

01,09

Роль $3d$ -электронной подсистемы в эволюции зонной структуры, магнитных и оптических свойств соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0-4$)

© Ю.В. Князев¹, А.В. Лукоянов^{1,2}, Ю.И. Кузьмин¹, А.Г. Кучин¹

¹ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: knyazev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 26 июня 2018 г.)

Исследуется эволюция электронной структуры, оптических и магнитных свойств соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0-4$), происходящая при замещении никеля атомами кобальта. В приближении локальной спиновой плотности с поправкой на сильные электронные корреляции в $4f$ -оболочке редкоземельного иона (метод LSDA+U) проведены спин-поляризованные расчеты зонного спектра данных интерметаллидов. Получены величины магнитных моментов ионов эрбия, а также никеля и кобальта при их расположении в различных кристаллографических позициях. Определены параметры обменных взаимодействий для $3d$ -подрешетки переходных металлов. Методом оптической эллипсометрии исследованы спектральные свойства соединений в интервале длин волн $0.22-15 \mu\text{m}$. Экспериментальные частотные зависимости оптической проводимости в области межзонного поглощения света сравниваются с соответствующими характеристиками, рассчитанными из плотностей электронных состояний.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема „Электрон“, № АААА-А18-118020190098-5) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 17-52-45056, 16-52-48012).

DOI: 10.21883/FTT.2019.01.46888.173

1. Введение

Среди обширной группы интерметаллических сплавов, образованных на основе редкоземельных R и переходных T -металлов, большое внимание привлекают соединения семейства $R\text{Ni}_5$. Данные интерметаллиды обладают большим набором интересных физико-химических свойств, обусловленных эффектами кристаллического поля и особенностями обменного взаимодействия d - и f -электронных подсистем. Ряд таких свойств являются уникальными с точки зрения функционального использования, поскольку лежат в основе разработки сплавов для постоянных магнитов, материалов с высокими магниторезистивными и магнитострикционными характеристиками, хладагентов и водородных аккумуляторов [1–7]. Установлено, что в соединениях семейства $R\text{Ni}_5$ частичное замещение никеля атомами других магнитных или немагнитных элементов, трансформируя параметры электронного спектра, кристаллического поля и обменного взаимодействия, оказывает существенное влияние на транспортные и магнитные характеристики. Например, в некоторых псевдобинарных соединениях $R\text{Ni}_{5-x}M_x$ (M — примесный элемент) обнаружены аномалии в концентрационных зависимостях структурных, электрических и термодинамических параметров, намагниченности, магнитной восприимчивости и температур фазовых переходов [8–12]. Такое изменение физических свойств при внедрении примеси в ряде случаев способствует улучшению функциональных характеристик материалов.

Одним из представителей указанной серии интерметаллидов является ErNi_5 , ряд физических свойств которого изучался в работах [8,13–17]. Данное бинарное соединение является ферромагнетиком с температурой Кюри $T_C = 9 \text{ K}$, в окрестности которой наблюдаются резкие аномалии в поведении электрических и магнитных характеристик. При изучении свойств тройных сплавов $\text{ErNi}_{5-x}\text{Cu}_x$ [8], представляющих собой твердые растворы со структурой исходного соединения, был определен характер концентрационного изменения электронных, магнитных и кристаллических параметров. В частности, установлено, что рост числа немагнитных атомов замещения приводит к уменьшению намагниченности и спонтанного магнитного момента, нелинейному ходу магнитной восприимчивости, почти не влияя на изменение величины T_C . Исследование электронной структуры и спектральных свойств показали наличие сильной гибридизации $3d$ -зон Ni и Cu , при этом примесная $3d$ -зона Cu локализована в сравнительно узкой области энергий $\sim 3-5 \text{ eV}$ ниже уровня Ферми E_F [18]. Легирование ErNi_5 атомами Co , обладающими магнитным моментом (в отличие от немагнитных атомов Cu), способствует резкому повышению температуры Кюри. Так, по данным [13], в ErNi_4Co ее величина составляет 320 K , в ErNi_3Co_2 — 395 K , а в ErNi_2Co_3 — 630 K (в бинарном ErCo_5 $T_C = 986 \text{ K}$). При этом эксперименты по дифракции нейтронов [19] показали, что полный магнитный момент такой системы уменьшается по мере роста содержания примеси кобальта. Причина такого

уменьшения состоит в том, что магнитные моменты Co и Er направлены антипараллельно друг относительно друга. Данные измерения показали также, что объем кристаллической решетки возрастает с увеличением уровня легирования, а ось легкого намагничивания в таких соединениях ориентирована параллельно оси c кристалла. В настоящей работе приводятся результаты расчетов электронной структуры и оптических свойств семейства $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ при изменении x в пределах 0–4. На основе вычисленной плотности электронных состояний обсуждается поведение частотных зависимостей межзонной оптической проводимости. Расчеты и эксперимент позволяют оценить основные характеристики электронного спектра вблизи E_F и их модификацию при увеличении содержания кобальта в сплаве.

2. Методики расчета и эксперимента

Электронная структура интерметаллидов $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0-4$) была получена в рамках расчетов методом LSDA+U [20], который в приближении электронной спиновой плотности учитывает поправку на сильные электронные корреляции на $4f$ -оболочке иона эрбия. Использовался пакет программ TB-LMTO-ASA версии 47 [21] на основе метода линейаризованных маффин-тин (MT) орбиталей в приближении атомных сфер. Интегрирование в обратном пространстве осуществлялось по сетке k -точек с полным числом $8 \times 8 \times 8 = 512$ методом тетраэдров. Орбитальный базис включал MT орбитали для $6s$ -, $6p$ -, $5d$ - и $4f$ -состояний Er, для Ni и Co были включены MT орбитали $4s$ -, $4p$ - и $3d$ -состояний. Радиус MT сферы Er составлял 3.6 а.е., для Ni и Co — около 2.6 а.е. Для учета сильных электронных корреляций в Er в рамках метода LSDA+U для $4f$ -оболочки были использованы величины параметров прямого кулоновского U - и обменного J -взаимодействий, равные $U = 6.5$ eV и $J = 0.7$ eV. Данные значения были ранее получены для Er теоретически и экспериментально в работах [18,22].

Параметры кристаллической структуры исследованных соединений взяты из работы [23]. Были проведены самосогласованные расчеты для двух типов ($2c$ и $3g$) возможных позиций расположения кобальта. Выбирались решения с минимальной полной энергией. В частности, для сплава ErNi_3Co_2 более низкое значение полной энергии оказалось у решения с локализацией примеси в позициях типа $2c$. В свою очередь, в интерметаллиде ErNi_2Co_3 было реализовано смешанное распределение ионов кобальта по позициям типа $2c$ и $3g$. В случае ErNiCo_4 более выгодным оказалось также смешанное распределение кобальта с одним ионом никеля в позиции типа $3g$. Отметим, что экспериментальные данные [24], полученные для некоторых соединений семейства $R\text{Ni}_{5-x}\text{Co}_x$, также свидетельствуют о заполнении кобальтом как $2c$ -, так и $3g$ -позиций. При этом для значений $x = 2-3$ преобладает заполнение $3g$ -позиций.

Метод получения изучаемых соединений и их аттестация детально описаны в работе [8]. Спектральные характеристики образцов исследованы в интервале длин волн $0.22-15 \mu\text{m}$ ($0.083-5.64$ eV). Эллипсометрическим методом при одно- и двукратном отражении света от зеркальных поверхностей образцов, приготовленных механическим полированием на алмазных пастах, измерялись оптические постоянные — показатели преломления и поглощения. Частотная дисперсия этих параметров, полученных в широком интервале длин волн, дает возможность рассчитать целый ряд функций, характеризующих спектральный отклик отражающей среды. В данной работе мы рассматриваем поведение спектров оптической проводимости — наиболее чувствительного параметра, описывающего особенности частотной зависимости и интенсивности взаимодействия света с электронной системой исследуемого материала.

3. Расчет электронной структуры и магнитных параметров

Значения магнитных моментов, полученных в самосогласованных расчетах электронной структуры $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$, представлены в табл. 1. Из-за нескомпенсированной антипараллельной ориентации магнитного (спинового) момента $4f$ -электронов Er и моментов Ni и Co данный тип упорядочения является ферримагнитным. Примечательно, что для $x = 2$ магнитный момент $4f$ -электронов Er, составляющий $\sim 3 \mu_B/\text{Er}$, почти полностью компенсируется моментами ионов Ni и Co. Во всех сплавах данной серии магнитный момент кобальта находится в интервале значений от 1.14 до $1.28 \mu_B/\text{Co}$, а ионов никеля — от 0.19 до $0.39 \mu_B/\text{Ni}$. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными, согласно которым моменты ионов Co и Er направлены противоположно, а магнитный момент узлов Co/Ni в зависимости от типа позиции находится в пределах $0-1.2 \mu_B$ [19]. Близкие по величине значения магнитных моментов ионов кобальта $1.54 \mu_B/\text{Co}$ были определены для сплавов $\text{HoNi}_{5-x}\text{Co}_x$ из экспериментов по дифракции нейтронов [25].

При исследовании магнитных свойств интерметаллидов $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ выделяют три типа взаимодействий: $R-R$, $R-T$ и $T-T$. Рассчитанные в данной работе величины обменных параметров типа $T-T$ для $3d$ -подре-

Таблица 1. Величины магнитных моментов ионов (в μ_B) в $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ для $x = 0-4$

| Ион | ErNi_5 [22] | ErNi_4Co [22] | ErNi_3Co_2 | ErNi_2Co_3 | ErNiCo_4 |
|-------------|----------------------|-------------------------------|----------------------------|----------------------------|-------------------|
| Er | 3.06 | 3.01 | 3.04 | 3.07 | 3.11 |
| Ni ($2c$) | -0.13 | -0.24 | — | — | — |
| Ni ($3g$) | -0.19 | -0.27 | -0.34 | -0.37 | -0.39 |
| Co ($2c$) | — | -1.21 | -1.14 | -1.23 | -1.28 |
| Co ($3g$) | — | — | — | -1.22 | -1.26 |

Таблица 2. Величины рассчитанных параметров обменных взаимодействий (в meV) для 3d-подрешетки в $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ для $x = 0-4$

| Обмен | ErNi_5 [22] | ErNi_4Co [22] | ErNi_3Co_2 | ErNi_2Co_3 | ErNiCo_4 |
|-----------------|----------------------|-------------------------------|----------------------------|----------------------------|-------------------|
| Ni (2c)–Ni (2c) | 1.0 | – | – | – | – |
| Ni (2c)–Ni (3g) | 1.6 | 1.0 | – | – | – |
| Ni (3g)–Ni (3g) | 2.5 | 2.3 | 3.1 | 3.3 | – |
| Ni (2c)–Co (2c) | – | 8.2 | – | – | – |
| Ni (3g)–Co (2c) | – | 13.6 | 13.8 | 11.8 | 10.8 |
| Ni (3g)–Co (3g) | – | – | – | 13.0 | 11.6 |
| Co (2c)–Co (2c) | – | – | 23.5 | 22.3 | 17.8 |
| Co (3g)–Co (2c) | – | – | – | 64.3 | 53.1 |
| Co (3g)–Co (3g) | – | – | – | – | 56.6 |

шетки представлены в табл. 2. Обменные взаимодействия в 3d-подрешетке вносят существенный вклад в величину температуры Кюри в соединениях RNi_5 и сплавов, образованных на их основе. Для $\text{HoNi}_{5-x}\text{Co}_x$ из экспериментальных данных суммарный вклад обменных взаимодействий типа $R-R$ и $R-T$ в T_C был оценен как 17 К (1.4 meV) [25]. Как видно из табл. 2, данная величина сравнима с самыми минимальными значениями параметра обменного взаимодействия в 3d-подсистеме, поэтому взаимодействиями типа $R-R$ и $R-T$, как показано в [25], можно пренебречь. При этом значение температуры Кюри удастся оценить по расчетным параметрам обменного взаимодействия только в 3d-подрешетке, а наибольшие значения этих параметров находятся в первой координационной сфере с ближайшими соседями.

В бинарном ErNi_5 обменные параметры взаимодействия пар Ni–Ni невелики, составляют от 1.0 до 2.5 meV и соответствуют низкой температуре Кюри [22]. Присутствие магнитных моментов кобальта величиной $\sim 1.2 \mu_B/\text{Co}$ приводит к существенному увеличению параметров обменного взаимодействия в 3d-подрешетке в 10–25 раз (см. табл. 2). Значения обменов пар Ni–Co составляют от 8.2 до 13.8 meV и превышают параметры обмена Ni–Ni на порядок, внося значительный вклад в предполагаемые более высокие температуры Кюри $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ для $x = 4$. Максимальные величины обменных взаимодействий были рассчитаны для ионов кобальта в 3d-подрешетке в составах ErNi_3Co_2 , ErNi_2Co_3 и ErNiCo_4 , которые составили от 17.8 до 64.3 meV. Самые большие взаимодействия получены для обменных взаимодействий с участием ионов Co в позиции 3g. Аналогичное увеличение обменных параметров было обнаружено в интерметаллидах TbNi_4Co и TbNi_4Fe [26], в которых увеличение расчетных параметров Ni–Co/Fe обменного взаимодействия согласуется с пропорциональным ростом T_C .

Полные плотности электронных состояний $N(E)$ соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) для двух направлений спина \uparrow и \downarrow при замещении никеля атомами кобальта представлены на рис. 1. Здесь же показано энергетическое распределение парциальных плотностей для 4f-электронов Er, а также для 3d-электронов Ni и

Co. Самые интенсивные и узкие пики полной плотности состояний определяются локализованными 4f-электронами эрбия. Эти состояния в заполненной подзоне со спином \uparrow располагаются интервале 7–8 eV ниже уровня Ферми (E_F). В частично заполненной \downarrow -подзоне благодаря учету корреляций в системе 4f-электронов данные состояния локализованы в интервале 5.5–6.5 eV ниже E_F и вблизи 1 eV выше E_F . Выше E_F небольшой по величине вклад в $N(E)$ вносят также частично заполненные 5d-состояния Er (не показаны на рисунках).

Во всех изучаемых интерметаллидах полная плотность состояний $N(E)$ представлена широкой зоной, расположенной при энергиях от 5 eV ниже E_F до 1 eV выше E_F . Расчет показал, что формирование данной области повышенных значений $N(E)$ связано преимущественно с 3d-зонами Ni и Co. В бинарном ErNi_5 структура плотности состояний определяется в основном 3d-электронами никелевой подрешетки и почти идентична для обеих спиновых проекций. С увеличением содержания кобальта в сплавах зависимость $N_{\downarrow}(E)$ остается почти без изменений, тогда как форма $N_{\uparrow}(E)$ существенно трансформируется. При этом глубокий минимум, наблюдаемый в $N_{\uparrow}(E)$ соединений ErNi_5 и ErNi_4Co вблизи ~ 2 eV, постепенно с ростом x становится менее выразительным и смещается в сторону уровня Ферми. Анализ парциальных составляющих в полную плотность состояний показывает, что 3d-зоны Co вносят вклад во всей области высоких значений $N(E)$. Кроме того, интенсивность максимумов, связанных с 3d-состояниями кобальтовой подрешетки, существенно возрастает с повышением концентрации атомов данного элемента. Следует отметить, что характер распределения примесных зон кобальта, полученный в данной работе, кардинально отличается от распределения соответствующих зон меди, ранее предсказанного в расчетах и наблюдаемого в оптических спектрах изоструктурных соединений серии $\text{RNi}_{5-x}\text{Cu}_x$ [18,27,28]. В плотностях электронных состояний данных интерметаллидов при замещении Ni атомами Cu в ограниченной области энергий 3–5 eV формируется новая структура с максимумом при ~ 4 eV ниже E_F . Характерно, что локализация этой структуры, генетически связанной с атомами примеси, остается

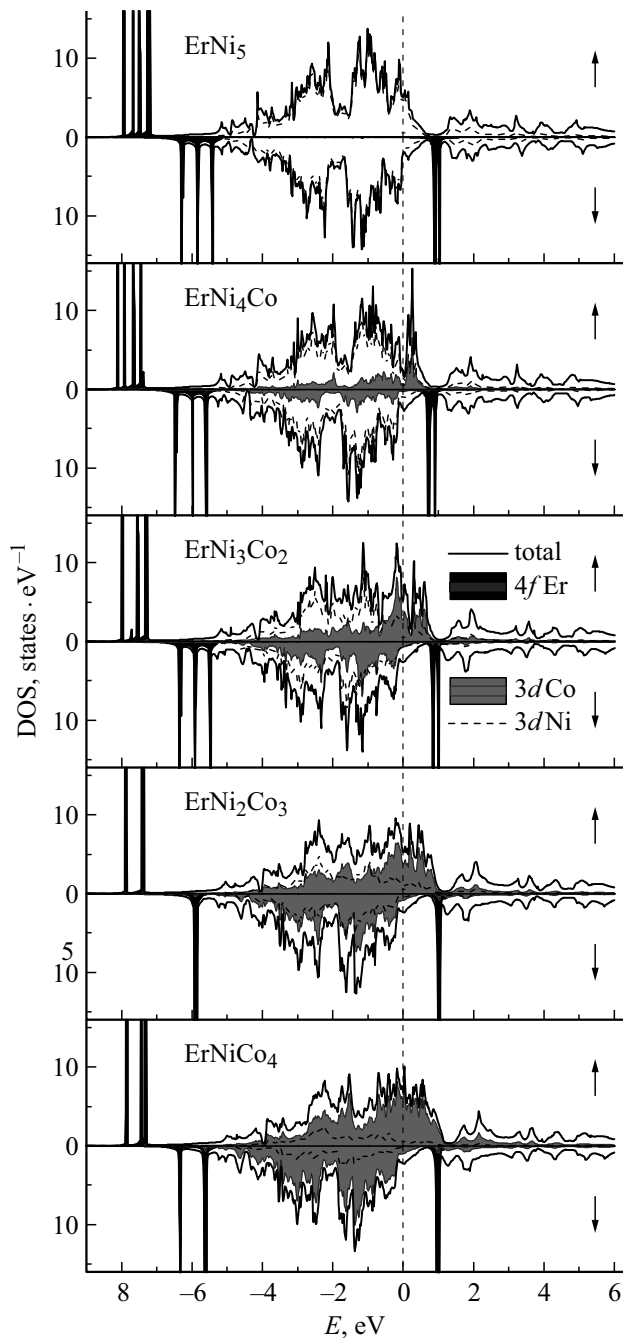


Рис. 1. Полные и парциальные (для $4f$ -электронов Er и $3d$ -электронов Ni и Co) плотности электронных состояний соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$).

постоянной при всех концентрациях, а ее интенсивность при увеличении x постепенно возрастает.

4. Оптическая проводимость

Экспериментальные зависимости оптической проводимости от энергии падающего света $\sigma(E)$, полученные для соединений семейства $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$), представлены на рис. 2 (кривые сдвинуты по

оси ординат относительно друг друга на 10 единиц). Наблюдаемая частотная дисперсия данных характеристик, типичная для сред с металлическим типом электропроводности, определяется двумя типами поглощения света: внутри- и межзонным. В низкоэнергетическом интервале $E < \sim 0.5 \text{ eV}$ резкий спад проводимости связан с внутризонным (друдевским) механизмом взаимодействия электронов с электромагнитной волной ($\sigma \sim \omega^{-2}$, где ω — частота света). С ростом энергии падающего света немонотонный характер поведения $\sigma(E)$ указывает на доминирующую роль квантового поглощения, связанного с межзонами электронными переходами. Структура спектров оптической проводимости всех соединений в этом интервале характеризуется интенсивной абсорбционной полосой, профиль которой постепенно трансформируется с изменением содержания примеси. В исходном бинарном соединении ErNi_5 (верхняя кривая) форма кривой $\sigma(E)$ носит ярко выраженный двухпиковый характер (максимумы при 1.1 и 2.3 eV) с ассиметричными склонами. По мере замещения Ni атомами Co интенсивность второго пика сначала существенно падает, а затем ($x = 3, 4$) данная структура становится незаметной на фоне низкоэнергетического склона полосы поглощения. Одновременно с ростом x в зависимостях $\sigma(E)$ наблюдается образование нового максимума при энергии $\sim 3 \text{ eV}$, не проявляемого в спектре бинарного сплава.

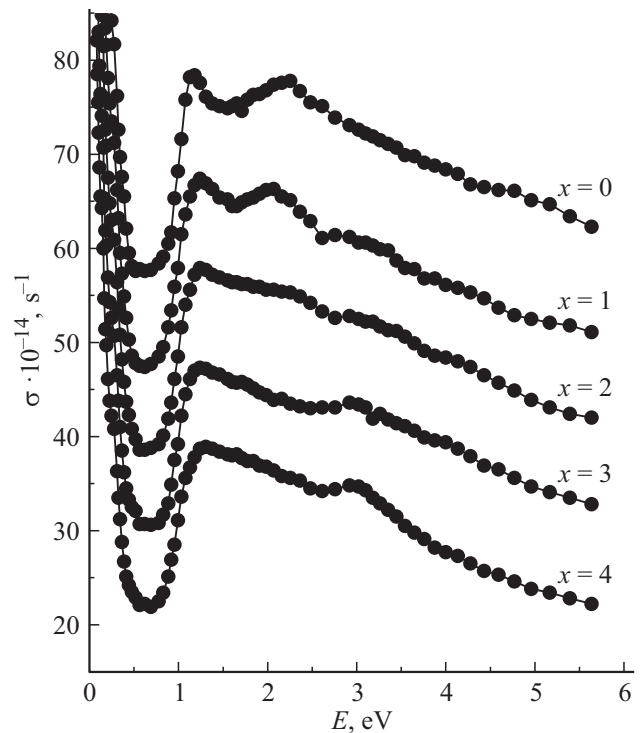


Рис. 2. Дисперсионные зависимости оптической проводимости соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$. Кривые сдвинуты по оси ординат относительно друг друга на 10 единиц.

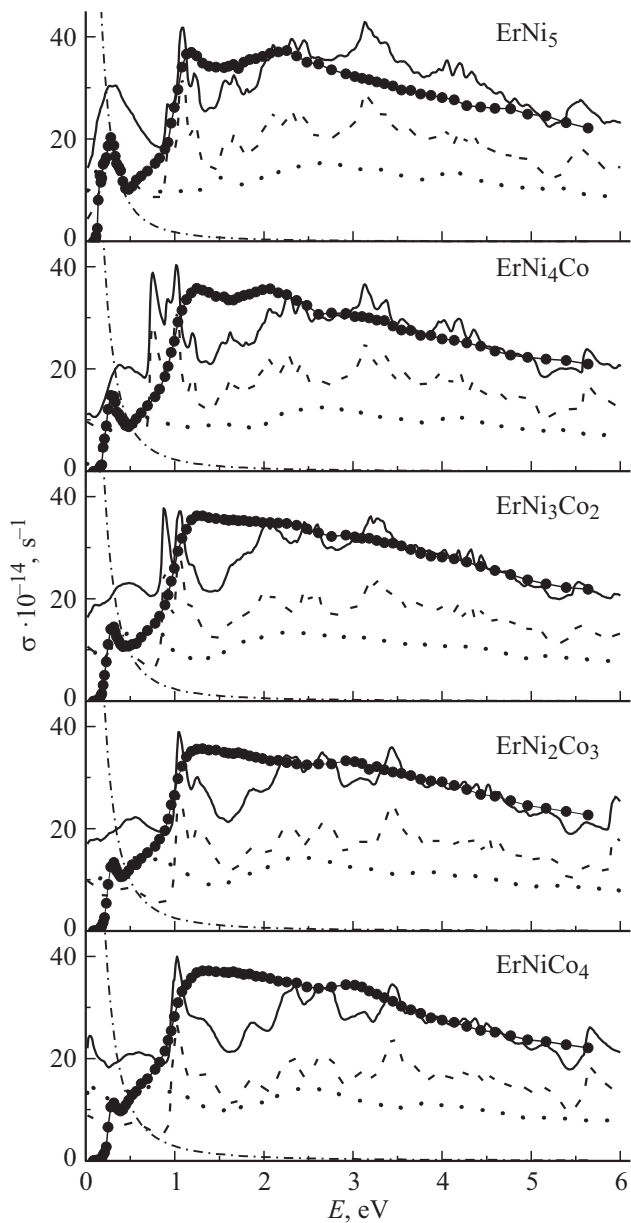


Рис. 3. Спектры межзонной оптической проводимости соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$. Точки — эксперимент, штрихпунктирная линия — друдевский вклад, сплошная кривая — расчет из полной плотности состояний, штриховая и пунктирная линии — вклады от \uparrow и \downarrow электронных подсистем.

Изменения спектрального профиля частотных зависимостей оптической проводимости в процессе увеличения содержания Co вызваны трансформацией электронной структуры данных соединений, происходящей, главным образом в пределах валентной зоны. В связи с этим, представляет интерес сопоставить экспериментальные зависимости $\sigma(E)$, полученные в области полосы межзонного поглощения, с соответствующими характеристиками, рассчитанными из плотностей электронных состояний. Результаты такого расчета представлены на рис. 3 в произвольных единицах. Межзонные вклады в

проводимость $\sigma_{\text{мз}}(E) = \sigma(E) - \sigma_{\text{Д}}(E)$ получены вычитанием друдевской составляющей из экспериментальных спектров. Теоретические зависимости $\sigma_{\text{мз}}(E)$ были определены по методу [29] и выражаются интегральными функциями на основе сверток парциальных плотностей состояний на каждом неэквивалентном ионе элементарной ячейки с учетом правил отбора по квантовым числам $n' = n \pm 1$. Затем все полученные результаты были просуммированы в соответствии с количеством ионов данного типа в элементарной ячейке. Расчет показал, что наиболее существенный вклад в конечную величину $\sigma_{\text{мз}}(E)$ для всех сплавов дают свертки по $5d-4f$ - и $5d-6p$ -состояниям Er. При этом вклад $3d-4p$ -переходов на ионах Ni, наиболее сильно проявившийся в бинарном ErNi_5 , с уменьшением концентрации данного элемента постепенно падает. В тройных интерметаллидах $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ ($x = 1, 2, 3, 4$) к перечисленным выше типам переходов добавляются свертки $3d-4p$ -состояний Co, величина которых, по мере увеличения уровня легирования, монотонно возрастает. Все указанные свертки парциальных плотностей состояний, при аддитивности вкладов от \uparrow - и \downarrow -подзон, ответственны за образование широких полос межзонного поглощения, форма которых плавно модифицируется с уменьшением содержания атомов Ni. Следует отметить, что тонкая структура рассчитанных кривых $\sigma_{\text{мз}}(E)$ связана, главным образом, с переходами в \uparrow -электронной подсистеме, что хорошо проявилось на рис. 3.

Сравнение показывает, что дисперсия теоретических кривых $\sigma_{\text{мз}}(E)$ качественно воспроизводит ряд особенностей соответствующих зависимостей, полученных из оптических измерений. В расчетах предсказано формирование широкой многопиковой полосы межзонного поглощения света за счет электронных переходов между состояниями, разделенными уровнем Ферми. Вычисления также подтвердили, что характер трансформации спектров $\sigma_{\text{мз}}(E)$, вызванный изменением содержания атомов Co, соответствует тенденции, наблюдаемой в эксперименте. При этом вклад в межзонную проводимость от $3d-4p$ -переходов на ионах Co, формирующий максимум при ~ 3 eV, не является локальным, а рассредоточен в широком диапазоне энергий. В то же время необходимо отметить ряд несоответствий деталей структуры наблюдаемых на опыте и теоретических зависимостей $\sigma_{\text{мз}}(E)$. Экспериментальная кривая оптической проводимости имеет более сглаженный характер частотной зависимости по сравнению с расчетной, что вызвано суперпозицией вкладов от большого числа электронных переходов в возбужденное состояние с различными временами жизни. Кроме того, в данных спектрах не проявился ряд предсказанных расчетом особенностей, в частности, узких пиков поглощения, расположенных почти во всем изучаемом интервале энергий, и широкого минимума в области 1–2 eV при концентрациях примеси $x = 2-4$. Существенно слабее проявился низкоэнергетический вклад до 1 eV. На такие несоответствия, помимо экспериментального фактора,

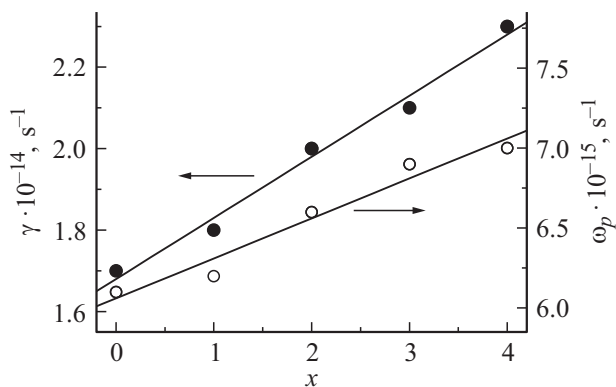


Рис. 4. Зависимости плазменной и релаксационной частот электронов проводимости соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$ от концентрации кобальта.

связанного с приготовлением поверхности образцов, влияет также качественный характер вычислений, проведенных без учета вероятностей межзонных переходов.

В низкоэнергетической области спектра, где внутривозонный механизм возбуждения является доминирующим, а роль межзонных переходов мала, параметры, определяющие дисперсию оптической проводимости, связаны с характеристиками носителей тока — плазменными ω_p и релаксационными γ частотами, значения которых определяются через оптические постоянные по соотношениям Друде. Рассчитанные значения ω_p и γ для всех исследуемых сплавов представлены на рис. 4. Установлено, что частота релаксации γ , аддитивно учитывающая все типы рассеяния электронов при их возбуждении электромагнитной волной, почти монотонно возрастает с увеличением концентрации кобальта в соединении. В интервале $x = 0-4$ такой рост составляет почти 30%. Плазменная частота ω_p , характеризующая коллективные осцилляции электронов проводимости, с изменением концентрации также растет, но существенно слабее. Данный параметр, зависящий от строения электронного спектра и эффектов межэлектронной корреляции, пропорционален плотности состояний на уровне Ферми [30]. С учетом такой взаимосвязи следует отметить, что наблюдаемое слабое изменение ω_p с увеличением примеси кобальта коррелирует с приведенным выше расчетом зоной структуры, где плотность состояний на E_F также показывает небольшой рост. Представленные на рис. 4 значения плазменных и релаксационных частот использовались для расчета друдевского вклада в оптическую проводимость (рис. 3).

5. Заключение

В рамках самосогласованных расчетов, выполненных методом LSDA+U с учетом сильных корреляционных поправок в 4*f*-оболочке эрбия, исследована электронная структура интерметаллических соединений $\text{ErNi}_{5-x}\text{Co}_x$

($x = 0, 1, 2, 3, 4$). Определены основные тенденции изменения энергетических зависимостей плотности электронных состояний и оптической проводимости, происходящие при замещении никеля атомами кобальта. На базе полученных плотностей состояний рассчитаны межзонные оптические проводимости, спектры которых сравниваются с экспериментом. Установлена природа электронных состояний, участвующих в формировании фундаментальной полосы поглощения света. В расчете определены параметры обменных взаимодействий для 3*d*-подрешетки переходных металлов, а также получены величины магнитных моментов ионов эрбия, никеля и кобальта при их расположении в различных кристаллографических позициях. Показано, что присутствие магнитных моментов кобальта с большим магнитным моментом приводит к многократному увеличению параметров обменного взаимодействия, что, в свою очередь, способствует резкому повышению температуры Кюри.

Список литературы

- [1] Concise Encyclopedia of Magnetic and Superconducting Materials / Ed. K.H.J. Buschow. Elsevier, Amsterdam (2005). 1339 p.
- [2] K.A. Gschneidner Jr, V.K. Pecharsky, A.O. Tsokol. Rep. Prog. Phys. **68**, 1479 (2005).
- [3] D.L. Rocco, J.S. Amaral, J.V. Leitão, V.S. Amaral, M.S. Reis, S. Das, R.P. Fernandes, J.P. Araújo, A.M. Pereira, P.B. Tavares, N.V. Martins, A.A. Coelho. J. Phys. D **42**, 055002 (2009).
- [4] Н.В. Мушников. УФН **182**, 450 (2012).
- [5] Magnetism: Materials and Applications / Ed. É. du Trémolet de Lacheisserie, D. Gignoux, M. Schlenker. Springer-Verlag, Berlin, (2005). P. 213–234.
- [6] H. Senoh, N. Takeichi, H.T. Takeshita, H. Tanaka, T. Kiyobayashi, N. Kuriyama. Mater. Sci. Eng. B **108**, 96 (2004).
- [7] X. Zhao, L. Ma. Int. J. Hydrogen Energy **34**, 4788 (2009).
- [8] A.G. Kuchin, A.S. Ermolenko, Yu.A. Kulikov, V.I. Khrabrov, E.V. Rosenfeld, G.M. Makarova, T.P. Lapina, Ye.V. Belozеров. J. Magn. Magn. Mater. **303**, 119 (2006).
- [9] A.G. Kuchin, A.S. Ermolenko, V.I. Khrabrov, G.M. Makarova, E.V. Belozеров. J. Magn. Magn. Mater. **159**, L309 (1996).
- [10] T. Toliński. Mod. Phys. Lett. B **21**, 431 (2007).
- [11] R. Lizárraga, A. Bergman, T. Björkman, H.-P. Liu, Y. Andersson, T. Gustafsson, A.G. Kuchin, A.S. Ermolenko, L. Nordström, O. Eriksson. Phys. Rev. B **74**, 094419 (2006).
- [12] A. Haldar, I. Dhiman, A. Das, K.G. Suresh, A.K. Nigam. J. Alloys Compd. **509**, 3760 (2011).
- [13] H. Oesterreicher, M. Misroch, F.T. Parker. IEEE Trans. Magn. **14**, 665 (1978).
- [14] R.J. Radwański, N.H. Kim-Ngan, F.E. Kayzel, J.J.M. Franse, D. Gignoux, D. Schmitt, F. Y. Zhang. J. Phys.: Condens. Matter **4**, 8853 (1992).
- [15] J.A. Blanco, D. Gignoux, D. Schmitt, A. Tari, F.Y. Zhang. J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4335 (1994).
- [16] B. Š orgić, A. Drašner, Ž. Blažina. J. Alloys Compd. **232**, 79 (1996).
- [17] P.J. von Ranke, M.A. Mota, D.F. Grangeia, A.M.G. Carvalho, F.C.G. Gandra, A.A. Coelho, A. Caldas, N.A. de Oliveira, S. Gama. Phys. Rev. B **70**, 134428 (2004).

- [18] Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin. Phys. Status Solidi B **249**, 824 (2012).
- [19] Z. Hu, W.B. Yelon, G.K. Marasinghe, W.J. James. IEEE Trans. Magn. **31**, 3659 (1995).
- [20] V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein. J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).
- [21] O.K. Andersen. Phys. Rev. B **12**, 3060 (1975).
- [22] A.V. Lukoyanov, Yu.V. Knyazev, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin. J. Magn. Magn. Mater. **368**, 87 (2014).
- [23] Z. Drzazga. Phys. B **130**, 305 (1985).
- [24] O. Rivin, E.N. Caspi, H. Etdedgui, H. Shaked, A. Gukasov. Phys. Rev. B **88**, 054430 (2013).
- [25] В.В. Чуев, В.В. Келарев, А.Н. Пирогов, С.К. Сидоров, В.С. Корякова. ФММ **55**, 510 (1983).
- [26] A.V. Lukoyanov, A. Haldar, A. Das, A.K. Nayak, K.G. Suresh, A.K. Nigam. J. Appl. Phys. **109**, 07E152 (2011).
- [27] Ю.В. Князев, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин, А.Г. Кучин. ФТТ **57**, 853 (2015).
- [28] Ю.В. Князев, А.В. Лукоянов, Ю.И. Кузьмин, А.Г. Кучин. Оптика и спектроскопия **118**, 378 (2015).
- [29] И.А. Некрасов, Ю.В. Князев, Ю.И. Кузьмин, А.Г. Кучин, В.И. Анисимов. ФММ **97**, 13 (2004).
- [30] А.В. Соколов. Оптические свойства металлов. ГИФМЛ, М. (1961). 464 с.

Редактор К.В. Емцев