

## МАГНИТНЫЙ ПЕРЕХОД В 3D-ПОДРЕШЕТКЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $GdMn_{1-x}Ti_xSi$ ДЛЯ $x = 0 - 1$

Мухачев Р.Д.<sup>1,2</sup>, Лукоянов А.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, 620108,  
ул. Софьи Ковалевской, 18, Екатеринбург, Россия

E-mail: [r.d.mukhachev@outlook.com](mailto:r.d.mukhachev@outlook.com)

## MAGNETIC TRANSITION IN THE 3D SUBLATTICE OF $GdMn_{1-x}Ti_xSi$ FOR $x = 0 - 1$

Mukhachev R.D.<sup>1,2</sup>, Lukoyanov A.V.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> M.N. Miheev Institute of metal physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,  
620108, Ekaterinburg, Russia

In this work, we investigated the features of the electronic structure and magnetic properties of ternary intermetallic compounds based on gadolinium, namely,  $GdMn_{1-x}Ti_xSi$  for  $x$  ranging from 0 to 1, in the framework of the DFT based approach accounting for strong electronic correlations in Gd.

В работе исследованы особенности электронной структуры и магнитных свойств тройных интерметаллидов на основе гадолиния  $GdMn_{1-x}Ti_xSi$  в рамках метода DFT+U. Соединение  $GdMnSi$  является ферромагнетиком с температурой Кюри  $T_C = 314$  К, кристаллизуется в тетрагональной структуре  $P4/nmm$   $CeFeSi$  типа (пространственная группа 129) с 2 формульными единицами в элементарной ячейке [1]. Ионы гадолиния занимают позиции 2c (0.25, 0.25,  $Z_{Gd}$ ), ионы марганца и титана – позиции 2a (0.75, 0.25, 0), ионы кремния – позиции 2c (0.25, 0.25,  $Z_{Si}$ ) [2]. Электронная структура и магнитные свойства интерметаллидов рассчитывались в рамках метода DFT+U (GGA+U) [3] в пакете программ Quantum ESPRESSO [4] с использованием обменно-корреляционного функционала в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) версии PBE. Волновые функции раскладывались по плоским волнам, взаимодействия между ионами и валентными электронами учитывались в рамках метода присоединенных плоских волн. Для учета сильных электронных корреляций 4f-электронов Gd была включена U поправка для параметров прямого кулоновского  $U = 6.7$  эВ и обменного (хундовского)  $J = 0.7$  эВ взаимодействий. Данные значения являются общепризнанными для ионов Gd.

Проведенный анализ плотностей электронных состояний и магнитных моментов ионов в  $GdMnSi$ , легированном Ti показал существенное изменение магнитных свойств в зависимости от содержания Mn и Ti. Вместе с магнитным моментом, практически во всех составах  $GdMn_{1-x}Ti_xSi$  обнаружено увеличение ве-

личины плотности электронных состояний на уровне Ферми, что может свидетельствовать о существенном изменении транспортных свойств интерметаллидов. Вместе с ожидаемыми температурами Кюри порядка 300 К выявленные изменения магнитных характеристик и электронной структуры делают систему интерметаллидов  $\text{GdMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Si}$  перспективной для использования в приложениях микроэлектроники.

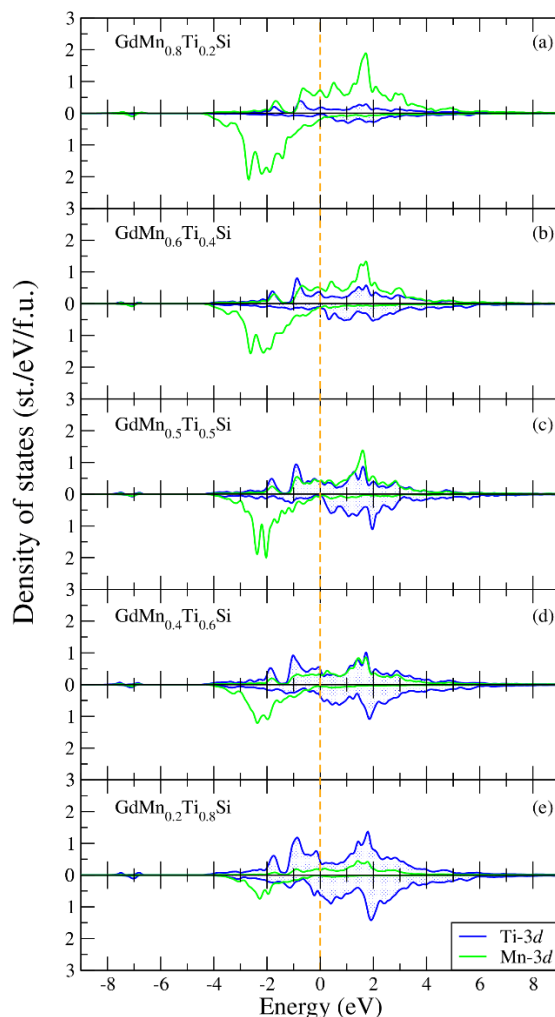


Рис. 1. Плотности 3d-электронных состояний Mn и Ti в соединениях:  $\text{GdMn}_{0.8}\text{Ti}_{0.2}\text{Si}$  (a),  $\text{GdMn}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Si}$  (b),  $\text{GdMn}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{Si}$  (c),  $\text{GdMn}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{Si}$  (d),  $\text{GdMn}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{Si}$  (e).

*Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда (проект № 18-72-10098).*

1. С. А. Никитин, Физика твердого тела 44, 297 (2002).
2. M. Napolitano, F. Canepa, P. Manfrinetti, F. Merlo, J. Mater. Chem. 10, 1663 (2000).
3. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein. J. Phys.: Condens. Matter 9, 767 (1997).
4. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al.. J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009).