

Электронная структура и оптические свойства соединений $GdNi_2Mn_x$

Ю.В. Князев¹, А.В. Лукоянов^{1,2}, Ю.И. Кузьмин¹, В.С. Гавико¹

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УРО РАН, г. Екатеринбург, 620990, Россия
E-mail: knyazev@imp.uran.ru; lukoyanov@imp.uran.ru

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, 620002, Россия

Статья поступила в редакцию 7 июня 2017 г., после переработки 4 августа 2017 г.,
опубликована онлайн 26 декабря 2017 г.

Проведены исследования электронной структуры и оптических свойств соединений $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$). В приближении локальной электронной спиновой плотности с поправкой на сильные электронные взаимодействия в рамках метода LSDA + U выполнены спин-поляризованные расчеты электронной структуры. Определены изменения магнитных моментов и обменных взаимодействий в $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$), определяющие рост температуры Кюри при изменении содержания марганца. В широком спектральном интервале 0,22–15 мкм эллипсометрическим методом измерены оптические постоянные соединений. Установлены особенности модификации частотных зависимостей оптической проводимости при изменении содержания марганца. На основе рассчитанных плотностей электронных состояний обсуждается поведение данных дисперсионных кривых в области межзонного поглощения света. Найдены концентрационные зависимости ряда электронных характеристик.

Проведено дослідження електронної структури та оптичних властивостей сполук $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$). У наближенні локальної електронної спінової щільності з поправкою на сильні електронні взаємодії у рамках методу LSDA + U виконано спин-поляризовані розрахунки електронної структури. Визначено зміни магнітних моментів та обмінних взаємодій у $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$), які визначають зростання температури Кюрі при зміні вмісту марганцю. У широкому спектральному інтервалі 0,22–15 мкм еліпсометричним методом виміряно оптичні постійні сполук. Встановлено особливості модифікації частотних залежностей оптичної провідності при зміні вмісту марганцю. На підставі розрахованої щільності електронних станів обговорюється поведінка цих дисперсійних кривих в області міжзонного поглинання світла. Знайдено концентраційні залежності ряду електронних характеристик.

PACS: 81.05.Bx Металлы, полуметаллы и сплавы;

78.20.Ci Оптические константы (включая показатель преломления, комплексную диэлектрическую постоянную, коэффициенты поглощения, отражения и пропускания, коэффициент излучения);

71.20.Lp Интерметаллические соединения.

Ключевые слова: электронная структура, спиновая плотность, межзонное поглощение света.

1. Введение

Интерметаллические соединения на основе редкоземельных R и переходных T металлов формируют обширное семейство материалов, исследование которых имеет важное значение как с технологической, так и с фундаментальной точек зрения. В последние десятилетия активно изучались интерметаллиды RT_2 с ГЦК структурой типа $MgCu_2$ (фаза Лавеса C 15, пространственная

группа $Fd\bar{3}m$), в которых относительно простая кристаллическая решетка сочетается с уникальными для функционального использования свойствами: гигантской магнитострикцией, высокими значениями магнитной анизотропии и большого магнитокалорического эффекта [1–4]. Соединение $GdNi_2$, относящееся к данной группе, обладает большим набором интересных свойств, связанных с сосуществованием различных по своей природе $4f$ - и $3d$ -электронных подсистем. Особенности

гибридизации и обменного взаимодействия между этими подсистемами приводят к аномалиям в температурных зависимостях ряда транспортных и магнитных характеристик [5–7]. При легировании $GdNi_2$ марганцем нестехиометрическая кубическая структура типа $MgCu_2$ сохраняется в интервале концентраций примеси $0 < x < 0,4$, а атомы Mn частично располагаются как в позициях Gd, так и в позициях Ni. В соединениях $GdNi_2Mn_x$ с более высоким уровнем легирования ($x \geq 0,4$) формируется также ромбоэдрическая фаза типа $PuNi_3$, содержание которой с ростом x резко возрастает [6,7]. В исходном соединении $GdNi_2$ атомы Ni обладают слабым магнитным моментом. При внесении марганца возникает дополнительный магнитный момент $3d$ -подрешетки, параллельный моменту никеля. Магнитные моменты Gd и (Mn, Ni) направлены противоположно друг другу, что приводит к монотонному уменьшению результирующего магнитного момента с возрастанием x в сплаве $GdNi_2Mn_x$. Установлено, что увеличение содержания Mn приводит к резкому росту обменных взаимодействий Gd–Mn, Gd–Ni и Mn–Ni и значительному повышению температуры магнитного упорядочения. Максимальная величина температуры Кюри $T_C = 202$ K [7] достигается для соединения $GdNi_2Mn_{0,6}$, что в 2,5 раза выше, чем для $GdNi_2$ ($T_C = 80$ K [6]).

Легирование бинарных соединений RNi_2 марганцем, как показали результаты зонных расчетов [8] ($R = Tb$) и фотоэмиссионных исследований [9,10] ($R = Dy$), приводит к значительной модификации их электронной структуры. Происходит сильная гибридизация $3d$ -состояний Ni и Mn. С ростом примеси Mn наблюдается уширение гибридизованной зоны, а плотность электронных состояний на уровне Ферми E_F возрастает. Полученные результаты указали на прямую корреляцию эволюции зонного спектра с ранее исследованными концентрационными изменениями ряда магнитных и электронных характеристик в этих соединениях. В настоящей работе приводятся результаты расчетов электронной структуры, проведенные методом LSDA+ U , и измерения оптических свойств интерметаллидов $GdNi_2Mn_x$. На основе вычисленной плотности электронных состояний интерпретируются особенности частотных зависимостей межзонной оптической проводимости. Эксперимент и расчеты позволяют оценить основные характеристики электронного спектра и их изменение при увеличении содержания марганца в сплаве.

2. Расчет электронной структуры

Электронная структура соединений серии $GdNi_2Mn_x$ была рассчитана для концентраций $x = 0, 0,4$ и $0,6$. В бинарном $GdNi_2$ кристаллическая решетка характеризуется кубической симметрией с пространственной группой $F\bar{4}3m$ (номер 216). В случае небольшого содержания марганца кристаллическая структура имеет

тип $MgCu_2$ с группой симметрии $Fd\bar{3}m$ (номер 227). При этом в кубической фазе присутствует также фаза с ромбоэдрической структурой типа $PuNi_3$ (группа симметрии $R\bar{3}m$, номер 166), доля которой выше концентрации марганца $x \approx 0,4$ (18,5%) резко растет, достигая при $x = 0,6$ величины 84,5% [6]. Поэтому теоретические расчеты для значений $x = 0$ и $x = 0,4$ проводились для кубических структур соответственно с $a = 14,404(2)$ Å и $a = 7,211(1)$ Å. При вычислениях для значения $x = 0,6$ использовались экспериментальные величины параметров ромбоэдрической структуры ($a = 5,085(1)$ Å и $c = 24,552(2)$ Å) [6]. В кубической структуре при $x = 0,4$ расчет проводился для сверхъядейки $Gd_2Ni_3Mn_4$ с одним ионом никеля, замещенным марганцем. При концентрации $x = 0,6$ вычисления выполнены для сверхъядейки $Gd_3Ni_5Mn_4$ для всех возможных конфигураций размещения ионов марганца, а полученные в результате самосогласованных расчетов спектральные характеристики усреднялись с соответствующим весом конфигурации.

Расчеты выполнялись в рамках метода LSDA+ U [11], сочетающего приближение локальной электронной спиновой плотности с учетом поправки U для коррелированных электронов. Данный метод широко используется и хорошо зарекомендовал себя при расчете свойств интерметаллических соединений $4f$ - и $3d$ -элементов. В работе использовался пакет программ TB-LMTO-ASA на основе метода линейаризованных маффин-тин орбиталей в приближении атомных сфер. Радиус маффин-тин сфер для ионов Gd составлял 3,5 а.е., для Ni и Mn — 2,6 а.е. Орбитальный базис включал: $6s$ -, $6p$ -, $5d$ - и $4f$ -состояния Gd, а также $4s$ -, $4p$ - и $3d$ -состояния Ni и Mn. В методе LSDA+ U учет электронных корреляций производился для $4f$ -оболочки Gd с использованием рассчитанных общепринятых величин параметров прямого кулоновского U и обменного J взаимодействий для ионов гадолиния: $U = 6,7$ эВ, $J = 0,7$ эВ [11,12].

В результате расчетов ионы никеля показали наименьшую величину магнитного момента $0,3 \mu_B/Ni$ в системе с максимальной концентрацией Mn, что достаточно близко к экспериментальному значению $0,5 \mu_B/Ni$, полученному в [6]. Магнитные моменты ионов Mn и Gd ($2,5 \mu_B/Mn$ и $7,2 \mu_B/Gd$) соответствуют экспериментальным величинам $2,5 \mu_B/Mn$ [13] и $7,2 \mu_B/Gd$ [14]. При этом, в согласии с результатами [7], магнитные моменты ионов Ni и Mn направлены противоположно магнитным моментам ионов Gd, что приводит к понижению полного магнитного момента соединения с ростом концентрации марганца [6]. Полученные величины полного магнитного момента составили 7,2, 6,0 и $5,0 \mu_B$ на формульную единицу для $x = 0, 0,4, 0,6$ соответственно, в последнем случае значение получено в результате усреднения самосогласованных значений для всех возможных конфигураций размещения ионов марганца.

Как было показано ранее в экспериментальных работах [6,7], при низких температурах рост концентрации марганца приводит к увеличению температуры Кюри с 80 К [6] до 202 К [7] при $x = 0,6$. Но дальнейшее увеличение концентрации марганца приводит к росту магнитного момента подсистемы $3d$ -металлов и падению полного магнитного момента ячейки вследствие противоположного направления магнитных моментов ионов Gd. Расчеты обменных взаимодействий в $3d$ -подсистеме для интерметаллидов типа R-Ni показывают [15], что при появлении магнитных ионов существенно увеличивается обмен типа магнитный ион (Mn)-Ni, одновременно ионы никеля подмагничиваются. В $GdNi_2Mn_x$ это приводит к большим величинам обменного взаимодействия $J(Mn-Ni) = 10-300$ К в зависимости от расстояния в $3d$ -подрешетке и структурного упорядочения в структуре типа $RuNi_3$ (для $x = 0,6$). Для данной концентрации были рассмотрены 6 возможных конфигураций размещения ионов марганца, а полученные в

результате самосогласованных расчетов характеристики усреднялись с соответствующим весом конфигурации. Наименьшее значение $J(Mn-Ni) = 46$ К для ближайших соседей Ni и Mn рассчитано при $x = 0,4$, поскольку в этом случае ион марганца в ячейке лишь один, что приводит к минимальному магнитному моменту иона никеля $0,07 \mu_B/Ni$. Вместе с тем, повышение концентрации ионов марганца приводит к появлению в системе сильного антиферромагнитного обменного взаимодействия $J(Mn-Mn)$ в интервале 374–868 К в зависимости от расстояния между ионами. Более детальный разбор обменных взаимодействий в $GdNi_2Mn_x$ для больших x затруднен ввиду неопределенности расположения ионов марганца, отсутствия экспериментальных данных об изменении структурных постоянных в зависимости от температуры, а также необходимости учета нестехиометрии в данном соединении [16].

Полные плотности электронных состояний $N(E)$ интерметаллидов $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$) для двух спи-

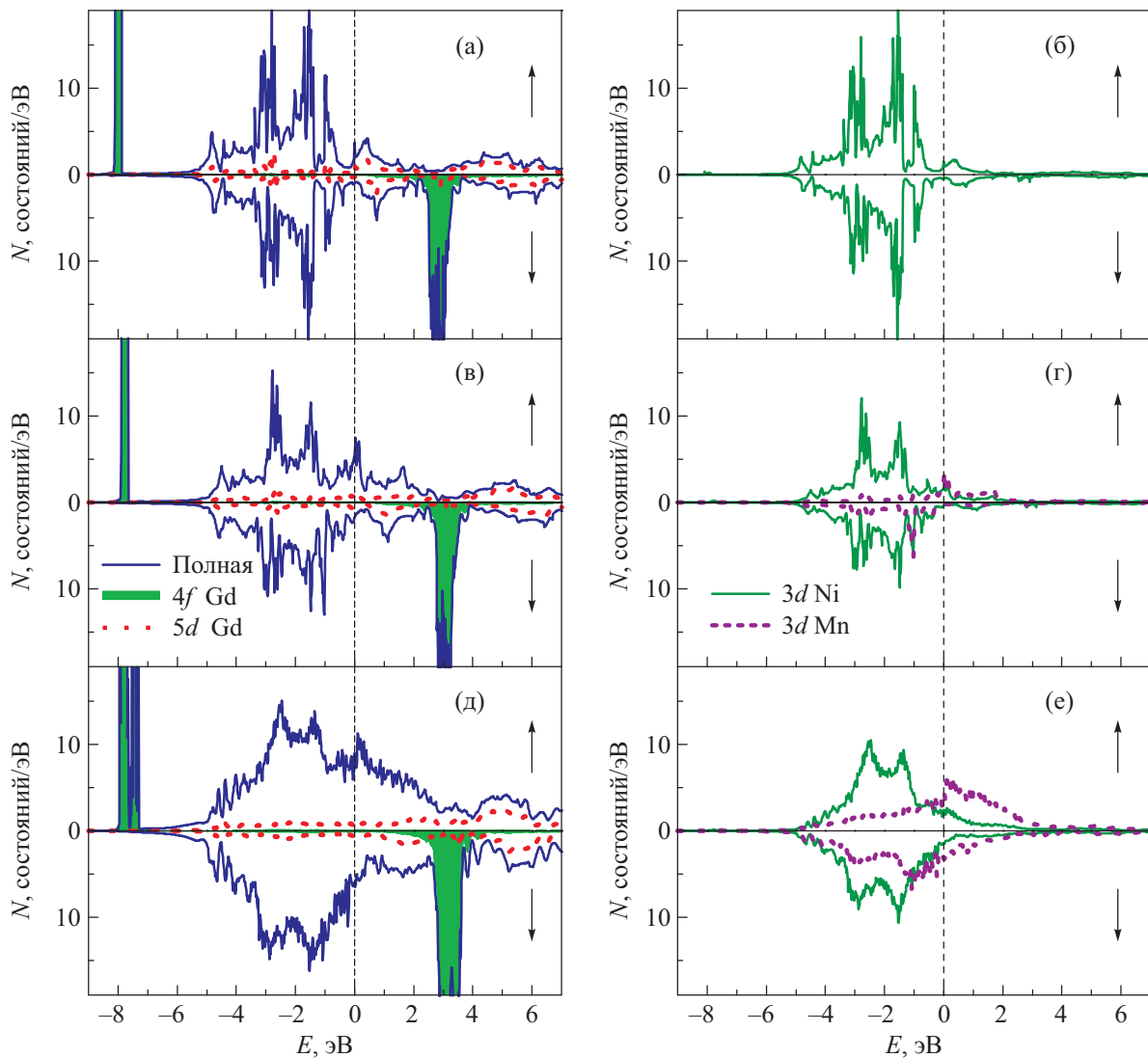


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Полные и парциальные (для $4f$ -, $5d$ - электронов Gd и $3d$ -электронов Ni и Mn) плотности электронных состояний ферромагнитных соединений $GdNi_2$ (а), (б), $GdNi_2Mn_{0,4}$ (в), (г) и $GdNi_2Mn_{0,6}$ (д), (е).

новых направлений представлены на рис. 1. Здесь же показано распределение парциальных плотностей для $4f$ - и $5d$ -электронов Gd, а также $3d$ -электронов Ni и Mn. Во всех трех соединениях электронные состояния до энергии ~ 5 эВ ниже уровня Ферми определяются, главным образом, $3d$ -зонами Ni, формирующими в обеих спиновых проекциях почти идентичные по форме энергетические полосы. В обеих спиновых подзонах области высокой плотности состояний разделены довольно глубоким минимумом. Вклад $5d$ -состояний Gd в $N(E)$ является слабым по величине и распределен почти равномерно во всем диапазоне энергий. Интенсивные максимумы, локализованные при энергиях ~ 3 эВ выше и ~ 8 эВ ниже E_F , показывают парциальные плотности пустых и заполненных $4f$ -состояний Gd. Примесным состояниям марганца соответствуют энергетически протяженные полосы на рис. 1(г), (е). Увеличение содержания Mn приводит к значительному росту интенсивности данной структуры, что особенно проявилось для концентрации $x = 0,6$. С ростом уровня легирования происходит также заметная трансформация спектрального профиля $N(E)$, заключающаяся в основном в том, что в тройных соединениях широкий минимум между двумя группами пиков в интервале от $-2,5$ эВ до $-1,5$ эВ становится менее выразительным, чем в бинарном GdNi_2 , а плотность состояний по обе стороны от E_F существенно возрастает.

3. Результаты и обсуждение

Метод получения исследуемых в настоящей работе соединений, а также их аттестация подробно излагаются в работе [6]. Спектральные характеристики интерметаллидов изучались в интервале длин волн $0,22\text{--}15$ мкм ($0,083\text{--}5,64$ эВ). Эллипсометрическим методом при одно- и двукратном отражении света от зеркальной поверхности образца измерялись оптические постоянные — показатели преломления $n(\lambda)$ и поглощения $k(\lambda)$. По значениям данных параметров рассчитан ряд функций, характеризующих оптический отклик среды, в том числе наиболее чувствительный параметр — оптическая проводимость $\sigma(\omega) = nk\omega/2\pi$ (ω — циклическая частота световой волны), обсуждаемая в настоящей работе. Дисперсионные зависимости $\sigma(\omega)$ для сплавов системы GdNi_2Mn_x ($x = 0, 0,4, 0,6$) представлены на рис. 2. Поведение всех трех кривых, в структуре которых четко определены внутри- и межзонные вклады, является типичным для сред с металлическим типом проводимости. В низкоэнергетическом интервале спектра при $E \leq 0,7$ эВ оптическая проводимость демонстрирует резкий спад, свойственный друдевскому механизму взаимодействия электронов с электромагнитной волной ($\sigma \sim 1/\omega^2$). С ростом частоты света характер дисперсии $\sigma(\omega)$ свидетельствует об определяющей роли межзонного поглощения, порог которого нахо-

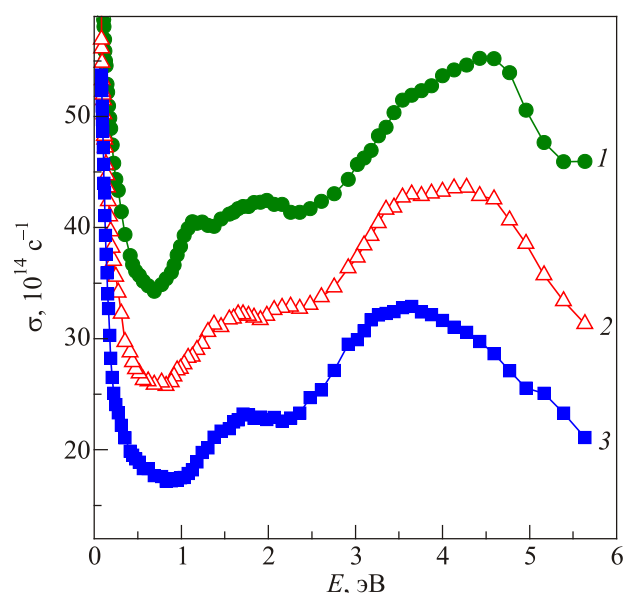


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Дисперсионные зависимости оптической проводимости соединений GdNi_2 (1), $\text{GdNi}_2\text{Mn}_{0,4}$ (2) и $\text{GdNi}_2\text{Mn}_{0,6}$ (3). Кривые сдвинуты вверх по оси ординат относительно друг друга на 10 единиц.

дится вблизи 1 эВ. Наблюдается образование абсорбционных полос, в структуре которых доминируют два максимума различной интенсивности. Видно, что ширина данных полос почти одинакова для всех соединений, тогда как их профиль заметно трансформируется при изменении содержания примеси. Так, интенсивный высокоэнергетический максимум в спектре $\sigma(\omega)$ бинарного GdNi_2 , расположенный при энергии 4,5 эВ (верхняя кривая), при допировании марганцем изменяется по форме и существенно сдвигается в сторону низких энергий. В свою очередь, менее интенсивная полоса поглощения с двумя максимумами, локализованная в исходном соединении в интервале 1–2,5 эВ, в тройных сплавах преобразуется в однопиковую структуру.

Наблюдаемая модификация спектров $\sigma(\omega)$ в области квантового поглощения света вызвана изменением зонной структуры интерметаллидов в процессе их допирования атомами марганца. Представляет интерес сравнить экспериментальные кривые межзонной оптической проводимости каждого соединения $\sigma_{ib} = \sigma - \sigma_D$ (σ_D — друдевский вклад) с соответствующими зависимостями, рассчитанными из плотностей электронных состояний (рис. 1). Последние были определены по методу, используемому в [12], и выражаются интегральными функциями на базе сверток полных плотностей состояний ниже и выше E_F . Результаты такого расчета (в произвольных единицах), выполненного при условии равной вероятности прямых и не прямых переходов, представлены на рис. 3 совместно с экспериментальными кривыми. Сравнение показывает, что как для бинарного, так и для тройных соединений частотные зависимости рассчитанных межзонных проводи-

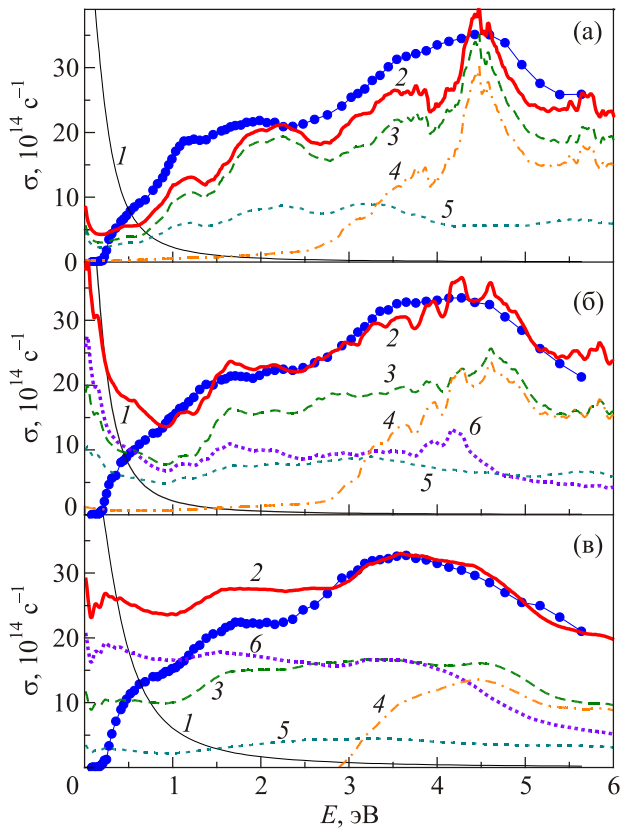


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Спектры межзонной оптической проводимости соединений $GdNi_2$ (а), $GdNi_2Mn_{0,4}$ (б) и $GdNi_2Mn_{0,6}$ (в). Точки — эксперимент. Тонкая сплошная линия (1) — друдевский вклад, толстая сплошная линия (2) — расчет из полной плотности состояний (в произвольных единицах). Линии 3, 4, 5 и 6 — вклады межзонных переходов с участием Ni 3d-, Gd 4f-, Gd 5d- и Mn 3d-электронов соответственно.

мостей $\sigma_{ib}(\omega)$ качественно воспроизводят основные особенности опытных спектров. Характер трансформации этих кривых с ростом примеси марганца в целом соответствует тенденции, наблюдаемой в эксперименте. В соответствии с расчетом $N(E)$ данных интерметаллидов, природа возникновения интенсивных высокоэнергетических полос поглощения при $E \sim 3-5$ эВ связана с происходящими в обеих спиновых подсистемах межзонными переходами из 3d-зоны Ni ($GdNi_2$) или из гибридизированных 3d-зон Ni и Mn ($GdNi_2Mn_x$), расположенных в интервале E_F-2 эВ, в 4f-зону Gd. Поскольку локализация Gd 4f-состояний выше E_F в плотности состояний всех трех сплавов остается неизменной, то модификация формы и расположения этих полос в спектрах $\sigma(\omega)$ обусловлена изменением структуры 3d-зон Ni и Mn ниже уровня Ферми. В свою очередь, возникновение низкоэнергетической полосы поглощения при 1–2,5 эВ связано с межзонными переходами в системе гибридизированных 3d-зон переходных металлов. На рисунке также приведены рассчитанные парциальные вклады в межзонную проводимость от квантовых пе-

реходов с участием электронов 4f-и 5d-зон Gd и 3d-зон Ni и Mn. В целом, для всех исследуемых сплавов заметно качественное сходство общей структуры экспериментальных спектров $\sigma(\omega)$ с зависимостями, рассчитанными из полных плотностей состояний. Вместе с тем, ввиду качественного характера вычислений межзонной оптической проводимости, проведенного без учета вероятностей квантовых переходов и времени жизни возбужденного состояния, в деталях тонкой структуры опытной и теоретической зависимостей нет полной идентичности. Например, величина расчетной $\sigma(\omega)$ в низкоэнергетическом интервале для тройных сплавов оказывается существенно завышенной, а ряд узких пиков, проявившихся в теоретических кривых для сплавов с $x = 0, 0,4$, не подтвердились в эксперименте.

В низкоэнергетической области спектра, где в процессе поглощения света доминирует внутризонный механизм возбуждения электронов, а влияние межзонных переходов несущественно, дисперсия оптической проводимости определяется параметрами носителей тока. В этом диапазоне длин волн ($\sim 10-15$ мкм) по классическим соотношениям Друде могут быть определены релаксационные γ и плазменные ω_p частоты электронов проводимости. Установлено, что частота релаксации γ , аддитивно учитывающая все типы рассеяния электронов при их возбуждении электромагнитной волной, возрастает с увеличением примеси Mn и принимает значения $3,3 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2$), $3,8 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2Mn_{0,4}$) и $5,5 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2Mn_{0,6}$). Плазменная частота ω_p , характеризующая коллективные осцилляции электронов проводимости, также проявляет сходную тенденцию с изменением концентрации: $4,6 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2$), $5,1 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2Mn_{0,4}$) и $6,2 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ($GdNi_2Mn_{0,6}$). Этот параметр, зависящий от эффектов межэлектронной корреляции и строения электронного спектра в прифермиевской области, пропорционален плотности состояний на E_F [17]. Учитывая данное обстоятельство, следует отметить, что наблюдаемое изменение величины ω_p с увеличением концентрации марганца коррелирует с результатами расчетов электронной структуры, где плотности состояний на уровне Ферми также показывают существенный рост (рис. 1). Приведенные значения плазменных и релаксационных частот использованы для расчета друдевского вклада в оптическую проводимость (см. рис. 3).

4. Выводы

В самосогласованных расчетах, проведенных методом LSDA+U для интерметаллических соединений $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$) с учетом сильных электронных корреляций в 4f-оболочке гадолиния, определено влияние Mn на электронную структуру и магнитные свойства. Расчеты показали, что магнитные моменты Ni и Mn в $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0,4, 0,6$) и соответствующие

обменные взаимодействия увеличиваются с ростом концентрации Mn, что и определяет рост температуры Кюри в данном интервале концентраций марганца. Полученные результаты оптических измерений, также выполненных в рамках данного исследования в широком интервале спектра, качественно подтверждают рассчитанную электронную структуру. Показано, что характер частотной зависимости экспериментальной межзонной оптической проводимости и основные элементы тонкой структуры удовлетворительно воспроизводятся в рамках проведенных расчетов. Идентифицирована природа электронных состояний, формирующих спектр поглощения. Определены концентрационные зависимости плазменных и релаксационных частот электронов проводимости.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Электрон», № 01201463326) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 16–52–48012 и 17–52–45056). А.В.Л. благодарит за поддержку Правительство Российской Федерации (постановление № 211 контракт № 02.А03.21.0006) и стипендиальную программу Президента РФ СП-226.2015.2.

1. G. Engdahl, *Handbook of Giant Magnetostrictive Materials*, Academic Press, New York (2000).
2. K.A. Gschneidner, V.K. Pecharsky, and A.O. Tsokol, *Rep. Prog. Phys.* **68**, 1479 (2005).
3. R. Nirmala, Ya. Mudryk, V.K. Pecharsky, and K.A. Gschneidner, Jr., *Phys. Rev. B* **76**, 014407 (2007).
4. F.W. Wang, X.X. Zhang, and F.X. Hu, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1360 (2000).
5. D. Wang, H. Liu, S. Tang, S. Yang, S. Huang, and Y. Du, *Phys. Lett. A* **297**, 247 (2002).
6. E.G. Gerasimov, N.V. Mushnikov, P.B. Terentev, V.S. Gaviko, and A.A. Inishev, *J. Alloys Compd.* **571**, 132 (2013).
7. A. Aryal, A. Quetz, S. Pandey, T. Samanta, I. Dubenko, D. Mazumdar, S. Stadler, and N. Ali, *J. Appl. Phys.* **119**, 043905 (2016).
8. M.A. Korotin, N.A. Skorikov, A.V. Efremov, and A.O. Shorikov, *J. Magn. Magn. Mater.* **397**, 115 (2016).
9. V.V. Marchenkov, N.V. Mushnikov, T.V. Kuznetsova, A. Buling, E.G. Gerasimov, V.S. Gaviko, V.I. Grebennikov, K.A. Fomina, H.W. Weber, and C. Derks, *J. Phys.: Conf. Ser.* **400**, 032050 (2012).
10. Т.В. Кузнецова, В.И. Гребенников, Н.В. Мушников, Е.Г. Герасимов, А. Бuling, С. Derks, М. Neumann, *Известия РАН, Сер. физ.* **77**, 251 (2013).
11. V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A.I. Lichtenstein, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 767 (1997).
12. Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin, and I.A. Nekrasov, *Phys. Rev. B* **73**, 094410 (2006).
13. K. Krop, *Phys. B* **319**, 9 (2002).
14. K. Yano, Y. Tanaka, I. Matsumoto, I. Umehara, K. Sato, H. Adachi, and H. Kawata, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 6891 (2006).
15. A.V. Lukoyanov, Yu.V. Knyazev, Yu.I. Kuz'min, and A.G. Kuchin, *J. Magn. Magn. Mater.* **368**, 87 (2014).
16. M.A. Korotin and N.A. Skorikov, *J. Magn. Magn. Mater.* **383**, 23 (2015).
17. А.В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, ГИФМЛ, Москва (1961).

Electronic structure and optical properties of the $GdNi_2Mn_x$ compounds

Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, and V.S. Gaviko

The electronic structure and optical properties of the $GdNi_2Mn_x$ compounds ($x = 0, 0.4, 0.6$) have been investigated. The spin-polarized electronic structure calculations were performed in the approximation of local electron spin density with a correction for strong electronic correlations in the LSDA+ U method. The changes in the magnetic moments and exchange interactions in $GdNi_2Mn_x$ ($x = 0, 0.4, 0.6$), which determine the increase in the Curie temperature with variation in the manganese concentration, were determined. The optical constants of the compounds were measured by the ellipsometric method in the wide spectral range 0.22–15 μm . The features of the modification of the frequency dependencies of optical conductivity with a change in the manganese concentration are revealed. Based on the calculated densities of the electronic states, the behavior of these dispersion curves in the region of interband absorption of light is discussed. The concentration dependencies of a number of the electronic characteristics are determined.

PACS: 81.05.Bx Metals, semimetals, and alloys;
78.20.Ci Optical constants (including refractive index, complex dielectric constant, absorption, reflection and transmission coefficients, emissivity);
71.20.Lp Intermetallic compounds.

Keywords: electronic structure, spin density, interband absorption of light.