

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

ФГОУ ВПО Государственный технологический университет «Московский
институт стали и сплавов»

На правах рукописи

ГОДОНЮК Алексей Викторович

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Специальность 01.04.07 - "Физика конденсированного состояния"

А в т о р е ф е р а т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва, 2007

**Работа выполнена в Московском государственном институте стали и сплавов
(Технологический университет), г. Москва**

Научные руководители: доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник, Э.И. Исаев.
доктор физико-математических наук, профессор,
Векилов Юрий Хоренович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,
Черников Михаил Альбертович
РНЦ «Курчатовский институт»

Кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
Коледов Виктор Викторович
ИРЭ РАН

Ведущая организация: Институт Спектроскопии РАН

Защита состоится " 15 " ноября 2007 г. в 15.30 часов на заседании диссертационного совета Д 212.132.08 при Московском государственном институте стали и сплавов по адресу: 119049, г. Москва, Ленинский проспект 4, ауд. 436.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного института стали и сплавов (Технологический университет).

Автореферат разослан " " 2007 г.

Ученый секретарь Диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор

С. И. Мухин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Несмотря на успехи, достигнутые в изучении и объяснении структурных, электронных и магнитных свойств квазикристаллов, их специфические свойства все еще являются объектом пристального внимания. К примеру, электронный спектр квазикристаллов имеет пиковую структуру и псевдощель на уровне Ферми. Понятно, что подобные особенности электронной структуры влияют на физические свойства квазикристаллов, например, на электронный транспорт и связанные с ним свойства (высокая величина электросопротивления при низких температурах, отрицательный температурный коэффициент сопротивления), или магнитные свойства (квазикристаллы проявляют широкий спектр магнитных свойств: диамагнетизм, парамагнетизм, состояния спинового стекла) и т.д.. Отметим, что квазикристаллы обладают низкой, но конечной электронной плотностью на уровне Ферми, и их температурное поведение проводимости также характерно для сильно легированных полупроводников. Поэтому неясно, к какому же классу материалов их отнести и какое место они занимают в этой иерархии.

Очевидно, что в экспериментальных условиях изучают не идеальные, а реальные квазикристаллы, отличительной чертой которых являются наличие в них разнообразных дефектов, и избежать их появления как в кристаллических, так и квазикристаллических системах невозможно из-за температурного фактора. Согласно теоретическим представлениям, идеальные квазикристаллы не могут обладать ферромагнитным упорядочением. Однако, структурные несовершенства могут изменить свойства идеальных квазикристаллических систем, как это происходит в обычных металлах и полупроводниках. Актуальность данной работы обусловлена фундаментальным характером и новизной решаемых проблем, поскольку в данной работе даны ответы на поставленные выше фундаментальные физические проблемы.

Цель работы

1. Теоретическое исследование и анализ особенностей электронной структуры, поведения волновых функций идеальных икосаэдрических квазикристаллов на

примере их кубических аппроксимант.

2. Изучение магнитных свойств модельной аппроксиманты икосаэдрической квазикристаллической системы $Al_{46-x}Pd_{14}Mn_x$ в зависимости от содержания атомов Mn и степени структурной релаксации.
3. Теоретическое исследование влияния локального окружения и примеси замещения В на магнитные свойства квазикристаллов на примере их периодической аппроксиманты.

Научная новизна

В работе получен ряд новых результатов о природе поведения волновых функций в квазикристаллических системах, в частности показано, что волновые функции в трехмерных (икосаэдрических) квазикристаллах являются «критическими», что было получено из анализа $2p$ -норм волновых функций; проведено изучение скейлингового поведения волновых функций квазикристаллов и показано, что идеальный икосаэдрический квазикристалл находится в состоянии, близком к переходу металл – изолятор; проанализировано появление сильного локального момента на атомах Mn в зависимости от содержания Mn в системе; исследовано влияние ближайшего окружения и наличие примеси замещения В на появление локального магнитного момента на атомах Mn в модельной аппроксиманте к икосаэдрической квазикристаллической системе.

Практическая значимость работы.

Проведены исследования электронных и магнитных свойств икосаэдрических квазикристаллических систем на примере их периодических аппроксимант. Данные исследования позволяют понять природу некоторых специфических электронных и физических свойств икосаэдрических квазикристаллов, например, такие как аномально низкая электропроводность. Более того, на основе анализа $2p$ -норм волновых функций удалось показать, что основным состоянием трехмерного (икосаэдрического)

квазикристалла является критическое состояние вблизи перехода металл – изолятор, что, в частности, оказывает сильное влияние на электронные транспортные свойства системы.

Изучено влияния ближайших соседей и примеси замещения В на появление локального магнитного момента на атомах переходных металлов в икосаэдрических квазикристаллах, в соответствии с экспериментально подтвержденными фактами: сильный локальный магнитный момент на атомах Mn появляется при содержании Mn начиная с 8 ат. %, при этом только небольшая часть атомов Mn обладает локальным магнитным моментом; примесь замещения В и икосаэдрической симметрии влияет на появление сильного локального момента на атомах Mn в системе. Показано, что появление локального момента на атомах Mn сильно зависит от типа ближайших соседей в первой и, возможно, второй координационной сферах, в случае замещения части Al атомами В.

Основные научные положения выносимые на защиту

1. Скейлинговое поведения волновых функций аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов было изучено при помощи соотношения $P_q \sim N^{-D_q(q-1)}$, где P_q - обратные числа участия, N – число атомов в аппроксиманте, q – моменты амплитуд волновых функций, D_q - фрактальная размерность системы. На основе численных расчетов показано, что D_q удовлетворяют следующей последовательности неравенств: $D_0 > D_1 > D_2 > \dots$ ($D_0 = 3$ для всех аппроксимант). Таким образом, спектр квазикристалла имеет мультифрактальный характер (существует набор «критических» показателей).
2. Показано, что мультифрактальное поведение икосаэдрической системы более ярко проявляется для аппроксимант высокого порядка. Режим мультифрактальности означает, что система находится в критическом состоянии и волновые функции являются мультифрактальными мерами с набором критических показателей. Спектр с мультифрактальной размерностью является характерной для состояний вблизи перехода металл – изолятор, поэтому сделан вывод о том, что основным состоянием трехмерного икосаэдрического квазикристалла является критическое состояние перехода металл – изолятор.
3. На основе первопринципных расчетов удалось установить, что появление

локального магнитного момента на атомах Mn в квазикристаллах AlPdMn сильно зависит от количества и типа ближайших соседей. Установлено, что атомы Mn, находящиеся на «стабильных» атомных позициях не обладают большим локальным магнитным моментом. Кроме того, показано, что если поместить атом Mn в «нестабильную» позицию, то он на нем появляется сильный магнитный момент (в частности, «нестабильными» можно считать позиции атомов Mn, в которых он имеет в ближайшем окружении два или более атомов Pd). Получена зависимость величины усредненного магнитного момента на атома Mn в зависимости от количества атомов Pd в ближайшем окружении.

4. Установлено, что примесь замещения В способствует увеличению локального магнитного момента на атомах Mn. Проведен анализ появления сильного локального магнитного момента на атоме Mn в рамках локального критерия Стонера.

Апробация работы.

Материалы диссертации докладывались на следующих конференциях:

- 1) «Electron Microscopy and Multiscale Modeling EMMM-2007», г. Москва, 3-7 Сентября, 2007 г., сборник тезисов.
- 2) «Магнитные свойства икосаэдрических квазикристаллов». Сборник тезисов докладов Всероссийского совещания по квазикристаллам Москва, 8-9 июня 2006 г. РНЦ «Курчатовский институт»
- 3) «Magnetism of Mn-atoms in Al-Pd-Mn approximant: *ab initio* studies»Psi – k, Международная конференция, Германия, 17 – 21 Сентября 2005 г, Книга тезисов докладов, стр. 406
- 4) «9th International Conference on Quasicrystals»May 22 - 26, 2005, Scheman Building, Iowa State University, Ames, IA 50011 USA

- 5) «MISM – 2005», 2005, International conference June 25-30, 2005, Moscow, Moscow State University)
- 6) «Structure and properties of materials with special characteristics», October 14, 2005 ., Moscow Institute of Steel and Alloys, Moscow.

А также на научных студенческих конференциях МИСиС 2003, 2004, 2005 г.г., научных семинарах кафедры теоретической физики.

Основное содержание диссертации опубликовано в 3-х публикациях, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации.

Материал диссертации изложен на 119 страницах машинописного текста, содержит 20 рисунков, 1 таблицу, библиография включает 138 наименований . Диссертация состоит из общей характеристики , четырех глав, заключения и списка литературы.

Краткое содержание работы.

В разделе "ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ" обсуждается актуальность диссертационной работы, формулируются задачи работы, перечисляются основные научные результаты, выносимые на защиту, кратко описывается содержание работы.

В первой главе "ФИЗИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИКРИСТАЛЛОВ" кратко освещено открытие квазикристаллов, приведена их классификация с симметричной точки зрения . Кратко рассмотрены основные способы получения квазикристаллических систем и их морфология. Рассмотрены примеры одномерного идеального квазикристалла (цепочка Фибоначчи), двумерного квазикристалла (паркет Пенроуза) и трехмерного обобщения паркета Пенроуза (сеть

Аммана-Маккея), необходимого для построения структурных модельных квазикристаллов, являющихся отражением реальных систем. Рассмотрены особенности электронных спектров для квазикристаллических объектов разных размерностей, приведена классификация волновых функций (протяженные, локализованные, критические).

В второй главе "ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ" проводилось исследование волновых функций икосаэдрических квазикристаллических систем. Исследование проводилось для пяти первых кубических аппроксимант икосаэдрического квазикристалла (1/1, 2/1, 3/2, 5/3 и 8/5) с центральной декорацией. Элементарная ячейка этих аппроксимант содержат 32, 136, 576, 2440 и 10330 атомов, соответственно. Необходимо отметить, что в реальных квазикристаллах число атомов для соответствующих порядков аппроксимант в элементарной ячейке значительно больше. Например, третья (3/2) аппроксиманта икосаэдрического Al-Pd-Re содержит 2292 атомов в элементарной ячейке и включает s -, p -, и d - орбитали. Основной задачей модельной системы является, конечно же, упрощение расчетов (отметим, что на данном этапе развития компьютерной техники некоторые объекты остаются до сих пор недоступными для обработки), однако, данные упрощения в структуре не являются помехой для исследования влияния квазикристаллической симметрии на характер локализации электронов независимо от атомного состава объекта.

Результаты расчетов показывают, что электронная структура совершенных икосаэдрических квазикристаллов не имеет иерархической щелевой структуры, характерную для одномерных квазикристаллов, хотя и содержит сингулярную часть.

На Рис. 1 показаны кривые $D(\beta)$ (a) и $F(\beta)$ (b), рассчитанные для трех икосаэдрических аппроксимант (2/1, 3/2, 5/3). Видно, что кривые $D(\beta)$ для этих трех аппроксимант почти сошлись к термодинамическому пределу в области $\beta < -1$. Это означает, что термодинамическое количество межуровневых промежутков при $N \rightarrow \infty$ имеет ширину меньшую, чем в традиционных системах (в кристаллических и аморфных системах в термодинамическом пределе зависимость величин межуровневых промежутков от размера системы определяется соотношением $\Delta \propto 1/N$). Рисунок 1 показывает сходимость кривых $F(\beta)$ для этих же аппроксимант вблизи $\beta > -1$, что свидетельствует о заполнении конечной доли зоны более широкими, чем в традиционных

системах, межуровневыми промежутками.

С ростом порядка аппроксиманты пиковая структура плотности состояний значительно растет (см. рис. 2). Это подтверждает сделанный выше вывод о присутствии в энергетическом спектре икосаэдрического квазикристалла сингулярной части, иначе наблюдалась бы сходимостью плотности электронных состояний. Результаты расчетов показывают, что гладкость спектра зависит от энергетического диапазона: энергетический спектр более гладкий в области малых энергий, а сильные осцилляции присутствуют, в основном, при высоких энергиях. С ростом порядка аппроксиманты длина гладкого участка энергетического спектра уменьшается. Поэтому можно предположить, что в термодинамическом пределе (для квазикристалла) сильные осцилляции присутствуют во всем энергетическом интервале и свидетельствует о том, что энергетическая зонная структура квазикристалла практически бездисперсна и, следовательно, электроны имеют почти нулевую групповую скорость и это может являться причиной аномально низкой проводимости квазикристаллов.

Проведенные расчеты хорошо согласуются с расчетами плотности электронных состояний первых четырех периодических в приближении слабой связи, проведенными Карлсоном, и обнаружено образование щелей в области малых энергий спектра $5/3$ аппроксиманты, хотя в энергетическом спектре аппроксимант более низкого порядка подобные щели отсутствуют.

На основе расчетов плотности электронных состояний была определена мера Лебега энергетических спектров соответствующих аппроксимант. Мера Лебега энергетического спектра рассчитывалась как общая длина разрешенных участков в диапазоне энергий $[-6;6]$ (согласно известной теореме о границах спектра, энергетические уровни икосаэдрического квазикристалла лежат в интервале $-6 \leq E \leq 6$). Нормированные на величину $B = \varepsilon_N - \varepsilon_1$ (в расчетах ввиду быстрой сходимости кривых интегральной плотности состояний для различных аппроксимант было принято значение B для $5/3$ аппроксиманты) меры Лебега энергетических спектров аппроксимант $1/1, 2/1, 3/2, 5/3$ составили 0.95, 0.98, 0.98 и 0.97, соответственно. Поэтому можно заключить, что зависимость меры Лебега энергетического спектра от размера аппроксиманты в случае

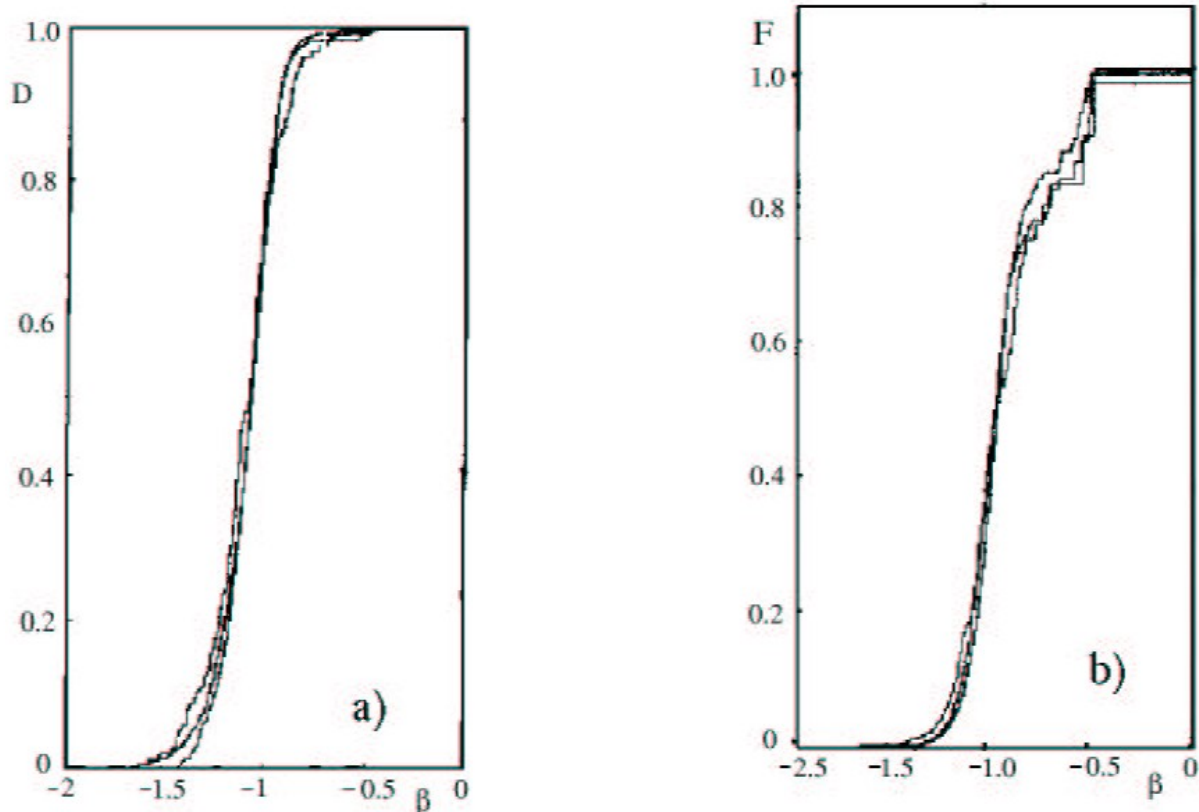


Рис.1. а) Доля $D(\beta)$ межузловых промежутков с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$ для периодических аппроксимант $2/1, 3/2, 5/3$ икосаэдрического квазикристалла. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. При расчете общая ширина зоны принята равной предельной величине $B_\infty=9.69$; б) Доля $F(\beta)$ заполнения зоны межузловыми промежутками с шириной $\Delta E \leq BN^\beta$ для периодических аппроксимант $2/1, 3/2, 5/3$ икосаэдрического квазикристалла. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку аппроксиманты. При расчете общая ширина зоны принята равной предельной величине $B_\infty=9.69$

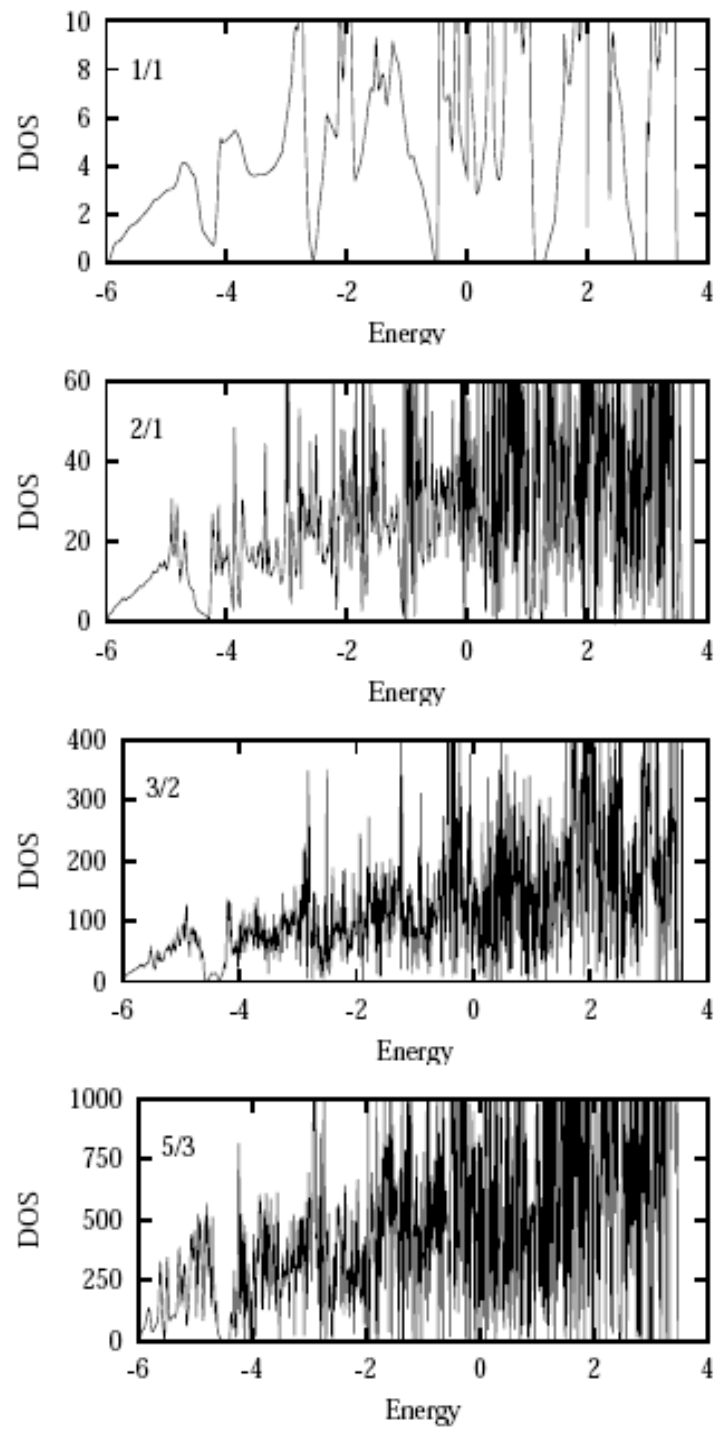


Рис. 2. Плотность состояний для первых четырех аппроксимант (в произвольных единицах).

трехмерных икосаэдрических квазикристаллов мала, в отличие от случая одномерного квазикристалла, когда мера Лебега энергетического спектра аппроксиманты уменьшается с размером системы по степенному закону. Довольно малое различие мер Лебега энергетических спектров двух последних рассчитанных аппроксимант свидетельствует о том, что энергетический спектр трехмерного икосаэдрического квазикристалла занимает на энергетической шкале область конечной ширины. Кроме того, близкие к единице значения нормированных мер Лебега энергетических спектров рассматриваемых аппроксимант и тенденция к сходимости результатов говорит о том, что в спектре икосаэдрического квазикристалла нет щелей существенной величины. Это также является еще одним подтверждением «неканторовости» спектра, полученного на основе картин интегральной плотности для первых четырех периодических аппроксимант.

На Рис. 4 показаны кривые $I_8(\gamma)$, рассчитанные для трех кубических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов: $2/1$, $3/2$, $5/3$. Откуда видно, что кривые $I_8(\gamma)$ достигают термодинамического предела вблизи $\gamma \approx -2.3$. Из этого же рисунка видно, что с увеличением аппроксиманты кривые $I_8(\gamma)$ приближаются к ступенчатой функции со ступенькой вблизи $\gamma \approx -2.3$. Это означает, что в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) $2p$ -нормы ($p=4$) почти всех волновых функций икосаэдрического квазикристалла зависят от размера системы как $\|\Psi\|_8 \approx N^\gamma$, где $\gamma \approx -2.3$. Найденная зависимость $2p$ -норм волновых функций исключает случаи как делокализации ($\|\Psi\|_{2p}^{ext} \approx N^{1-p}$), так и экспоненциальной локализации состояний ($\|\Psi\|_{2p}^{ext} \approx 1$).

Аналогично случаю двумерного квазикристалла было предположено, что $|\Psi|^2 \propto |r|^{-2\alpha}$. Согласно классификации по нормировочному интегралу, волновые функции с подобным поведением следует отнести к критическим, т.к. нормировка функций $|\Psi|^2 \propto |r|^{-2\alpha}$, ($\alpha > 0$) в трехмерном случае может быть осуществлена только при $\alpha > 3/2$. Таким образом, волновые функции аппроксимант являются «критическими» во всем энергетическом интервале (Рис. 4, рис. 5).

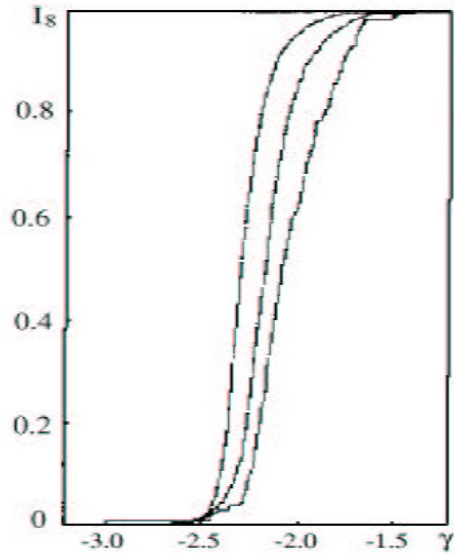


Рис 3. Доля $I_8(\gamma)$ состояний, в которых $\|\Psi\|_8 \leq N^\gamma$, для периодических аппроксимант 2/1, 3/2, 5/3. Более гладкие кривые соответствуют более высокому порядку.

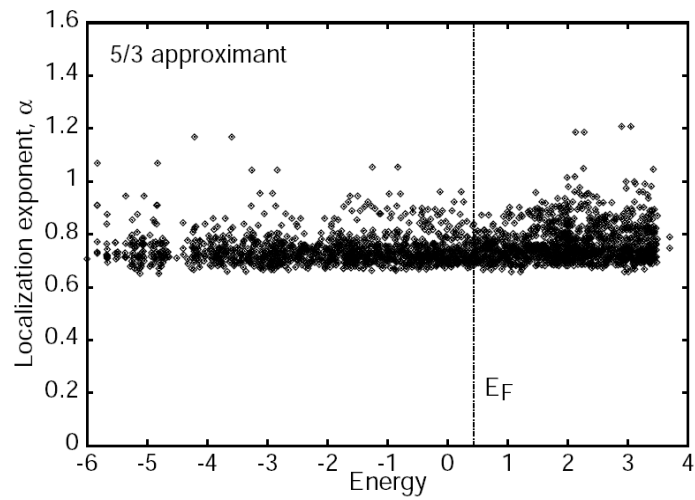


Рис. 4. Распределение показателя локализации α по энергетической зоне.

Скэйлинговое поведение волновых функций было изучено при помощи соотношения

$$P_q \sim N^{-D_q(q-1)},$$

где P_q - обратные числа участия, N - число атомов в аппроксиманте, q - моменты амплитуд волновых функций, D_q - фрактальная размерность системы.

Расчеты показали, что D_q удовлетворяют следующей последовательности неравенств: $D_0 > D_1 > D_2 > \dots$ ($D_0 = 3$ для всех аппроксимант) (Рис. 6). Следовательно, спектр квазикристалла имеет мультифрактальный характер (существует набор «критических» показателей). Как показано на рис. 6 волновые функции критические для всех энергий в зоне. Зависимость является характерной для критических состояний системы. Известно, что системы без характеристической длины масштабирования подчиняются закону однородности по отношению к масштабированию. Отсутствие длины масштабирования означает, что некоторая наблюдаемая \mathbf{F} подчиняется закону однородности $\mathbf{F}(sx) = s^k \mathbf{F}(x)$, где k - т.н. показатель однородности, s - вещественное число. Это означает, что масштабирование переменной x компенсируется масштабированием наблюдаемой \mathbf{F} . Для функций вещественной переменной $\mathbf{F}(x)$ решением уравнения однородности является степенная функция $\mathbf{F}(x) \sim x^k$. Таким образом, функция $\Psi \sim r^{-\alpha}$ является решением уравнения однородности с показателем однородности $k = \alpha$ и мы имеем масштабно-инвариантное поведение системы, характерное для критических состояний. Если $\mathbf{F}(x)$ - функционал от переменных степени q , входящих в определение $\mathbf{F}(x)$ (в нашем случае, моменты амплитуд волновых функций) $\mathbf{F}(x) = \mathbf{F}^{[q]}(x)$. В этом случае, простейшее решение заключается в том, что $k(q)$, определенный через равенство $\mathbf{F}^{[q]}(sx) = s^{k(q)} \mathbf{F}^{[q]}(x)$, является линейной функцией q . Если $k(q)$ имеет значительное отклонение от линейного закона, то масштабное поведение $\mathbf{F}(x)$ аномальное и система имеет мультифрактальное поведение.

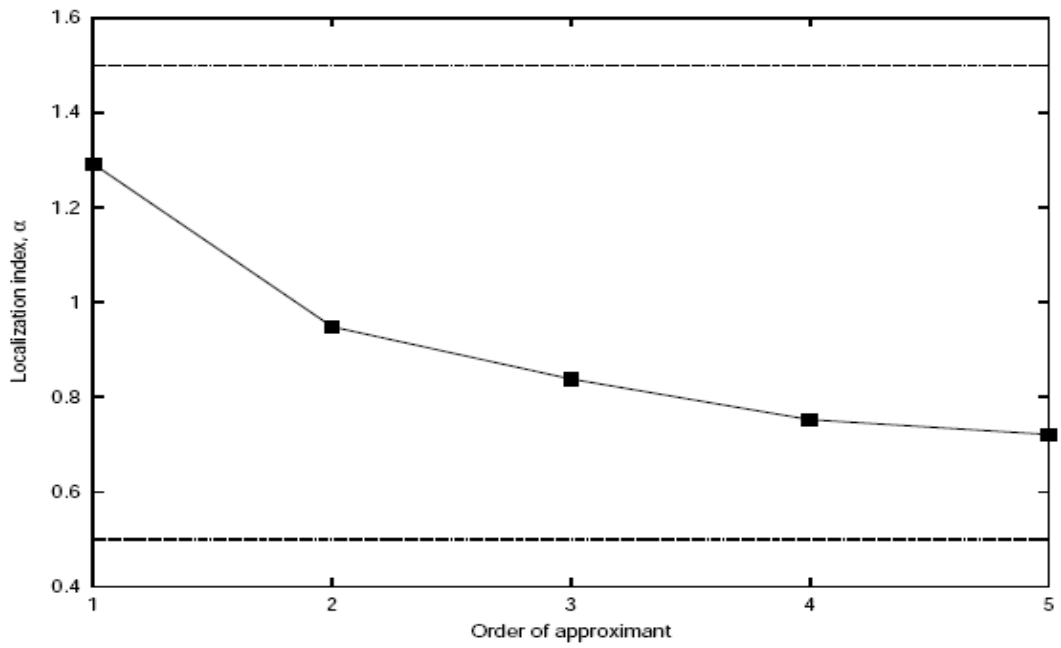


Рис. 5. Показателя локализации α для различных аппроксимант.

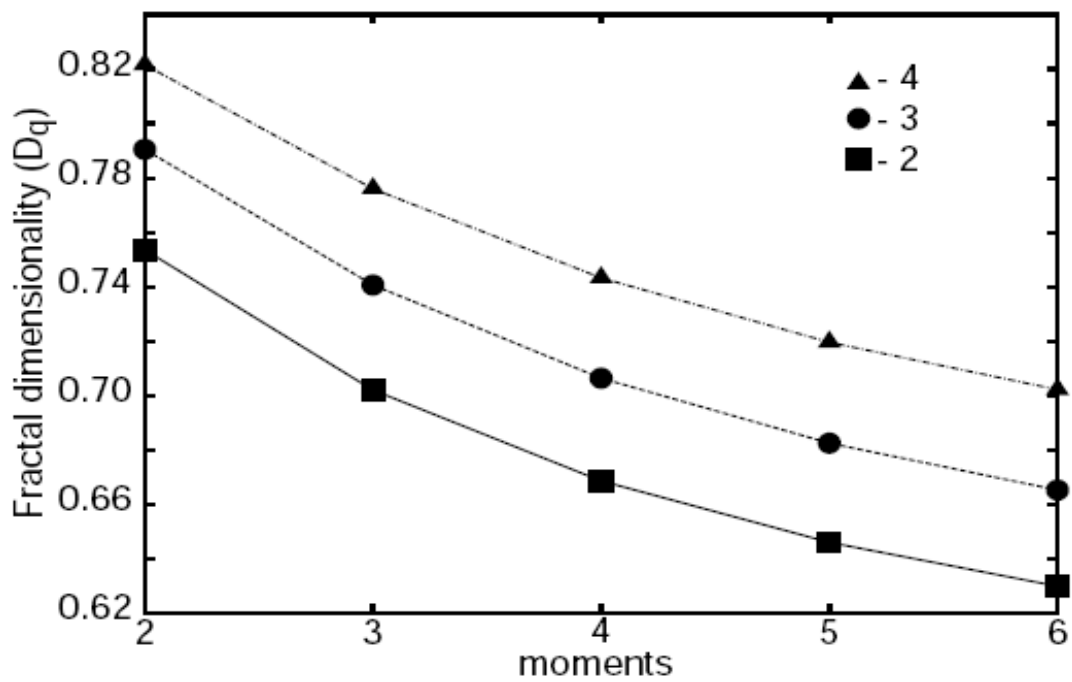


Рис. 6. Фрактальные размерности для различных моментов волновых функций для различных аппроксимант.

Расчеты показывают, что мультифрактальное поведение системы более ярко проявляется для аппроксимант высокого порядка (в нашем случае 4-го порядка). Режим мультифрактальности означает, что система находится в критическом состоянии и волновые функции являются мультифрактальными мерами с набором критических показателей. Спектр с мультифрактальной размерностью является характерной для состояний вблизи перехода металл - изолятор и поэтому был сделан вывод о том, что основным состоянием трехмерного икосаэдрического квазикристалла является критическое состояние перехода металл – изолятор.

В третьей главе "ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ", на которой базируется вторая часть, посвящена описанию теории функционала электронной плотности, на которой базируется часть данной работы, обсуждению основных приближений этой теории, ее преимуществ и недостатков. Рассматриваются современные первопринципные методы псевдопотенциала, такие как PAW псевдопотенциалы, сочетающие в себе точность методик полного потенциала и традиционную гибкость псевдопотенциальных методов. Обсуждается современное состояние теоретической вычислительной физики твердого тела, ее возросшие возможности и значение для современной науки. Проведен краткий анализ теоретических основ первопринципного моделирования свойств и материалов и описаны основные приближения, делающие расчет электронной структуры твердых тел.

В четвертой главе "МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ" основной задачей исследования являлось определение реальной причины появления сильного локального магнитного момента в икосаэдрических квазикристаллах на атомах переходных металлов. В качестве объекта исследования нами была выбрана кубическая 1/1 аппроксиманта икосаэдрического квазикристалла на базе сплава AlPdMn (см. рис. 7). Структура и расположения атомов, а также структурная стабильность модельной аппроксиманты были исследованы в работе Квандта и Элсера.

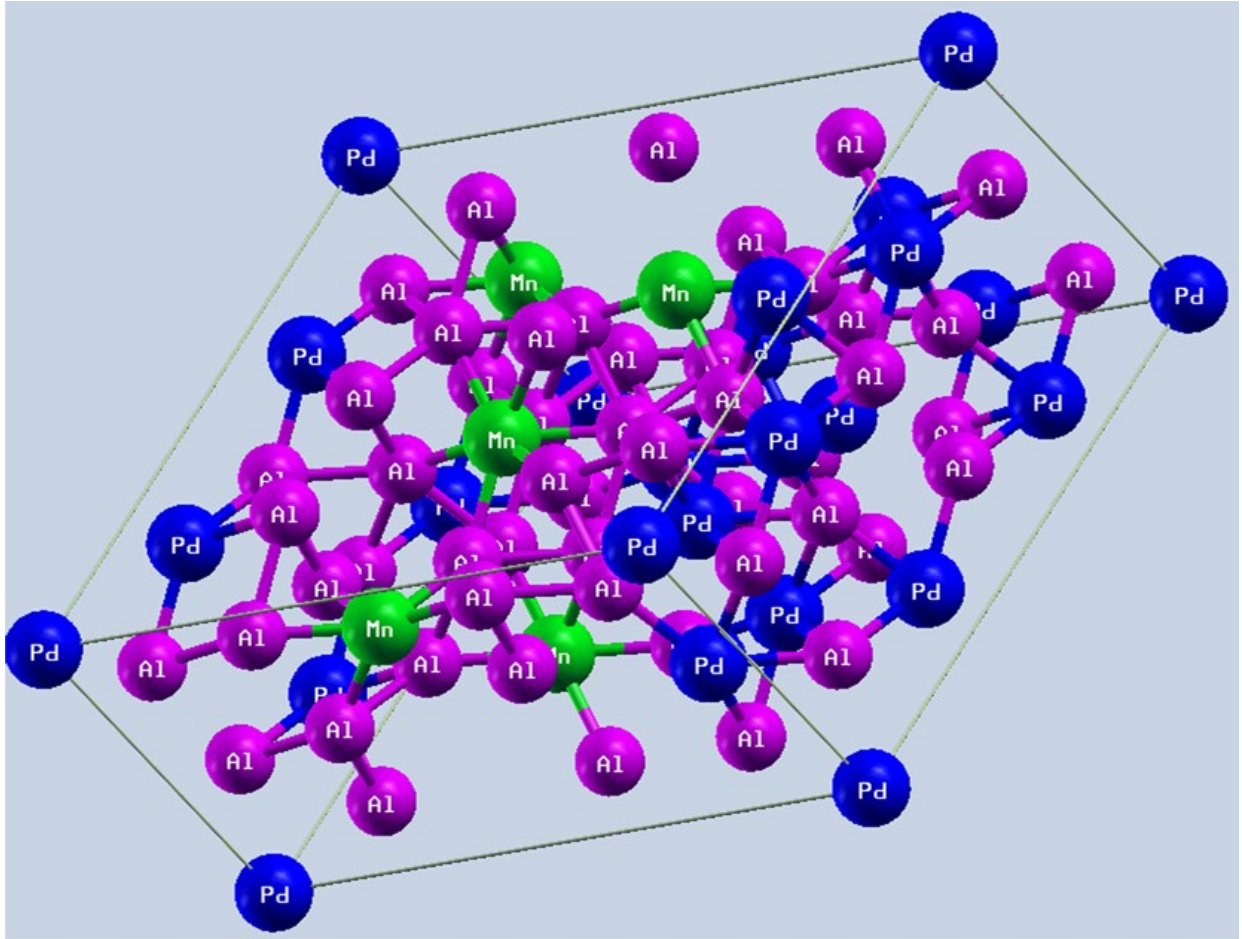


Рис.7. Атомная структура 1/1 модельной аппроксиманты икосаэдрического квазикристалла $\text{Al}_{45}\text{Pd}_{14}\text{Mn}_5$

Эту исходную модельную аппроксиманту мы будем называть "идеальной", все остальные – "модифицированными".

Плотность электронных состояний для системы, атомы которой находятся в "идеальных" позициях представлена на рис. 7. Видно, что плотность электронных состояний попадает точно в псевдощель на уровне Ферми. Отметим, что наличие псевдощели в плотности электронных состояний является одним из основных, но однако не обязательным признаком стабильности кристаллических систем, в том числе и квазикристаллов. Появление псевдощели на уровне Ферми тесно связано со стабилизационным механизмом Юм-Розери и косвенно свидетельствует о стабильности исследуемой структуры. Плотность электронных состояний для "идеальной" системы была также приведена нами для последующего ее сравнения с плотностями электронных состояний исследуемых "модифицированных" систем, полученных из идеальной изменением месторасположения атомов и стехиометрического состава.

Влияние изменения стехиометрического состава на появление локального магнитного момента на атомах Mn было изучено при помощи расчетов ряда систем $Al_{46-x}Pd_{14}Mn_x$ где $1 \leq x \leq 8$ (см. рис. 9). В процессе размещения атомов Mn при его концентрациях $x \geq 6$ (при меньших значениях x данное требование было соблюдено при конструировании модельной аппроксиманты) учитывались определенные структурные правила, приведенные при описании структуры: длина связи между двумя атомами переходных металлов не должна быть менее 2.96 \AA . Кроме этого, проводилась структурная релаксация исследуемых систем и последующий расчет локальных магнитных моментов на атомах Mn. Полученные результаты отображены на рис. (кривая 1) для "идеальной" системы $Al_{46-x}Pd_{14}Mn_x$ и кривая 2) для идеальной системы после структурной релаксации).

Видно, что большой локальный магнитный момент на атомах Mn появляется при концентрации Mn в системе более 8 ат. %, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Однако, как видно из рисунка, некоторые атомы Mn обладают локальным магнитным моментом и при более низких концентрациях Mn в системе ($\sim 4 \text{ ат. \%}$). Это связано с тем, что атомы Mn в нестабильной позиции (что подтверждается структурной релаксацией). Кроме этого видно, что релаксация системы также приводит к понижению локального магнитного момента на атомах Mn, что также достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными. Понижение величины магнитного момента

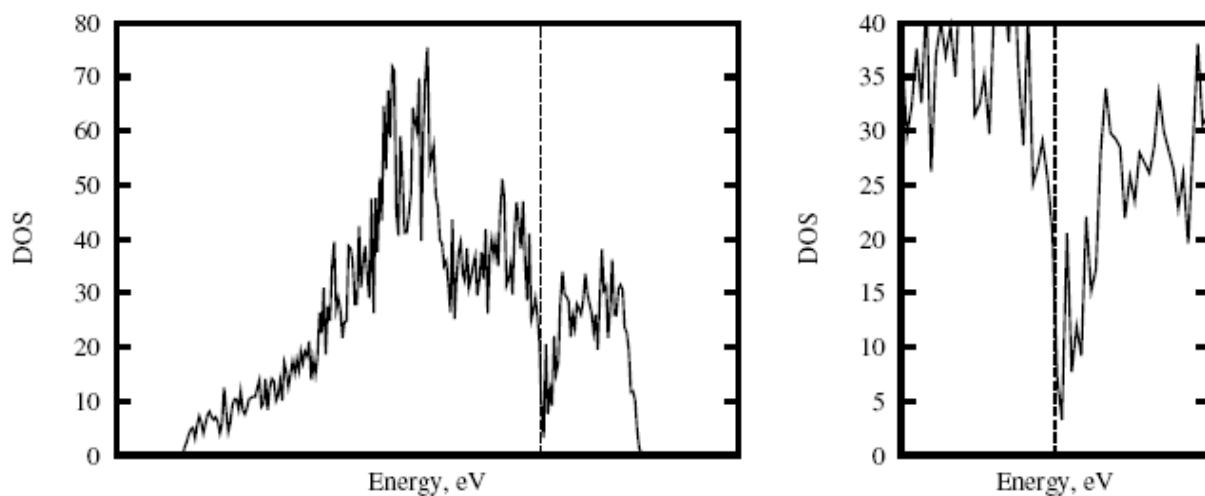


Рис.7. Плотность электронных состояний для "идеальной" системы $\text{Al}_{46}\text{Pd}_{14}\text{Mn}_5$. Рисунок слева отражает полную плотность электронных состояний для системы, рисунок справа является увеличенным фрагментом полной плотности состояний на уровне Ферми, приведен для наглядности. Немагнитный расчет.

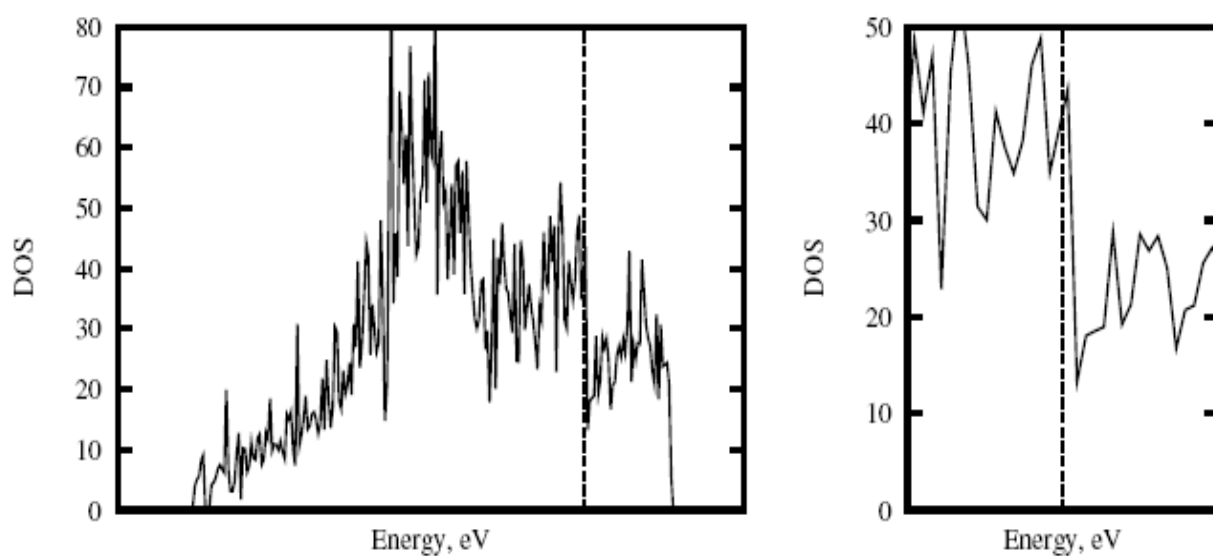


Рис. 8. Плотность электронных состояний для системы $\text{Al}_{46}\text{Pd}_{14}\text{Mn}_5$ где один из атомов Mn имеет в ближайшем окружении три атома Pd. Происходит смещение плотности электронных состояний в область более низких энергий и к более высоким значениям DOS. Немагнитный расчет.

при релаксации, по нашему мнению, происходит из-за того, что атомы Mn переходят в более стабильные позиции в системах с его процентным содержанием более 6 ат. %.

Отметим, магнитные моменты, полученные для идеальной системы достаточно маленькие, максимальный магнитный момент $-0.245 \mu_B$, однако ситуация существенно меняется при изменении состава ближайшего окружения атомов Mn. Проведя анализ ближайшего окружения атомов Mn в идеальной системе мы обнаружили, что максимальное число атомов Pd в их ближайшем окружении не превышает одного атома. Однако ситуация кардинально меняется при изменении состава ближайшего окружения атомов Mn: увеличение числа атомов в ближайшем окружении одного атома Mn до трех и получили на данном атоме Mn магнитный момент величиной $1.894 \mu_B$. Плотность электронных состояний для получившейся системы приведены на рис. 9. Видно, что уровень Ферми сместился в область более низких энергий, что привело к увеличению ПЭС на уровне Ферми. Таким образом, данный результат может служить подтверждением того факта, что атомы Mn в матрице Al находятся в состоянии, близком к переходу из немагнитного в магнитное. Также следует отметить тот факт, что позиция, в которой находился атом Mn до увеличения атомов Pd в ближайшем окружении, была более энергетически стабильна, что подтверждает структурная релаксация полученной системы. Таким образом, большой магнитный момент на атомах Mn возникает в результате локальных нарушений, как изменение позиций атомов Mn, так и окружающих их атомов

Основные результаты и выводы.

1. Исследовано поведение волновых функций икосаэдрических квазикристаллических систем на примере их кубических периодических аппроксимант порядков $1/1$, $2/1$, $3/2$, $5/3$ и $8/5$ с центральной декорацией. Рассчитан показатель локализации α для данных аппроксимант и показано, что волновые функции являются «критическими» во всем энергетическом интервале.

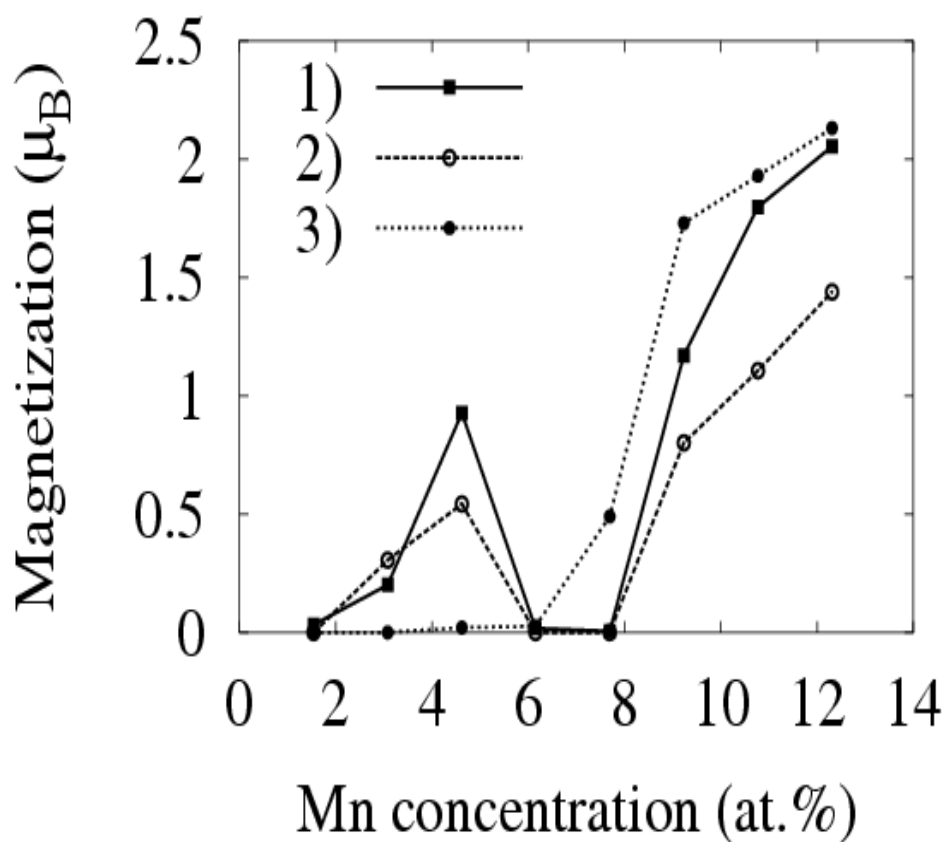


Рис. 9. Влияние стехиометрического состава на появление сильного локального момента на атомах Mn. Кривая 1) показывает увеличение намагниченности "идеальной" систем $\text{Al}_{46-x}\text{Pd}_{14}\text{Mn}_x$ в зависимости от увеличения Mn %. ат.; кривая 2) показывает увеличение намагниченности для релаксированных систем; кривая 3) демонстрирует увеличение намагниченности для систем $\text{Al}_{46-x}\text{Pd}_{14}\text{Mn}_x\text{B}_1$ при увеличении Mn %. ат.

2. Изучено скейлинговое поведение волновых функций кубических периодических аппроксимант икосаэдрических квазикристаллов, показано, что фрактальные размерности систем убывают с увеличением момента плотности вероятности системы. И это соответствует тому, что спектр квазикристалла имеет мультифрактальный характер (существует набор «критических» показателей). Режим мультифрактальности означает, что система находится в критическом состоянии. Спектр с мультифрактальной размерностью является характерным для состояний вблизи перехода металл - изолятор и поэтому был сделан вывод о том, что основным состоянием трехмерного икосаэдрического квазикристалла является критическое состояние перехода металл – изолятор.
3. Исследованы магнитные свойства модельной кубической 1/1 аппроксиманты икосаэдрического квазикристалла $AlPdMn(B)$, содержащей 65 атомов. Показано, что основной причиной появления сильного локального магнитного момента на атомах Mn является структурное несовершенство или энергетическая нестабильность атомов Mn. В рамках данных результатов можно объяснить такие подтвержденные экспериментально специфические магнитные свойства квазикристаллов как появление сильного магнитного момента на атомах Mn начиная с определенного его процентного содержания в сплаве и то, что не все атомы Mn при данных концентрациях обладают локальным магнитным моментом. Кроме этого, проведен анализ влияния примеси замещения B и структурной релаксации на появление локального магнитного момента на атомах Mn. Показано, что локальная икосаэдрическая структура влияет на образование магнитного момента на Mn, однако в этом случае появление локального момента сильно зависит и от состава второй координационной сферы.

Основное содержание диссертации опубликовано в следующих работах:

1. A.V. Godonyuk, E.I. Isaev, Yu.Kh. Vekilov, «First principles study of magnetism in Al-Pd-Mn approximant», Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2005,

2. Yu. Kh. Vekilov, E. I. Isaev, A. V. Godoniuk "Electronic Spectrum of Amman-Kramer-Neri Lattice", *Ferroelectrics*, 2004, 305:239-243

3. Yu. Kh. Vekilov, E. I. Isaev, A. V. Godoniuk "Electronic Spectrum of the Three-Dimensional Penrose Lattice", *Journal of Experimental and Theoretical Physics (Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики)* 2003, vol. 97, No. 5, pp.1005-1009