Физика низких температур, 1995, т. 21, № 3, с. 333–335 УДК 538.915

# Электронная структура интерметаллических соединений $HoIn_3$ и $TmGa_3$

Г. Е. Гречнев, И. В. Свечкарев, Ю. В. Фоменко

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47*

А. Хелм

*Department of Technology, University of Uppsala, Box 534, S-75 121, Uppsala, Sweden*

Статья поступила в редакцию 5 октября 1994 г.

Впервые проведены расчеты из первых принципов спин-поляризованной электронной структуры соединений тяжелых редкоземельных металлов: $HoIn_3$ и $TmGa_3$. Определена топология поверхности Ферми этих соединений. Установлено распределение магнитных моментов на атомах *f*- и *sp*-металлов.

Вперше виконано обчислення із перших принципів спін-поляризованої електронної структури сполук важких рідкісноземельних металів: $HoIn_3$ та $TmGa_3$. Знайдено топологію поверхні Фермі цих сполук. Встановлено розміщення магнітних моментів на атомах *f*- та *sp*-металів.

Интенсивные исследования магнитных свойств соединений редкоземельных металлов (РЗМ) $RX_3$ (R — атом РЗМ; X =Al, In, Ga, Tl, Sn и Pb), имеющих кристаллическую структуру типа $Cu_3Au$, выявили наличие в них разнообразных типов магнитного упорядочения при низких температурах [1,2]. Это свидетельствует о важной и нетривиальной роли системы делокализованных электронов зоны проводимости, определяющей конфигурацию эффективных магнитных моментов и их величину. В связи с этим особый интерес представляет изучение энергетических спектров электронов проводимости в таких соединениях. В отличие от соединений легких РЗМ (в первую очередь лантана и церия), для которых были проведены расчеты зонной структуры [3,4] и исследования эффекта де Гааза — ван Альфена (ДГВА) [5,6], достоверные данные об электронных спектрах соединений тяжелых РЗМ со структурой $Cu_3Au$ отсутствуют. В настоящей работе впервые проведены расчеты из первых принципов электронной структуры соединений тяжелых РЗМ $HoIn_3$ и $TmGa_3$, а также установлены закономерности распределения магнитных моментов на атомах РЗМ и *sp*-металлов.

Самосогласованные расчеты электронной структуры $HoIn_3$ и $TmGa_3$ проводились на основе метода линеаризованных МТ-орбиталей (ЛМТО) в приближении атомных сфер [7,8]. Индивидуальные радиусы атомных сфер R и X металлов выбирались в соответствии с общим правилом, предложенным в [8]. В локальном приближении теории функционала спиновой плотности, обменно-корреляционный потенциал диагонален по спиновым индексам $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ и является функционалом электронной ($\rho = \rho^+ + \rho^-$) и спиновой ($m = m^+ + m^-$) плотностей [9]. Таким образом, в скалярно-релятивистском приближении задача расчета спин- поляризованной зонной структуры сводится к отдельным уравнениям для каждого направления спина [7,9].

Принципиальным моментом расчетов зонной структуры *f*-металлов и их соединений является проблема учета *4f*-электронов в рамках локального приближения теории функционала электронной и спиновой плотностей [10,11]. В данной работе при построении обменно-корреляционного потенциала учитывалась спиновая поляризация *4f*-состояний, рассматриваемых как полуостовные, в рамках схемы Расселя—Саундерса. Аналогично [10] и [11], в расчете учитывается локальное обменное взаимодействие *4f*- и *5d*-состояний РЗМ. В этом приближении в области зоны проводимости отсутствует гибридизация локализованных *4f*-состояний с валентными *s*-, *p*-, и *d*-электронами, однако соответствующие плотности спин-поляризованных *f*-электронов $\rho^+_{4f}$ и $\rho^-_{4f}$ непосредственно используются при самосогласованном построении обменно-корреляционного потенциала системы. Для всех остальных валентных *s*-, *p*- и *d*-состояний гибридизация учитывалась в полном объеме. Поскольку детали неколлинеарных антиферромагнитных структур рассматриваемых соединений в области низких температур окончательно не ус-

© Г. Е. Гречнев, И. В. Свечкарев, Ю. В. Фоменко, А. Хелм, 1995

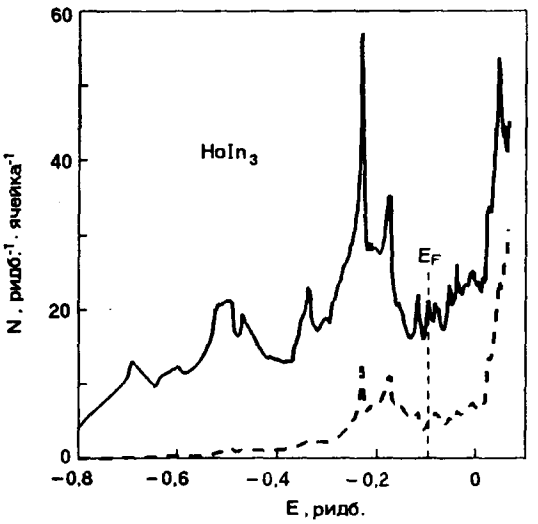


*Рис. 1.* Плотность электронных состояний $N$ в соединении $HoIn_3$ (*сплошная линия*). Пунктиром представлен парциальный вклад *5d*-состояний гольмия.

тановлены, в данной работе расчеты проводились для парамагнитных конфигураций, реализуемых в области магнитных полей $H \sim 10$ Тл.

При достижении сходимости в ходе самосогласованного вычисления кристаллического потенциала плотности электронных состояний $N(E)$ и ряд других характеристик электронной структуры рассчитывались на сетке из 455 точек в неприводимой части зоны Бриллюэна. На рис. 1 представлена плотность состояний в соединении $HoIn_3$ ($N(E)$ для $TmGa_3$ отличается незначительными деталями). Ее основной особенностью является появление двух сравнительно широких пиков (связывающих и антисвязывающих состояний) вследствие гибридизации *5d*-состояний РЗМ и *p*-состояний непереходного металла, причем последние дают заметный вклад в полную плотность состояний соединения $RX_3$ в окрестности уровня Ферми $E_F$. Парциальные плотности электронных состояний $N_l(E_F)$, числа заполнения $n$ и вклады в полный спиновый магнитный момент от *s*-, *p*-, *d*-, и *f*-электронов $M_l$ ($l = s, p, d, f$) представлены в таблице для обоих соединений.

В соединениях тяжелых РЗМ типа $RX_3$ можно ожидать заметные проявления обменного расщепления в спин-поляризованных электронных спектрах. В частности, имеется принципиальная возможность наблюдения осцилляций де Гааза — ван Альфена для разных спиновых подзон. Для таких случаев возможно проведение расчетов экстремальных сечений соответствующих листов поверхности Ферми (ПФ) в рамках предложенного в

Таблица

Парциальные плотности состояний $N_l(E_F)$, числа заполнения $n_l(E_F)$ и вклады в полный спиновый магнитный момент $M_l$ *s*-, *p*-, *d*- и *f*-электронов в соединениях $HoIn_3$ и $TmGa_3$

| $RX_3$ | | $l$ | $N_l(E_F)$, ридб.$^{-1}$ | $n_l(E_F)$, ячейка$^{-1}$ | $M_l$, $\mu_B$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $HoIn_3$ | Ho | *s* | 0,836 | 0,444 | 0,009 |
| | | *p* | 0,564 | 0,541 | 0,004 |
| | | *d* | 5,257 | 1,493 | 0,085 |
| | | *f* | | 10,000 | 4,000 |
| | In | *s* | 3,285 | 4,226 | −0,009 |
| | | *p* | 10,270 | 4,621 | 0,003 |
| | | *d* | 2,506 | 0,676 | 0,007 |
| $TmGa_3$ | Tm | *s* | 0,674 | 0,403 | 0,004 |
| | | *p* | 0,461 | 0,498 | 0,001 |
| | | *d* | 4,109 | 1,422 | 0,032 |
| | | *f* | | 12,000 | 2,000 |
| | Ga | *s* | 2,769 | 4,243 | −0,003 |
| | | *p* | 9,652 | 4,744 | 0,004 |
| | | *d* | 2,304 | 0,690 | 0,003 |

настоящей работе подхода. С целью установления топологии ПФ парамагнитных фаз соединений $HoIn_3$ и $TmGa_3$ в настоящей работе были рассчитаны сечения ПФ гранями зоны Бриллюэна. На рис. 2 приведены сечения ПФ $TmGa_3$ в шестой и седьмой энергетических зонах. Обращает на себя внимание практически сферическая электронная поверхность седьмой зоны, центрированная в точке симметрии $R$. Многосвязная дырочная поверхность шестой зоны, по-видимому, должна дать сложный спектр осцилляций ДГВА. При антиферромагнитном упорядочении топология ПФ может радикально измениться вследствие существенного

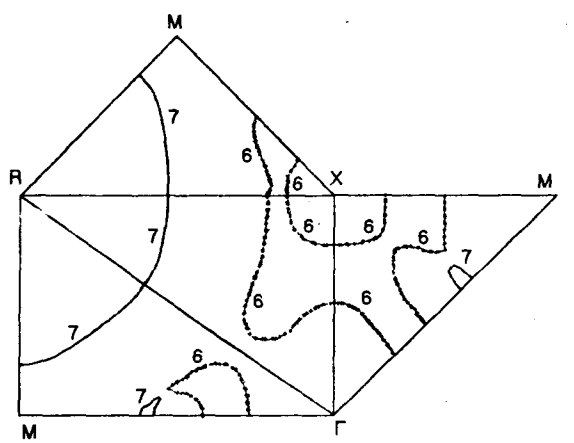


*Рис. 2.* Сечения поверхности Ферми соединения $TmGa_3$ гранями зоны Бриллюэна в шестой (6) и седьмой (7) энергетических зонах.

уменьшения размеров зоны Бриллюена и появления расщеплений на новых брэгговских плоскостях. Аналогичные сечения, полученные для $HoIn_3$, незначительно отличаются размерами. Установленная в настоящей работе топология поверхности Ферми $TmGa_3$ (и $HoIn_3$) качественно согласуется с результатами расчета электронного спектра соединения $LaIn_3$ [4], а также с данными исследования эффекта ДГВА в парамагнитной фазе $NdIn_3$ [6]

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Международного Научного Фонда Сороса UG 145, присужденного Американским физическим обществом, а также Королевской Академией Наук Швеции.

1. P. Morin, M. Giraud, P. Burlet, and A. Czopnik, *J. Magn. Magn. Mater.* **68**, 107 (1987).
2. A. Czopnik, H. Madge, and J. Zieglowski, *Phys. Status Solidi* (a) **127**, 473 (1991).
3. D. D. Koelling, *Solid State Commun.* **43**, 247 (1982).
4. T. Shaoping, Z. Kai-ming, and X. Xi-de, *J. Phys. : Condens. Matter.* **1**, 2677 (1989).
5. I. Umehara, N. Nagai, and Y. Onuki, *J. Phys. Soc. Jpn* **60**, 3150 (1991).
6. I. Umehara, T. Ebihara, N. Nagai, K. Satoh, Y. Fujimaki, and Y. Onuki, *J. Phys. Soc. Jpn* **61**, 1633 (1992).
7. H. L. Skriver, *The LMTO Method*, Berlin Springer, (1984).
8. O. K. Andersen, O. Jepsen, and M. Sob, in *Electronic Band Structure and Its Applications*, Berlin, Springer, (1987), p. 1-57.
9. U. von Barth and L. A. Hedin, *J. Phys.* **C5**, 1629 (1972).
10. H. L. Skriver and I. Mertig, *Phys. Rev.* **B41**, 6553 (1990).
11. M. S. S. Brooks, L. Nordström, and B. Johansson, *Physica* **B172**, 95 (1991).

## Electronic structure of intermetallic compounds $HoIn_3$ and $TmGa_3$

G. E. Grechnev, I. V. Svechkarev, Yu. V. Fomenko, and A. Hjelm

The first *ab initio* calculations of the spin-polarized electronic structure are carried out for heavy rare-earth metal compounds $HoIn_3$ and $TmGa_3$. The topology of the Fermi surface is determined for these compounds. The site- and angular-momentum-resolved contributions to the total magnetic moments are found for *f* and *sp* atoms.