

УДК 539.915 : 539.213 : 546.72 : 538

© 1992

ЛОКАЛЬНОЕ МАГНИТНОЕ ПОВЕДЕНИЕ АМОРФНОГО ЖЕЛЕЗА. САМОСОГЛАСОВАННЫЕ РАСЧЕТЫ В ЭКРАНИРОВАННОМ ЛМТО-БАЗИСЕ В РЕАЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

О. В. Концевой, О. Н. Мрясов, В. А. Губанов

Предложен метод расчета электронной структуры и магнитных характеристик систем с нарушениями трансляционной симметрии, позволяющий производить расчеты «из первых принципов» в рамках функционала локальной спиновой плотности самосогласованно в реальном пространстве. Метод основан на комбинации методов рекурсии и линеаризованных «muffin-tin» орбиталей в представлении сильной связи в приближении атомных сфер. Для топологически неупорядоченных систем метод позволяет рассчитывать электронную структуру самосогласованно «в среднем» и локальные характеристики отдельных атомов. Дается сравнение результатов расчета электронной структуры ферромагнитного ОЦК железа с результатами, полученными зонным методом ЛМТО. Метод был применен к расчету электронной и магнитной структуры аморфного железа. Изучение зависимости локального магнитного момента от локальной плотности показало сходство магнитного поведения аморфного Fe и ЦК Fe.

Аморфные металлы и сплавы в последние годы привлекали к себе серьезное внимание благодаря уникальным механическим, коррозионным, электрическим и магнитным свойствам, изучение которых интенсивно проводилось как экспериментальными [1], так и теоретическими методами [2-9]. Однако теоретическое изучение электронной структуры (ЭС) и связанных с ней свойств аморфных материалов затрудняется отсутствием в них трансляционной симметрии атомной структуры, что не позволяет в полной мере использовать традиционные зонные методы расчета (ЛМТО, ЛППВ). Для самосогласованного расчета ЭС этими методами необходимо использовать сверхъячейку из нескольких десятков атомов [2], что делает эти расчеты чрезвычайно трудоемкими. Более простым способом изучения ЭС неупорядоченных систем является использование методов реального пространства и полуэмпирического гамильтониана сильной связи, параметризованного в ЛКАО-подходе, что использовалось в работах [3-5]. Однако такая параметризация содержит ряд не всегда корректных допущений [10]. Так, предполагается, что электронные взаимодействия между атомами могут быть описаны в парном приближении и зависят только от расстояния между атомами, что в случае неупорядоченных систем приводит к недоучету влияния ближнего окружения на взаимодействия. Параметризация проводится с использованием параметров, полученных путем подгонки к экспериментальным данным или к результатам зонных расчетов идеальных кристаллов. Однако переносимость параметров для идеальных кристаллов к системам с пониженной симметрией остается под сомнением, особенно в случае спин-поляризованных расчетов, когда структурное разупорядочение может оказать значительное влияние на магнитные взаимодействия.

С появлением метода ЛМТО сильной связи (ЛМТО—СС) [11] появилась возможность преодоления недостатков полуэмпирических моделей путем использования неэмпирического гамильтониана ЛМТО—СС для расчетов в реальном

пространстве. Данный подход был использован в ряде работ [6-8] для изучения ЭС и свойств различных аморфных систем; было показано, что он может дать описание ЭС, близкое по точности к результатам зонных расчетов методом сверхъячейки [6]. Но серьезным недостатком этого подхода оставалось несогласованное определение параметров гамильтониана ЛМТО—СС: как и в случае ЛКАО-параметризации, они брались из расчетов идеальных кристаллов. В недавней работе [9] был предложен вариант самосогласованной схемы расчета ЭС в рамках подобного подхода, детально обсуждались приближения схемы и их влияние на ЭС на примере немагнитного расчета аморфного сплава $Fe_{80}B_{20}$.

В данной статье описывается метод расчета электронной структуры и магнитных характеристик систем с нарушениями трансляционной симметрии, позволяющий производить расчеты «из первых принципов» в рамках функционала локальной спиновой плотности самосогласованно в реальном пространстве. Метод основан на комбинации методов рекурсии и ЛМТО—СС в приближении атомных сфер (ПАС) и применим для любых систем с пониженной симметрией. Для топологически неупорядоченных систем метод позволяет рассчитывать электронную структуру самосогласованно «в среднем» и локальные характеристики отдельных атомов. Дается сравнение результатов расчета электронной структуры ферромагнитного ОЦК железа с результатами, полученными зонным методом ЛМТО. В работе метод был применен к расчету электронной и магнитной структуры аморфного железа и к изучению его магнитного поведения с локальной точки зрения.

1. Метод

Для расчета ЭС систем с отсутствием трансляционной симметрии неприемлемы первопринципные зонные методы, базирующиеся на теореме Блоха. Для таких систем необходимо использовать методы реального пространства, не требующие трансляционной инвариантности. Из методов реального пространства наибольшее распространение благодаря своей простоте и эффективности получил метод рекурсии [12], основанный на представлении одноузельной функции Грина в виде непрерывной цепной дроби

$$G_{00}(E) = (E - H)^{-1} = \frac{1}{E - a_0 - \frac{b_1^2}{E - a_1 - \frac{b_2^2}{E - a_2 - \dots}}} \quad (1)$$

с коэффициентами $\{a_i, b_i\}$, определяемыми с помощью рекуррентного соотношения

$$H | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle + b_{n+1} | u_{n+1} \rangle + b_n | u_{n-1} \rangle. \quad (2)$$

Для расчетов ЭС рекурсионным методом необходимо выполнение следующих требований [13]: 1) короткодействие взаимодействий в пространстве, 2) ортогональность базисных волновых функций и гамильтониана. С появлением метода ЛМТО—СС связи [11] стало возможным построение гамильтониана, удовлетворяющего приведенным условиям, из первых принципов. Гамильтониан строится в экранированном (локализованном) базисе волновых функций (α -представление) и в матричной форме имеет вид

$$H_{iL, jL'}^{(1)} = E_{vL} \delta_{ij} \delta_{LL'} + h_{iL, jL'}^2, \quad (3)$$

$$h_{iL, jL}^{\alpha} = (c_{iL}^{\alpha} - E_{viL}) \delta_{ij} \delta_{LL'} + (d_{iL}^{\alpha})^{1/2} S_{iL, jL}^{\alpha} (d_{jL}^{\alpha})^{1/2}, \quad (4)$$

где i, j — узельные и $L = (l, m)$ — орбитальный индексы; c^{α} , d^{α} — потенциальные параметры; S^{α} — экранированные структурные константы. Метод ЛМТО—СС детально описан в работах [11, 12]. Здесь мы лишь отметим, что короткодействие гамильтониана обеспечивается за счет подбора параметров экранирования α , которые могут быть сделаны структурно-независимыми при выборе $\alpha_j = \{0.3485, 0.05303, 0.010714\}$ для $l = s, p, d$; гамильтониан ортогонален до первого порядка по энергии, так как является первым членом ряда в разложении ортогонализированного гамильтониана ЛМТО

$$(O^{-1/2}) H (O^{-1/2}) = H^{\nu} = H^{(1)} - h^{\alpha} \sigma^{\alpha} h^{\alpha} + h^{\alpha} \sigma^{\alpha} h^{\alpha} \sigma^{\alpha} h^{\alpha} - \dots, \quad (5)$$

где σ^{α} — потенциальный параметр, производный от d^{α} , α , c^{α} . Недостатком является то, что собственные энергии $H^{(1)}$ корректны до первого порядка по $E - E_{\nu}$. Однако этот недостаток может быть преодолен, если взять два и более членов в разложении (5)

$$H^{(2)} = H^{(1)} - h^{\alpha} \sigma^{\alpha} h^{\alpha} \approx H^{\nu}. \quad (6)$$

Этот гамильтониан корректен до второго порядка по $E - E_{\nu}$. Вопросы построения гамильтониана $H^{(2)}$ в реальном пространстве были детально обсуждены в работе [14].

Особенным удобством при использовании гамильтониана ЛМТО—СС является возможность его разделения на две независимо рассчитываемые части: структурную часть, зависящую только от пространственного расположения атомов, и потенциальную часть, учитывающую взаимодействия электронов через потенциальные параметры c^{α} , d^{α} , σ^{α} . Структурная часть гамильтониана описывается экранированными структурными константами S^{α} , и для неупорядоченных систем их расчет становится особенно важной задачей. Точный их расчет требует матричного обращения

$$S^{\alpha} = S^0 (1 - \alpha S^0)^{-1}, \quad (7)$$

где S^0 — матрица канонических структурных констант, что в случае неупорядоченных систем с большим числом неэквивалентных атомов является задачей, трудновыполнимой на практике.

Существует другой подход, основанный на расчете недиагональных элементов S^{α} приближенно с использованием интерполяционной формулы для параметров Слэтера-Костера

$$S_{l'l'm}^{\alpha}(r) \approx \tilde{S} z^{-p} \exp(-z^q), \quad (8)$$

где $z = \lambda r / S_w$; r — межатомное расстояние; S_w — средний радиус атомной сферы; λ , p , q , \tilde{S} — константы. Формула дает результаты, весьма близкие к точным, полученным путем матричного обращения (7), для плотноупакованных структур ОЦК, ГЦК и ПК, но для структур, существенно отличающихся от указанных, неприменима [14].

Наиболее приемлемым способом расчета S^{α} является итерационное решение уравнения Дайсона для экранированных структурных констант в реальном пространстве

$$S_{iL, jL}^{\alpha} = S_{iL, jL}^0 + \sum_k \sum_{L''} S_{iL, kL''}^0 \alpha_{kL''} S_{kL'', jL}^{\alpha}, \quad (9)$$

позволяющее получать S^{α} с любой заданной точностью для произвольной структуры.

Потенциальная часть гамильтониана может быть рассчитана из первых принципов с использованием формализма функционала локальной спиновой плотности [15]. Основная задача сводится к определению зарядовой (в спин-поляризованном случае — спиновой) плотности внутри атомных сфер. В базисе экранированных МТ-орбиталей сферически-симметричная зарядовая (спиновая) плотность будет выражаться следующим образом:

$$\rho_{RI}(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{E_F} [\varphi_{RI}^{\alpha}(E, r)]^2 N_l^{\alpha}(E) dE, \quad (10)$$

где $\varphi_{RI}^{\alpha}(E, r)$ — радиальная волновая функция, N_l^{α} — l -проекционная плотность состояний (ПС)

$$N_l^{\alpha}(E) = -1/\pi \operatorname{Im} G_{oo}^{\alpha}(E) = -1/\pi \operatorname{Im} (E - H^{(1)})^{-1}. \quad (11)$$

Разлагая $\varphi_{RI}^{\alpha}(E, r)$ в ряд Тейлора около E_v до членов первого порядка, получаем

$$\rho_{RI}(r) = \frac{1}{4\pi} \left[\varphi_{RI}^2(r) \mu_{0,I}^{\alpha} + 2\varphi_{RI}(r) \dot{\varphi}_{RI}^{\alpha}(r) \mu_{1,I}^{\alpha} + (\dot{\varphi}_{RI}^{\alpha}(r))^2 \mu_{1,I}^{\alpha} \right], \quad (12)$$

где μ_i^{α} — моменты плотности состояний

$$\mu_i^{\alpha} = \int_{-\infty}^{E_F} (E - E_{v,i})^i N_l^{\alpha}(E) dE. \quad (13)$$

Переходя в базис ортогональных волновых функций $\varphi(r)$ и $\dot{\varphi}(r)$, в котором проводится решение в сфере, с помощью преобразования [11]

$$\dot{\varphi}_{RI}^{\alpha}(r) = \varphi_{RI}(r) + \dot{\varphi}_{RI}(r) \sigma_{RI}^{\alpha} \quad (14)$$

окончательно получаем следующее выражение для зарядовой плотности:

$$\begin{aligned} \rho_{RI}(r) = \frac{1}{4\pi} \left[\varphi_{RI}^2(r) \left\{ \mu_{0,I}^{\alpha} + 2\mu_{1,I}^{\alpha} \sigma_{RI}^{\alpha} + \mu_{2,I}^{\alpha} (\sigma_{RI}^{\alpha})^2 \right\} + \right. \\ \left. + 2\varphi_{RI}(r) \dot{\varphi}_{RI}(r) \left\{ \mu_{1,I}^{\alpha} + \mu_{2,I}^{\alpha} \sigma_{RI}^{\alpha} \right\} + \dot{\varphi}_{RI}^2(r) \mu_{2,I}^{\alpha} \right]. \quad (15) \end{aligned}$$

В случае проведения расчета ЭС с использованием гамильтониана $H^{(2)}$ (6) зарядовая плотность может быть построена непосредственно в базисе ортогональных волновых функций $\varphi(r)$ и $\dot{\varphi}(r)$. Поскольку гамильтониан $H^{(2)}$ корректен до второго порядка по $(E - E_v)^2$, то разложение $\varphi_{RI}(E, r)$ в ряд Тейлора проводится также до членов второго порядка, что дает следующее выражение для зарядовой плотности:

$$\begin{aligned} \rho_{RI}(r) = \frac{1}{4\pi} \left[\varphi_{RI}^2(r) \mu_{0,I} + 2\varphi_{RI}(r) \dot{\varphi}_{RI}(r) \mu_{1,I} + \right. \\ \left. + \left\{ \dot{\varphi}_{RI}^2(r) + \varphi_{RI}(r) \ddot{\varphi}_{RI}(r) \right\} \mu_{2,I} \right]. \quad (16) \end{aligned}$$

Процедура самосогласованного расчета ЭС выглядит следующим образом.

1) Рассчитываются экранированные структурные константы по (9) и строится гамильтониан $H^{(1)}$ (3) или $H^{(2)}$ (6) с использованием начальных значений для потенциальных параметров, взятых, например, из расчетов кристаллов или атомных расчетов.

2) Производится расчет локальных ПС и их моментов в реальном пространстве с помощью рекурсионного метода по (1), (11) и (13).

3) Рассчитываются зарядовая плотность по уравнениям (15) или (16), новый потенциал внутри сферы и находятся новые потенциальные параметры для построения гамильтониана для следующей итерации.

В случае аморфных систем самосогласованный расчет необходимо проводить для каждой атомной сферы, что является весьма трудоемкой задачей. Однако в том случае, когда нас интересуют усредненные свойства материала, точное самосогласование мы предлагаем заменить самосогласованием «в среднем». В этом случае точное решение в сфере производится для ограниченного числа атомов (8—10) каждого i -го типа, после чего зарядовая плотность усредняется

$$\langle \rho_{Ri}(r) \rangle_i = \frac{1}{4\pi} \langle \int_{-\infty}^{E_F} [\varphi_{Ri}^{\alpha}(E, r)]^2 N_i^{\alpha}(E) dE \rangle_i. \quad (17)$$

В этом приближении потенциал внутри сферы, полученный из средней зарядовой плотности, будет одинаков для всех узлов i -го типа. Данное приближение кажется разумным, так как в этом случае мы пренебрегаем лишь зарядовым переносом между атомными сферами данного типа.

2. Результаты и обсуждение

1) Электронная структура ОЦК Fe в ЛМТО-рекурсионном подходе. Для проверки адекватности описываемого подхода были проведены тестовые спин-поляризованные расчеты электронной структуры кристаллического ОЦК железа. Для расчетов в реальном пространстве использовался кластер из 896 атомов, средний радиус атомной сферы составлял $S_{av} = 2.662$ а. у. Расчеты ЭС проводились с использованием как гамильтониана $H^{(1)}$, так и гамильтониана $H^{(2)}$. В качестве стартового потенциала брался атомный потенциал, экранированные структурные константы рассчитывались по (9). На первых итерациях самосогласования рассчитывалось 10 уровней рекурсии, расчет моментов плотности состояний производился путем интегрирования по квадратурам Гаусса [16]. На последних итерациях для увеличения точности рассчитывалось 10, 15 и 30 пар рекурсионных коэффициентов для s -, p - и d -орбиталей соответственно, моменты плотности состояний рассчитывались с использованием терминатора Бира-Петтифора [17] и интегрирования по реальной оси. Плотности состояний, полученные самосогласованно в ЛМТО-рекурсионной схеме, даны на рис. 1 в сравнении с результатами расчета зонным методом ЛМТО. В таблице приведены значения заселенностей орбиталей, энергий Ферми и магнитных моментов, полученных сравнимыми методами. Как видно из этого рисунка, расчеты в реальном пространстве в описываемой схеме хорошо воспроизводят все особенности ПС, наблюдаемые в зонном расчете, для обоих направлений спинов. Расхождения наблюдаются лишь в описании незаполненных состояний с использованием гамильтониана первого порядка $H^{(1)}$, поскольку эти состояния находятся далеко от точки разложения E_v , выбираемой обычно в центре заполненной зоны. Использование гамильтониана $H^{(2)}$ позволяет преодолеть этот недостаток. Магнитный момент, полученный в наших расчетах, находится также в хорошем согласии с результатами зонных расчетов.

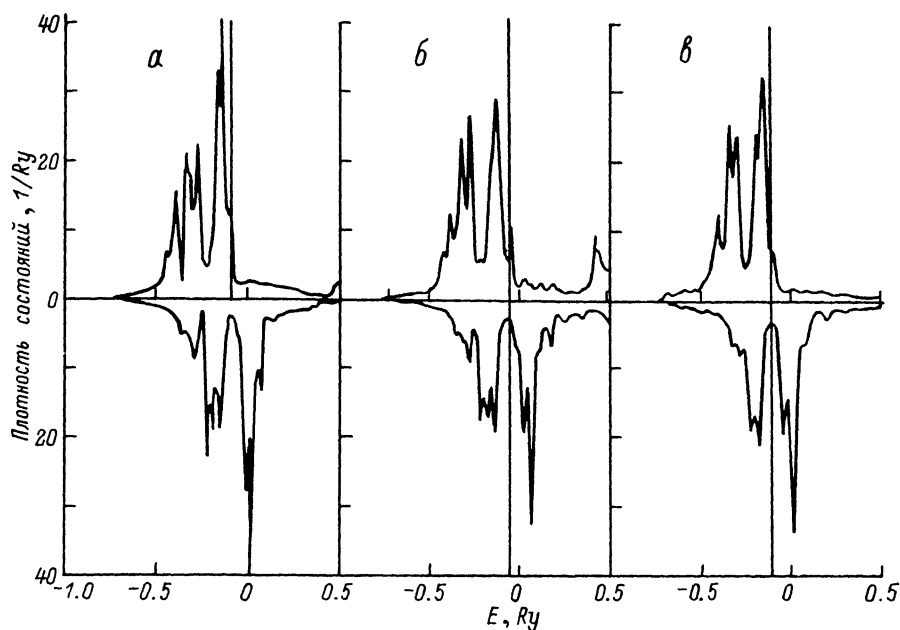


Рис. 1. Плотности состояний ферромагнитного ОИК железа, рассчитанные с использованием а) зонного метода ЛМТО—ПАС, б) метода ЛМТО-рекурсии с гамильтонианом $H^{(1)}$, в) метода ЛМТО-рекурсии с гамильтонианом $H^{(2)}$.

2) Электронная структура и распределение магнитных моментов в аморфном железе. Аморфное железо (a -Fe) представляется интересным для исследования объектом, в особенности с точки зрения его магнитных свойств. В чистом виде оно до сих пор не получено, а экстраполяция экспериментальных результатов, полученных для различных железонасыщенных сплавов $Fe_{100-x}A_x$ на случай $x = 0$, предсказывает различное магнитное поведение [18, 19]. Так, магнитный момент предсказывается в пределах 1.6 — $2.6 \mu_B$ в различных сериях экспериментов. Детальное изучение магнитного поведения a -Fe, в том числе с учетом произвольной ориентации спинов, было проведено в работах [4, 5] для различных плотностей a -Fe в полупирической модели сильной связи, имеющей отмеченные выше недостатки. В настоящей работе впервые выполнены спин-поляризованные расчеты электронной структуры аморфного железа из первых принципов с помощью описываемого самосогласованного ЛМТО-рекурсионного метода.

Энергии Ферми, заселенности s -, p - и d -состояний для двух направлений спина и магнитный момент в ферромагнитном ОИК железе, рассчитанные зонным методом ЛМТО—ПАС и методом ЛМТО-рекурсии с гамильтонианами $H^{(1)}$ и $H^{(2)}$

Метод	E_F, Ry	Заселенности состояний			Магнитный момент, μ_B
		s	p	d	
ЛМТО—ПАС	—0.090	<u>0.331</u>	<u>0.380</u>	<u>4.383</u>	2.19
		0.339	0.442	2.125	
ЛМТО-рекурсии с $H^{(1)}$	—0.069	<u>0.323</u>	<u>0.352</u>	<u>4.435</u>	2.22
		0.344	0.411	2.133	
ЛМТО-рекурсии с $H^{(2)}$	—0.108	<u>0.325</u>	<u>0.371</u>	<u>4.383</u>	2.17
		0.336	0.425	2.150	

Структурная модель α -Fe была получена с использованием термодинамической процедуры [20] и представляла собой кубический кластер, состоящий из 400 атомов с периодическими граничными условиями; средняя плотность образца $\rho = 7.86 \text{ г/см}^3$, средний радиус Вигнера—Зейтца $S_W = 2.666 \text{ а. у.}$ Данная модель ранее использовалась в расчетах ЭС немагнитного α -Fe полупирическим методом сильной связи [3]. Наиболее важным моментом в построении гамильтониана является корректный расчет экранированных структурных констант, так как именно они вносят основной вклад в изменения электронной структуры, вызванные топологическим разупорядочением. Наиболее простой способ расчета S^{α} — использование интерполяционной формулы (8). Однако вопрос о ее корректности для аморфных систем остается открытым. Предложенный в [9] способ определения S^{α} путем приближенного блочного обращения матрицы (7) кажется нам весьма громоздким и неточным. Нами было использовано уравнение Дайсона (9), которое решалось итерационно в реальном пространстве с учетом периодических граничных условий кластера и использованием (8) в качестве первого приближения. В качестве радиуса сферы взаимодействия использовалось значение $2.7 S_W$, число ближайших соседей, входящих в эту сферу, составляло от 13 до 19 для разных атомов, что близко к соответствующим значениям для ОЦК и ГЦК структур (14 и 18 ближайших соседей соответственно). Потребовалось 15 итераций для того, чтобы средняя разность S^{α} на двух последних итерациях была меньше 10^{-3} . Для решения вопроса о применимости интерполяционной формулы для расчета экранированных структурных констант в случае аморфных систем было проведено обратное преобразование S^{α} из представления (lm) в $(l'm)$ представление двухцентровых интегралов Слэтера—Костера. На рис. 2 в качестве примера показано 5 из 10 двухцентровых интегралов ($ss\sigma$, $sp\sigma$, $pd\pi$, $dd\sigma$ и ddd) вместе со значениями, полученными по интерполяционной формуле (8), в зависимости от расстояния r между атомами в кластере. Так как структурные константы, полученные по (9), теряют прямую зависимость от расстояния обратное преобразование становится неоднозначным (за исключением случая $ss\sigma$), поэтому приводится только одно решение для каждого случая. Заметен существенный разброс величин двухцентровых интегралов, полученных с помощью (9), от значений, полученных с использованием интерполяционной формулы, и даже в некоторых случаях их противоположный знак, причем разброс растет с ростом l , так что для случая $S_{dd\delta}$ корреляция между ними почти теряется. В ряде случаев интерполяционная формула не дает даже в среднем верного характера изменения двухцентровых интегралов от расстояния, как, например, в случае $S_{ss\sigma}$ при малых r . Из этого можно сделать вывод, что для корректного расчета ЭС неупорядоченных систем, особенно для изучения локальных характеристик, необходим точный расчет экранированных структурных констант по уравнению Дайсона (9), что позволяет учесть особенности симметрии локального окружения каждого атома.

Электронная структура α -Fe рассчитывалась для спин-поляризованного случая в предположении ферромагнитного упорядочения. Использовался гамильтониан $H^{(1)}$, так как при использовании гамильтониана $H^{(2)}$, как показали тестовые расчеты ОЦК—Fe, наблюдается улучшение только в описании состояний, расположенных выше уровня Ферми, но затраты времени на расчет существенно увеличиваются. В качестве стартового потенциала использовался потенциал ОЦК—Fe, самосогласование проводилось «в среднем» по 10 атомам в центральной части кластера. Усредненная полная и парциальные плотности состояний приведены на рис. 3. Плотность состояний отличают два характерных пика, имеющих d -характер. Средний магнитный момент составил $\mu = 1.9 \mu_B$, что существенно выше, чем значение $\mu = 1.6 \mu_B$, полученное в [5]. Различие в результатах могло явиться следствием самосогласованного определения потенциальных параметров и обменного расщепления в отличие от параметризованных расчетов [5]. Об

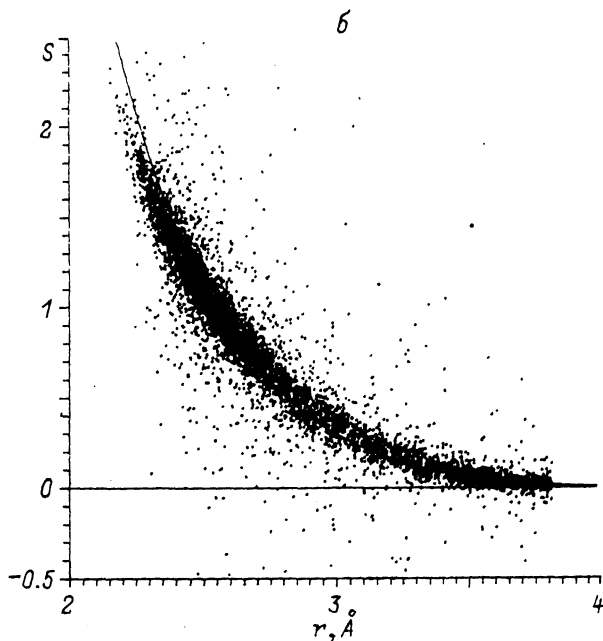
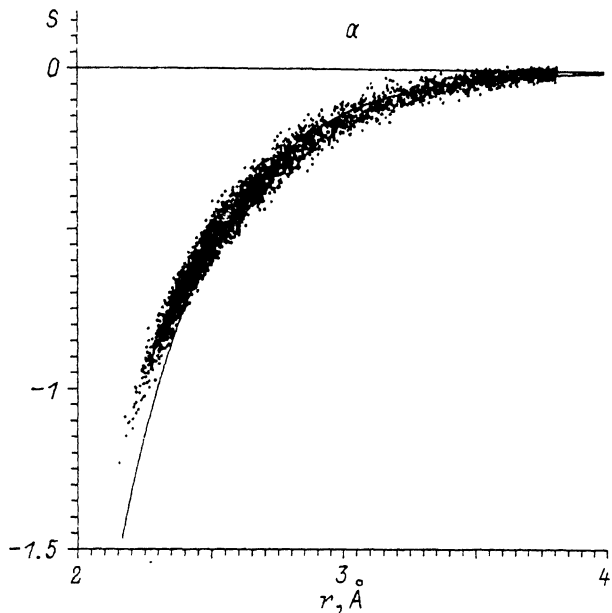


Рис. 2. Зависимость двухцентровых интегралов $S_{ll'm}$ от межатомного расстояния в аморфном Fe. Линия — значения, рассчитанные по интерполяционной формуле (8); точки — значения, полученные с использованием уравнения Дайсона (9) для различных пар атомов. а — $ss\sigma$, б — $sp\sigma$, в — $pd\pi$, з — $dd\sigma$, д — $dd\delta$.

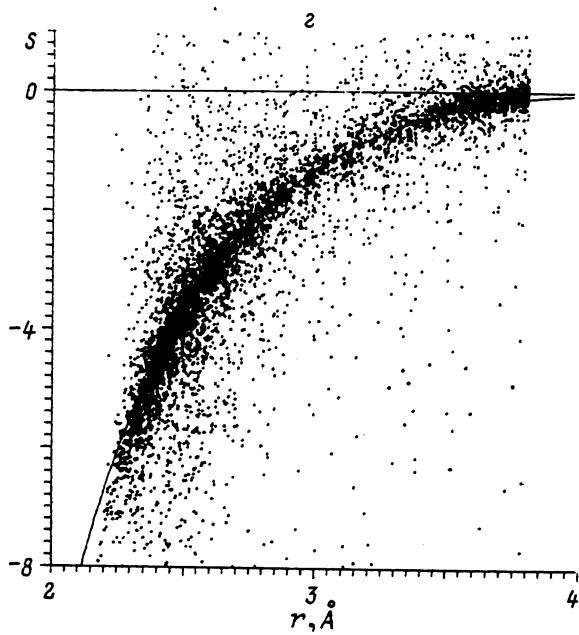
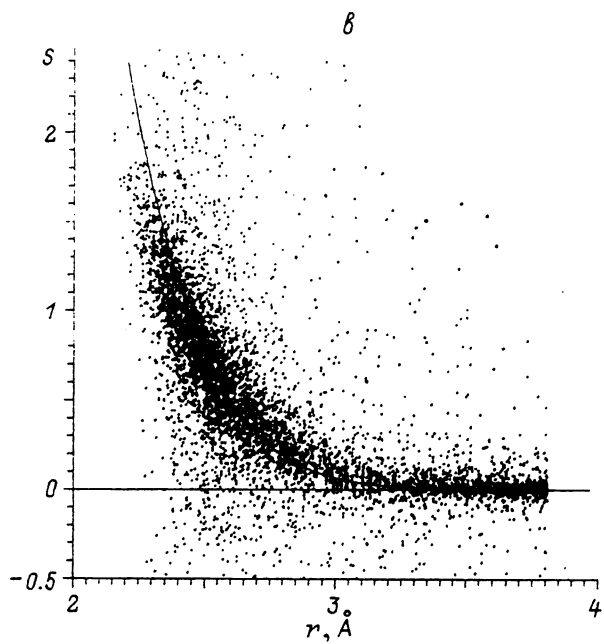


Рис. 2 (продолжение).

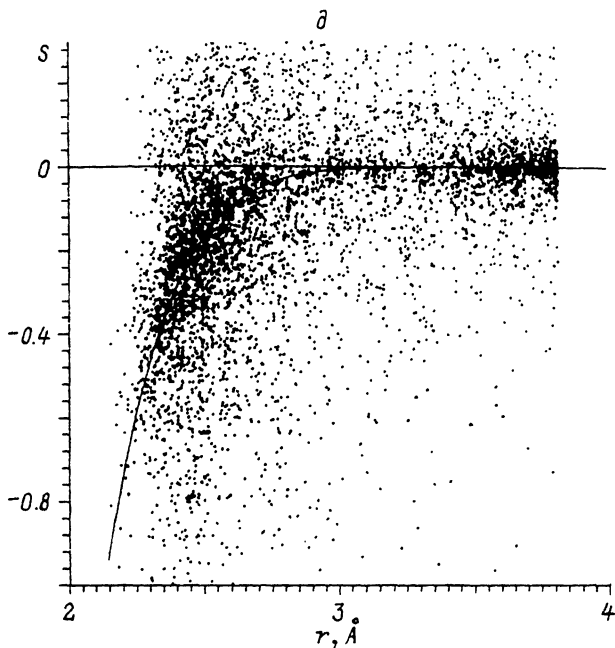


Рис. 2 (продолжение).

этом можно судить по характеру изменения μ в процессе самосогласования: на первых итерациях значения магнитного момента были занижены и составляли $\mu = 1.65\text{--}1.85 \mu_B$. Средний магнитный момент оказался меньше, чем у ОЦК—Fe ($2.19 \mu_B$). Это можно объяснить наличием атомов, имеющих локальное окружение, близкое как к ОЦК, так и к ГЦК структуре. Плотность образца находится как раз в таком районе радиуса атомной сферы, при котором у ГЦК—Fe происходит переход из высокоспинового в низкоспиновое состояние [21], поэтому можно ожидать значительного разброса величин локальных магнитных моментов на различных атомах.

Для более детального исследования магнитного поведения α -Fe было проведено изучение зависимости локальных магнитных моментов от локальной плотности. Вокруг каждого атома выбиралась сфера такого радиуса, чтобы средняя плотность атомов Fe внутри сферы, усредненная по всему образцу, совпадала со средней плотностью образца. Существует несколько радиусов таких сфер, соответствующих первой, второй и т. д. сферам ближайшего окружения. Локальная плотность определялась как плотность атомов Fe, попавших в сферу с радиусом, соответствующим первой координационной сфере, окружающей каждый отдельно взятый атом. На рис. 4 представлена зависимость локального магнитного момента, рассчитанного для 170 атомов в центральной части кластера как функция локальной плотности; приведены также средние значения для каждого значения плотности. Регрессионная линия показывает явную тенденцию к уменьшению локального магнитного момента в среднем с увеличением локальной плотности, что качественно соответствует характеру изменения магнитного момента в переходных металлах. Однако сами локальные магнитные моменты имеют значительный разброс по величине. Зонные расчеты ферромагнитного и антиферромагнитного ГЦК—Fe [21], а также расчеты состояния волны спиновой плотности [22] указывают на сложное поведение локального магнитного момента атома Fe в

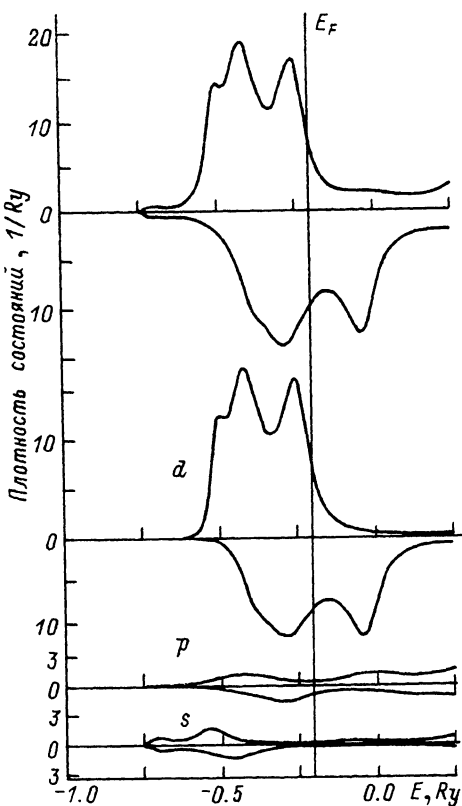


Рис. 3. Усредненная плотность состояний аморфного Fe для двух направлений спина и парциальные вклады s -, p - и d -состояний.

ГЦК структуре. Сравнивая эти результаты с нашими результатами расчета локальных магнитных моментов в a -Fe, можно сделать вывод о сходстве магнитного поведения аморфного железа и ГЦК—Fe, чем и объясняется большой разброс величин локальных магнитных моментов. Действительно, согласно [21, 22], незначительное изменение плотности ГЦК—Fe приводит к существенным изменениям как величины момента [21], так и магнитного упорядочения [22]. По-видимому, сходством с поведением ГЦК—Fe можно объяснить также разброс экспериментальных данных, предсказывающих величину среднего магнитного момента a -Fe [18, 19], поскольку различные условия получения аморфных образцов могут сопровождаться вариациями как средней плотности, так и распределения локальных плотностей. Наши выводы находятся также в качественном согласии с результатами работы [23], в которой в рамках полуэмпирической мо-

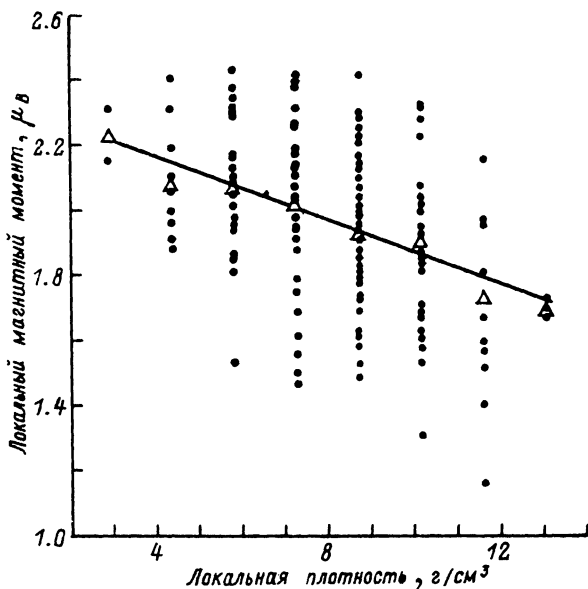


Рис. 4. Зависимость локальных магнитных моментов на различных атомах в образце аморфного Fe от локальной плотности вокруг этих атомов и их регрессионная линия.

Треугольниками обозначены средние значения для каждой плотности.

дели сильной связи было показано, что локальный магнитообъемный эффект в α -Fe сходен с поведением ГЦК—Fe.

Авторы выражают благодарность д-ру Ш. Варга (Š. Varga) за предоставление структурной модели аморфного железа.

Список литературы

- [1] O'Handley. Amorphous Metallic Alloys. Berlin: Academie, 1983. P. 257—282.
- [2] Hafner J., Jank W. // J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. N SA. P. SA239—SA243.
- [3] Varga Š., Krempasky J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 42. P. 7851—7860.
- [4] Kromplewski S., Krey U., Krauss U., Ostermeier H. // J. Magn. Magn. Mat. 1988. V. 73. N 1. P. 5—10.
- [5] Krey U., Kromplewski S., Krauss U. // J. Magn. Magn. Mat. 1990. V. 86. N 1. P. 85—96.
- [6] Bose S. K., Jaswal S. S., Andersen O. K., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 17. P. 9955—9963.
- [7] Bose S. K., Kudrnovsky J., Mazin I. I., Andersen O. K. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 12. P. 7988—7998.
- [8] Turek J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. N 51. P. 10559—107851.
- [9] Nowak H. J., Andersen O. K., Fujiwara T., Jepsen O., Vargas P. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. N 8. P. 3577—3598.
- [10] Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. М., 1983. Т. 1. 382 с.
- [11] Andersen O. K., Jepsen O. // Phys. Rev Lett. 1984. V. 53. N 27. P. 2571—2576.
- [12] Andersen O. K., Jepsen O., Glötzel D. // Highlights of condensed matter theory / Ed. F. Bassani, F. Fumi and M. Tosi. Amsterdam, North-Holland, 1985. P. 59—176.
- [13] Haydock R. // Solid State Physics. N. Y.: Academic, 1980. V. 35. P. 216—294.
- [14] Концевой О. Ю., Мрясов О. Н., Лихтенштейн А. И., Губанов В. А. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 1. С. 293—303.
- [15] Barth U., Hedin L. // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 5. N 13. P. 1629—1642.
- [16] Nex C. M. M. // J. Phys. A. 1978. V. 11. N 4. P. 653—663.
- [17] Beer N., Pettifor D. G. // Electronic Structure of Complex Systems / Ed. P. Paraseau and W. M. Temmerman. N. Y.: Plenum, 1984. P. 769—777.
- [18] Cowlam N., Carr G. E. // J. Phys. F: Met. Phys. 1985. V. 15. N 5. P. 1109—1116.
- [19] Gang Xiao, Chien C. L. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 16. P. 8763—8766.
- [20] Krajčí M., Mraňko P. // J. Phys. F: Met. Phys. 1988. V. 18. N 10. P. 2137—2147.
- [21] Moruzzi V. L., Marcus P. M., Kübler J. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 10. P. 6957—6961.
- [22] Mryasov O. N., Liechtenstein A. I., Sandratskii L. M., Gubanov V. A. // J. Phys.: Condens. Matter. 1991. V. 3. N 39. P. 7683—7690.
- [23] Krauss U., Krey U. // J. Magn. Magn. Mat. 1991. V. 98. N 1. P. L1—L6.

Институт химии твердого тела
УрО РАН
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
7 апреля 1992 г.