно на рисунках, минимум свободной энергии достигается при $\varphi = \varphi_1 = 0,2$ для $M = 0$ и при $\varphi = \varphi_1 = 0$ для $M = 10\ \mu_B$.

Из этих графиков следует, что, во-первых, кристаллическая структура $B31$ соответствует минимуму свободной энергии для немагнитной системы. Во-вторых, под действием обменного расщепления, которое индуцируется внешним магнитным полем или спонтанной намагниченностью, возможен магнитоструктурный переход $B31-B8_1$. Более наглядно эти процессы иллюстрирует рис. 3,а, на котором показана зависимость $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$ вдоль линии $\varphi = \varphi_1$ при различных значениях M . Причину подобного поведения системы поясняет рис. 3,б, на котором приведены зависимости средней энергии зонных

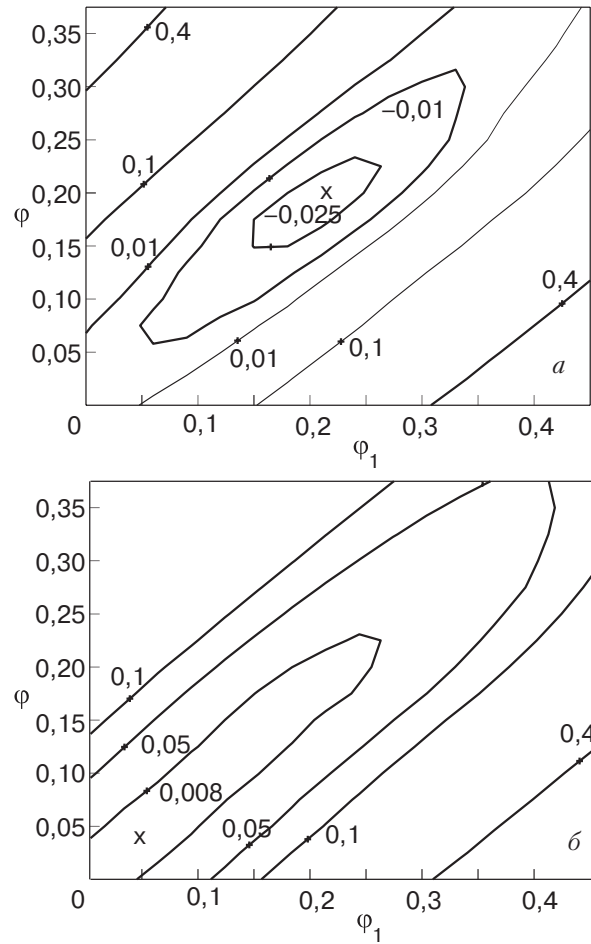


Рис. 2. Зависимость свободной энергии в расчете на элементарную ячейку от величины параметров структурного порядка (φ, φ_1) для различных значений величины магнитного момента элементарной ячейки M, μ_B : 0 (а), 10 (б); \times — положение минимума.

электронов $E(M, \varphi, \varphi_1)$ (первое слагаемое в (32)) вдоль линии $\varphi = \varphi_1$ при различных значениях намагниченности M . Из сравнения кривых 4 ($M = 0$) и 5 ($M = 10\ \mu_B$) видно, что обе зависимости являются спадающими функциями параметра $\varphi = \varphi_1$, однако скорость понижения больше в случае $M = 0$. Поэтому сумма зависимостей 4 и 6 позволяет достичь минимума $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$ при $\varphi \neq 0$ (кривая 1 на

Таблица 2

Параметры, использованные для расчета контурных диаграмм

Величина	K , Ридб	A_{As-As} , Ридб	A_{Mn-Mn} , Ридб	A_{Mn-As} , Ридб	q_{Mn}, e
Значение	0,35	0,5	1,0	3,0	0,6
Величина	$\rho_{Mn-As}, \text{Å}$	$\rho_{Mn-Mn}, \text{Å}$	$\rho_{As-As}, \text{Å}$	q_{As}, e	J , Ридб
Значение	0,8	0,86	0,69	1,0	0,02
Величина	$a(B8_1), \text{Å}$	$c(B8_1), \text{Å}$	$a(B31), \text{Å}$	$b(B31), \text{Å}$	$c(B31), \text{Å}$
Значение	3,72	5,72	5,72	3,72	$b(B31)\sqrt{3}$

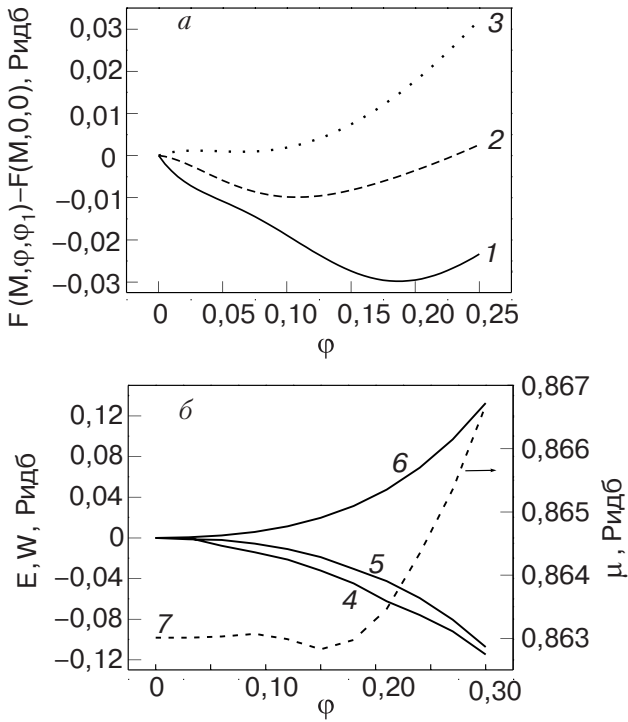


Рис. 3. *а* – Влияние магнитного момента M элементарной ячейки на устойчивость структуры $B31$ вдоль направления $\varphi_1 = \varphi$: зависимости приведенной свободной энергии от структурных параметров порядка для $M = 0$ (1); $5 \mu_B$ (2); $10 \mu_B$ (3). *б* – Зависимость от структурных параметров порядка при условии $\varphi_1 = \varphi$ различных вкладов в свободную энергию: приведенной средней энергии зонных электронов $E(M, \varphi, \varphi) - E(M, 0, 0)$ для $M = 0$ (4) и $10 \mu_B$ (5); приведенной энергии взаимодействия ионных остовов $W(\varphi, \varphi) - W(0, 0)$ (6); химического потенциала μ при $M = 0$ (7).

рис. 3,а); аналогичная сумма для кривых 5 и 6 дает кривую 3, для которой минимум $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$ достигается при $\varphi = \varphi_1 = 0$.

5.3. Влияние искажений на стабилизацию магнитного состояния

Проанализируем зависимости $F\{M, \varphi, \varphi_1\}$ при различных значениях параметров структурного порядка φ, φ_1 на рис. 4.

1. Увеличение степени искажений (модулей φ, φ_1) приводит к уменьшению равновесного значения магнитного момента (кривые 2, 8, 9) или к полному его подавлению (кривая 3).

2. Наиболее существенное воздействие на стабильность магнитного порядка оказывают искажения подрешетки марганца φ (кривые 2, 3).

3. Искажения подрешетки мышьяка φ_1 практически не изменяют магнитное состояние системы (кривые 6, 8). По-видимому, это связано с тем, что в рамках рассматриваемой модели магнетизм обусловлен обменным расщеплением электронных со-

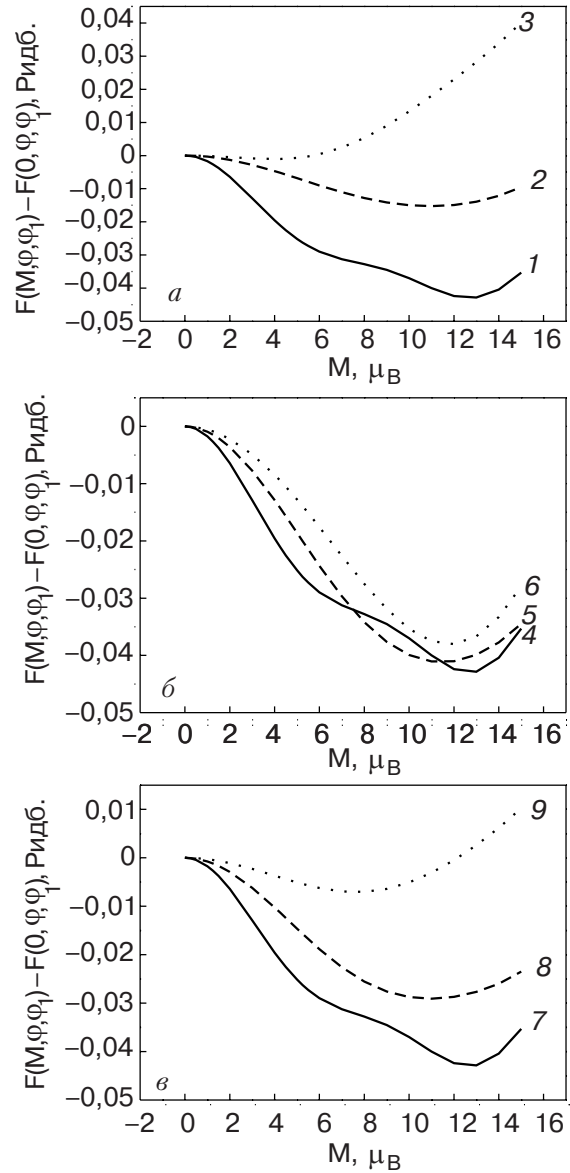


Рис. 4. Влияние параметров структурного порядка на устойчивость магнитоупорядоченного состояния: $\varphi = 0, \varphi_1 = 0$ (кривые 1, 4, 7); $\varphi = 0,1, \varphi_1 = 0$ (2); $\varphi = 0,3, \varphi_1 = 0$ (3); $\varphi = 0, \varphi_1 = 0,1$ (5); $\varphi = 0, \varphi_1 = 0,4$ (6); $\varphi = 0,05, \varphi_1 = 0,05$ (8); $\varphi = 0,2, \varphi_1 = 0,3$ (9).

стояний, генетически близких к d -состояниям марганца и поэтому наиболее чувствительных к смещениям ионов марганца.

5.4. Влияние структурных искажений на плотность состояний

Характер изменения плотности электронных состояний $g_{\sigma}(\epsilon, \varphi, \varphi_1, M)$ в результате структурных переходов может быть прослежен из расчетных кривых (рис. 5), вычисленных при различных значениях величин структурных и магнитных параметров порядка:

$$g_{\sigma}(\varepsilon, \varphi, \varphi_1, M) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{s}} \int d^3k \delta \left[\varepsilon - E_{S\sigma} \left(\mathbf{k}, \varphi, \varphi_1, \frac{JM}{4g} \right) \right], \quad (35)$$

где интегралы в правой части вычислялись методом тетраэдров [26].

Как видно на рис. 5, *в, з*, возникновение структурных искажений ($M = 0$) приводит к расщеплению основного пика $g_{\sigma}(\varepsilon)$ и уменьшению ее значения на уровне Ферми. Эти особенности поведения плотности состояний проявляются на магнитных характеристиках MnAs. При этом основную роль играют значения первой и второй производных плотности состояний по энергии на уровне Ферми:

$$g' = (\partial g_{\sigma}(\varepsilon, \varphi, \varphi_1, 0) / \partial \varepsilon)_{\varepsilon = \varepsilon_F},$$

$$g'' = (\partial^2 g_{\sigma}(\varepsilon, \varphi, \varphi_1, 0) / \partial \varepsilon^2)_{\varepsilon = \varepsilon_F}.$$

При $\varphi = \varphi_1 = 0$ $g' > 0$, $g'' \leq 0$; при $|\varphi| > 0$ $g' < 0$, $g'' > 0$. Подобное изменение знака второй производной плотности состояний может быть причиной появления аномального температурного поведения статической ПМ восприимчивости $\chi(T)$ в области нарастания структурных искажений (Приложение С).

Заключение

Теоретическая часть статьи, посвященная выводу свободной энергии системы коллективизированных

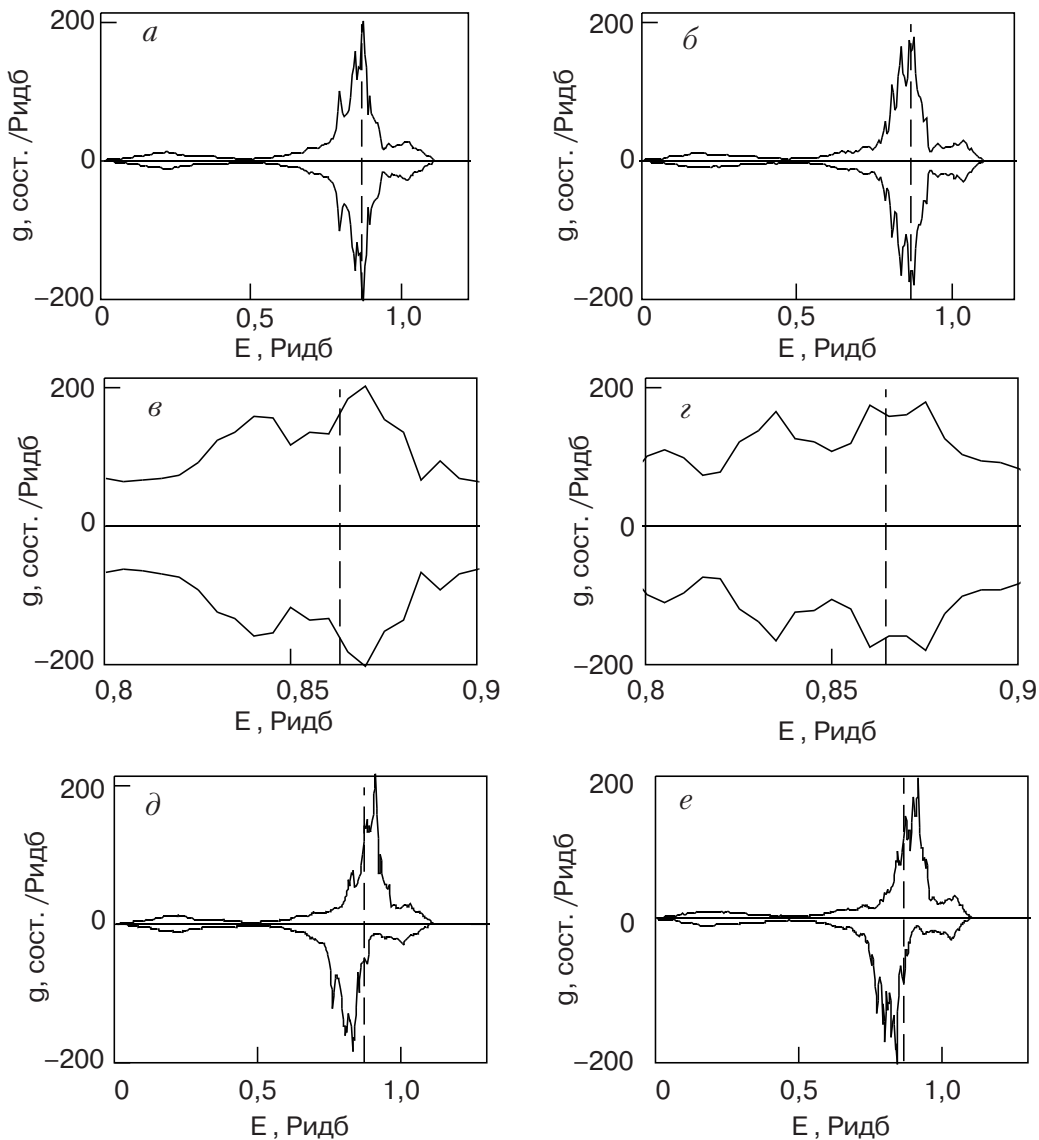


Рис. 5. Влияние структурного и магнитного параметров порядка на плотность состояний: исходной немагнитной структуры $B8_1$ (*а, в*); немагнитной структуры $B3_1$ (*б, з*); магнитных $B8_1$ (*д*) и $B3_1$ (*е*). Штриховой линией обозначено положение уровня Ферми. Верхняя половина соответствует подзоне «спин вверх», нижняя — «спин вниз».

электронов в решетке с базисом и изменяющейся структурной конфигурацией, дает представление о реализации спин-флуктуационного подхода для конкретного материала, например арсенида марганца. Применение описанного выше подхода к исследованию основного состояния этого соединения позволяет энергетически обосновать как спонтанное понижение симметрии исходной решетки, так и ее восстановление под действием обменного поля.

Из сказанного выше следует, что основная идея модели представляется правильной. Однако использованный для стабилизации искаженной решетки подход является по своей сути феноменологическим. Для строгого описания ион-ионного взаимодействия следует использовать современные

подходы к этой проблеме [27,28], что позволит подойти к рассмотрению магнитоупругих взаимодействий в арсениде марганца. Последние в значительной мере ответственны за характер магнито-структурного фазового перехода.

На основе этой идеологии мы надеемся в будущей работе провести исследования магнито-структурных свойств при конечных температурах.

Приложение А

Приближение однородных локальных полей используется при суммировании членов бесконечного ряда (правой части выражения (26)), разложенной в степенной ряд по \tilde{H}_1^α :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= -\sum_{p=1}^{\infty} \frac{C^p}{\beta^p} \sum_{q_1 \dots q_p} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \sum_{\omega_1 \dots \omega_p} \left(\eta_{\omega_1 q_1}^{\alpha_1} \right)^* \dots \left(\eta_{\omega_p q_p}^{\alpha_p} \right)^* \times \\ &\times \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_p e^{-i(\omega_1 \tau_1 \dots \omega_p \tau_p)} \left\langle T_\tau M_{q_1}^{\alpha_1}(\tau_1) \dots M_{q_p}^{\alpha_p}(\tau_p) \right\rangle_{\tilde{H}_{0,c}} = \\ &= -\sum_{p=1}^{\infty} \frac{C^p}{\beta^p} \sum_{q_1 \dots q_p} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \sum_{\omega_1 \dots \omega_p} \left(\eta_{\omega_1 q_1}^{\alpha_1} \right)^* \dots \left(\eta_{\omega_p q_p}^{\alpha_p} \right)^* \times \Phi_{2p}^{\alpha_1 \dots \alpha_p}(q_1 \dots q_p, \omega_1 \dots \omega_p), \end{aligned} \quad (A.1)$$

где $\langle \dots \rangle_{\tilde{H}_{0,c}}$ означает сумму всех связанных диаграмм.

Суть приближения состоит в том, что правая часть (A.1) аппроксимируется выражением, в котором вершинные части $\Phi_{2p}^{\alpha_1 \dots \alpha_p}(q_1 \dots q_p, \omega_1 \dots \omega_p)$ при $p \geq 2$ вычисляются при $q_i, \omega_i = 0$. Это позволяет провести суммирование ряда и получить приближенное выражение для Ψ_1 в виде (27), (28) и (A.1).

Достоинство этого подхода — возможность учета вклада в свободную энергию от всех степеней α -компонент случайных полей $\eta_{\omega_p q_p}^{\alpha_p}$. Недостаток — ограниченное описание динамики флуктуаций, определяющее область применимости приближения $J/\tilde{W} < 1$, где \tilde{W} — ширина зоны проводимости [29].

Вклад длинноволновых флуктуаций поля (динамическая поправка второго порядка, учитывающая квадратичные флуктуации поля) может быть рассчитан точно путем прямого вычисления правой части выражения

$$\sum_{q\omega} X_{1,q\omega} |\eta_{1,q\omega}|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \left(\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \left\langle T_\tau \tilde{H}_1^{\alpha_1}(\tau_1) \tilde{H}_1^{\alpha_2}(\tau_2) \right\rangle_{\tilde{H}_{0,c}} - \frac{\partial^2 L\{\eta\}}{\partial \eta^{\alpha_1} \partial \eta^{\alpha_2}} \right). \quad (A.2)$$

При этом $X_{1,q\omega} \equiv X_{q\omega}$ определяется формулой

$$X_{q\omega} = J \sum_{S=1}^{N_L} (\chi_{SS,00}^0 - \chi_{SS,q\omega}^0) P_{SS} - J \sum_{S_1=1}^{N_L} (\chi_{SS_1,q\omega}^0) P_{SS_1}, \quad (A.3)$$

где N_L — число атомов в базисе, $\chi_{SS_1,q\omega}^0$ — обобщенные неоднородные магнитные восприимчивости

$$\chi_{SS_1,q\omega}^0 = \sum_k \frac{f(E_S(k, \varphi, \varphi_1, 0) - \mu) - f(E_{S_1}(k+q, \varphi, \varphi_1, 0) - \mu)}{E_S(k, \varphi, \varphi_1, 0) - E_{S_1}(k+q, \varphi, \varphi_1, 0) + i\omega}, \quad (A.4)$$

а P_{SS_1} — множители, учитывающие гибридизацию подзон. Диагонализация матрицы (29) соответствует переходу от операторов $a_{nm,k\sigma}$ к их линейной комбинации

$$c_{S,k\sigma} = \sum_{n,m} U_{S,nm} a_{nm,k\sigma}, \quad = \text{const} \cdot \int d\mathbf{M} \int \prod_{(q,\omega) \neq 0} \prod_{\alpha=x,y,z} dm_{q\omega}^{\alpha} \times$$

поэтому

$$P_{SS_1} = \left(\sum_{nm} U_{S,nm}^* U_{nm,S_1} \right) \left(\sum_{nm} U_{S_1,nm}^* U_{nm,S} \right).$$

Если ввести обозначения

$$\frac{\beta C}{2g} M = \lambda_0^{\alpha} = \eta_0^{\alpha} - \frac{gH^{\alpha}}{C}$$

и перейти от комплексных переменных $\eta_{q\omega}^{\alpha}$ к двум вещественным

$$\left(\frac{\beta C}{2g} m_{q\omega}^{\alpha} \right)^2 = (\lambda_{q\omega}^{\alpha})^2 = |\eta_{q\omega}^{\alpha}|^2 \quad \text{и} \quad \theta_{q\omega}^{\alpha} = \arg \eta_{q\omega}^{\alpha},$$

то прежнее выражение $\psi\{\eta\}$, не зависящее от $\theta_{q\omega}^{\alpha}$,

$$\begin{aligned} & \psi\{\eta, \varphi, \varphi_1\} = \\ & = -\beta^{-1} \sum_{S,k,\sigma} \ln \{1 + \exp [-(E_{S\sigma}(k, \varphi, \varphi_1, C\eta/2) - \mu)\beta]\} + \\ & + \beta^{-1} \sum_{q\omega \neq 0} (1 + X_{q\omega}) |\eta_{q\omega}|^2 + N_0 \beta^{-1} \left| \eta_0 - \frac{g\mathbf{H}}{C} \right|^2 - \Omega_0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

примет вид

$$\begin{aligned} & \psi\{m, \varphi, \varphi_1\} = \\ & = -\beta^{-1} \sum_{S,k,\sigma} \ln \left[1 + \exp \left\{ -\beta \left(E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g} \right) - \mu \right) \right\} \right] + \\ & + \frac{J}{4g^2} \sum_{(q,\omega) \neq 0} |m_{q\omega}|^2 (1 + X_{q\omega}) + \frac{JN_0}{4g^2} \mathbf{M}^2 - \\ & - \beta^{-1} \sum_{(q,\omega) \neq 0} \sum_{\alpha=x,y,z} \ln m_{q\omega}^{\alpha} - \Omega_0(\varphi, \varphi_1), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$m^2 = \left(\mathbf{M} + \frac{2g^2}{J} \mathbf{H} \right)^2 + \frac{1}{N_0} \sum_{(q,\omega) \neq 0} m_{q\omega}^2.$$

Тогда, учитывая, что $d\eta_{q\omega}^{\alpha} = \lambda_{q\omega}^{\alpha} d\lambda_{q\omega}^{\alpha} d\theta_{q\omega}^{\alpha}$, $d\eta_0^{\alpha} = d\lambda_0^{\alpha}$, выражение (24) можно привести к виду

$$\exp [-\beta \Delta \Omega(m, \varphi, \varphi_1)] =$$

$$\times \exp [-\beta \psi\{m, \varphi, \varphi_1\} - \beta \Omega_0(\varphi, \varphi_1)]. \quad (\text{A.7})$$

Интегралы по M^{α} , $m_{q\omega}^{\alpha}$ в (A.7) оцениваем методом перевала. Уравнения, определяющие перевальные точки $\partial\psi / \partial\mathbf{M} = 0$ и $\partial\psi / \partial m_{q\omega}^{\alpha} = 0$, приводим к виду

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \left(1 - \frac{g}{2N_0} \sum_{S,k,\sigma} \sigma f \left(E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g} \right) - \mu \right) \frac{1}{m} \frac{\partial E_{S\sigma}}{\partial b} \right) = \\ = \frac{2g}{N_0} \sum_{S,k,\sigma} \sigma f \left(E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g} \right) - \mu \right) \frac{\partial E_{S\sigma}}{\partial b} \frac{\mathbf{H}g^2}{Jm}, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} (m_{q\omega}^{\alpha})^2 \left(1 + X_{q\omega} - \frac{g}{2N_0} \sum_{S,k,\sigma} \sigma f \left(E_{S\sigma} \left(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g} \right) - \mu \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{m} \frac{\partial E_{S\sigma}}{\partial b} \right) = \frac{2g^2}{\beta J}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

где $b = C\eta/2$.

Химический потенциал определяем из уравнения

$$\frac{N}{N_0} = \sum_{S,\sigma} \int \frac{d^3k}{1 + \exp \left\{ \beta \left(E_{S\sigma}(k, \varphi, \varphi_1, \frac{Jm}{4g}) - \mu \right) \right\}}, \quad (\text{A.10})$$

где N/N_0 — число электронов в зоне Бриллюэна.

С учетом этого свободную энергию определяем выражением

$$F_e \{m, \varphi, \varphi_1\} = \psi \{m, \varphi, \varphi_1\}, \quad (\text{A.11})$$

где в m подставлены перевалочные значения M^{α} , $m_{q\omega}^{\alpha}$.

Приложение В

Для расчета энергии кулоновского взаимодействия точечных ионов, погруженных в нейтрализующий фон, используем метод Эвальда—Фукса [30], обобщение которого на решетку с базисом имеет вид

$$E_l = \frac{e^2}{2} \left\{ \frac{4\pi}{V} \sum_{l \neq 0} \left(\sum_n q_n S_{ln} \right) \frac{\exp \left(-\frac{g_l^2}{4\eta} \right)}{g_l^2} - 2\sqrt{\frac{\eta}{\pi}} \left(\sum_n q_n^2 \right) + \sum_{i \neq 0} \sum_{n,n'} q_n q_{n'} \frac{G(|R_{i,nn'}| \sqrt{\eta})}{|R_{i,nn'}|} - \frac{\pi}{\eta V} \left(\sum_n q_n \right)^2 \right\}, \quad (\text{B.1})$$

где $n = \overline{1,8}$ нумерует позиции ионов в базе; q_n — заряд иона в позиции n ; \mathbf{g}_l — вектор обратной решетки, η — параметр Эвальда, регулирующий сходимость рядов ($\eta = \pi^2/2V^{2/3}$); $\mathbf{R}_{i,nn'} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}$, \mathbf{R}_i — вектор решетки, \mathbf{r}_n — вектор, определяющий позицию атома в базе; V — объем элементарной ячейки; E_l — энергия элементарной ячейки; S_{ln} — структурный фактор:

$$S_{ln} = \sum_{n'} q_{n'} \exp [i\mathbf{g}_l(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})]; G(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt.$$

Используемая в (32) величина $W(\varphi, \varphi_1) = N_0 E_l(\mathbf{r}_n(\varphi, \varphi_1))$. При расчете сумм по решетке использовалось шесть координационных сфер.

Приложение С

Следуя [31], выражение для обратной парамагнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ можно представить в виде

$$\chi^{-1}(T) = [2g^2(\epsilon_F)\mu_B N_0]^{-1} \{a_1 - \alpha + \frac{5}{3}a_3\xi^2 + \dots\},$$

$$a_1 = 2(g^2\mu_B^2 N_0)^{-1} \left\{ 1 + \frac{1}{6}(\pi kT)^2 \left[\left(\frac{g'}{g}\right)^2 - \frac{g''}{g} \right] + \dots \right\},$$

$$a_3 = 2 \left(\frac{g\mu_B}{2}\right)^2 (3!)^{-1} a_1^3 \left\{ 3 \left(\frac{g'}{g}\right)^2 - \frac{g''}{g} \right\}. \quad (C.1)$$

Поскольку в коллективизированном ферромагнетике квадрат амплитуды спиновых флуктуаций ξ^2 пропорционален температуре и именно эта величина определяет сильную температурную кюри-вейсовскую зависимость ПМ восприимчивости, из (C.1) следует, что изменение знака g'' на уровне Ферми может привести к изменению знака $\partial\chi^{-1}(T)/\partial T$. В MnAs в области стабильности фазы B31 эта величина отрицательна, что, как мы видим, качественно согласуется с поведением расчетной плотности состояний (C.1). В работе [13], где использована кусочно-линейная плотность состояний, указанный эффект обусловлен уменьшением плотности состояний с понижением температуры (уменьшение величины коэффициента a_1). В используемой нами модели подобное понижение a_1 присутствует, однако дополняется еще и структурными изменениями плотности состояний, непосредственно связанными со спин-флуктуационным механизмом температурной зависимости термодинамических величин в магнетиках.

1. J. Mira, F. Rivadulla, J. Rivas, A. Fondado, R. Caciuffo, F. Carsughi, T. Guidi, and J.B. Goodenough, *cond-mat/0201478*.
2. B. Sanyal, L. Bergqvist, and O. Eriksson, *cond-mat/0308524*.
3. A. Debernardi, M. Peressi, and A. Balderaschi, *cond-mat/0210235*.
4. C.P. Bean and D.S. Rodbell, *Phys. Rev* **126**, 104 (1962).
5. И.М. Витебский, В.И. Каменев, Д.А. Яблонский, *ФТТ* **23**, 215 (1981).
6. Э.А. Завадский, В.И. Каменев, Е.П. Стефановский, А.Л. Сукстанский, Д.А. Яблонский, *препринт Дон-ФТИ-91-14*, Донецк (1991).
7. С.К. Асадов, Э.А. Завадский, В.И. Каменев, Е.П. Стефановский, А.Л. Сукстанский, Б.М. Тодрис, *ФТТ* **42**, 1649 (2000).
8. T. Kato, K. Nagai, and T. Aisaka, *J. Phys.: Solid State Phys.* **16**, 3183 (1983).
9. L.M. Sandratskii, R.F. Egorov, and A.A. Berdyshev, *Phys. Status Solidi* **B103**, 511 (1981).
10. J.M. Tyler and J.L. Fry, *Phys. Rev.* **B1**, 4604 (1970).
11. S. Haneda, N. Kazama, Y. Yamaguchi, and H. Watanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **42**, 1201 (1977).
12. R. Podloucky, *J. Magn. Magn. Mater.* **43**, 204 (1984).
13. K. Motizuki and K. Katoh, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 735 (1984).
14. K. Motizuki, K. Katoh, and A. Yanase, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19**, 495 (1986).
15. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
16. У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел*, т. 2, Мир, Москва (1983).
17. М. Борн, Хуан Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).
18. Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).
19. S.Y. Savrasov and G. Kotliar, *cond-mat/0308053*.
20. Р.Л. Стратонович, *ДАН СССР* **157**, 1097 (1957).
21. J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 77 (1959).
22. J.A. Hertz and M.A. Klenin, *Phys. Rev.* **B10**, 1084 (1974).
23. А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Гельд, *ФММ* **58**, 47 (1984).
24. А.А. Повзнер, А.Г. Волков, *ФММ* **66**, 1073 (1988).
25. А.Г. Волков, А.А. Повзнер, В.В. Крюк, П.В. Баянкин, *ФТТ* **41**, 1792 (1999).
26. Р.Е. Blochl, O. Jepsen, and O.K. Andersen, *Phys. Rev.* **B49**, 16223 (1994).
27. В.В. Немошкаленко, В.Н. Антонов, *Методы вычислительной физики в теории твердого тела: Зонная теория металлов*, Наукова думка, Киев (1985).
28. T. Huhne, C. Zecha, H. Ebert, P.H. Dederichs, and R. Zeller, *Phys. Rev.* **B58** 10236 (1998),
29. Ю.А. Изюмов, *УФН* **165**, 403 (1995),
30. K. Fuchs and H.H. Wills, *Proc. Roy. Soc.* **A151**, 585 (1935).
31. M. Shimizu, *Rep. Prog. Phys.* **44**, 329 (1981).

The electronic mechanism of structural phase transitions in manganese arsenide

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

The spin-fluctuation theory of magnetism is generalized for magnets of a complex crystal and magnetic structure. An expression for free energy itinerant p,d -electrons described by the Hubbard Hamiltonian is obtained with allowance for static displacements of ionic cores which result in changes of the lattice symmetry. The approximation of uniform local fields is used to calculate free energy.

The developed approach is applied to study the competition of magnetic and structural order

parameters in ferromagnetic MnAs at $T = 0$. It is shown that the original structural distortions of the initial nickel-arsenide lattice (the nonzero structural-order parameter) cause the average energy of itinerant electrons to decrease. The distortions can be stabilized due to the competition between electronic energy and energy of ion-ion interaction of the crystal. The interaction of structural and magnetic order parameters is responsible for the suppression of structure distortions. It is shown that the magnetization (spontaneous or magnetic field induced) occurred in the system may result in the restoration of the initial nickel-arsenide structure. A similar magneto-structural transition is observed experimentally.