

# Ce<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub> 的电子结构和磁性质\*

唐成春 吴光恒 李养贤 詹文山

(中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室 北京 100080)

(2000 年 4 月 27 日收到 2000 年 7 月 13 日收到修改稿)

用第一性原理计算了 Ce<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub> 电子结构和自旋磁矩值,解释了 Y 的替代对 CeFe<sub>2</sub> 中磁性和磁致伸缩的影响.通过对 Stoner 作用参量的计算,表明 CeFe<sub>2</sub> 弱的铁磁性的提供者主要是 Fe,且 Ce 的局域铁磁性是不稳定的.计算结果表明体积的变化对 Fe 的局域位的磁性影响较大,但并不很显著的影响 Ce 位的态密度和磁性质.Y 原子对 CeFe<sub>2</sub> 中 Ce 的替代对电子结构产生了两个方面的影响:费米面的下降和尖锐的 4f 能级的降低.费米面的下降使 Ce 的 4f 电子更加退局域,而尖锐的 4f 能级的降低则使得 Ce 的 4f 电子的局域化程度增强.这两个相互竞争的过程使得 Ce 的价态呈现出波动性的特性.

关键词: Ce<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub>, 电子结构, 自旋磁矩, 磁致伸缩

PACC: 7525, 7530

## 1 引 言

具有 MgCu<sub>2</sub> 结构的稀土铁基金属间化合物是目前最为重要的大磁致伸缩材料.在理论方面,单离子体理论是使用的最为广泛的说明稀土过渡族金属间化合物磁致伸缩性能模型,它是建立在对具有局域性质的单个稀土离子的各向异性性能和磁弹性能相互竞争的框架之上的<sup>[1]</sup>.虽然这种模型能够很好地解释大多数稀土化合物的磁致伸缩性能,但它关于 Ce 基金属间化合物将具有高达 6% 的磁致伸缩系数的预计始终没有得到实验的证实<sup>[2]</sup>,即使在液氮温度以下, CeFe<sub>2</sub> 的磁致伸缩系数也仅为  $60 \times 10^{-6}$ <sup>[3]</sup>.出现这种极大差异的原因通常归结为在稀土过渡族金属间化合物中 Ce 的 4f 电子通常表现出的极大的巡游特征.因此为了获得这种材料的磁致伸缩性质,必须首先了解它的 4f 电子的电子结构特征,以及如何控制它的磁性能.

最近我们的实验证明<sup>[4-6]</sup>,当其他的稀土离子对 CeFe<sub>2</sub> 中的 Ce 进行替代时,从体系的晶格参数、磁矩、居里温度以及磁致伸缩性质的变化上明显地观察到了 Ce 的价态的波动:当用 Pr 替代时, Ce 的价态向退局域化方向移动,用 Tb, Dy, Ho, Er 等重稀土元素替代时,价态是向局域化方向移动的,而替

代元素是 Nd 时,几乎对它的价态没有任何影响.而且这种价态变化与由于合金化过程引入的内部应力无关.我们猜测这种价态的波动与 Ce 的尖锐的 4f 能级的位置有关.

本文利用第一性原理计算了 Ce<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub> 的电子结构,并研究了 CeFe<sub>2</sub> 的电子结构和磁性质随体积的变化规律,以期对现有的实验结果给出理论上的说明.

## 2 计算模型

本文对 Ce<sub>1-x</sub>Y<sub>x</sub>Fe<sub>2</sub> 体系的理论计算采用了局域密度泛函理论框架内的自洽离散变分方法.这种方法对单电子薛定谔方程中的有效哈密顿量的矩阵元计算使用离散求和方法,因而避免了多中心积分的困难,对 Hartree-Fock 交换关联则利用了 X $\alpha$  势近似,位于不同原子位的原子轨道的组合被作为对称轨道的基矢.根据以往类似工作的报道,这种处理方式对本文的材料系统是合理的,其具体细节可以参阅文献 7—9].

计算选取的簇为 MgCu<sub>2</sub> 晶胞中心 26 个原子集团,考虑到簇外原子的影响和稀土 4f 电子的收敛问题,镶嵌簇方法<sup>[10]</sup>和热能级占据数方法<sup>[11]</sup>也被采用了.原子的坐标见表 1.这种簇选取方法能够很好

\* 国家自然科学基金(批准号:59871062)资助的课题.

地模拟替代元素与 Ce 位相互作用而不额外的增加计算量,由此也能对  $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  中  $x = 0, 0.4, 0.6, 1$  四个化合物的电子结构进行计算. 由于稀土过渡族金属间化合物中所有的原子轨道较多,考虑到内层电子对化学键合和磁性的影响不大,计算中我们也采用了“冻结内轨”近似,即对内层轨道直接使用原子轨道. 考虑到 s-p 杂化作用,在最外层轨道外引入了空的 p 轨道,即对 Ce 基组选取为  $5s, 5p, 4f, 5d, 6s, 6p$ ; 对 Y 为  $4d, 5s, 5p$ ; 对 Fe 为  $3d, 4s, 4p$ . 选取的外部原子为 368 个,截断势为 7.5 eV,热能级影响因子为 0.14 eV.

表 1 计算基组的选取及簇的坐标

原子分类	原子数目	坐标	距簇中心距离(晶格参数)
Fc(I)	12	(3/8, 3/8, 1/8)	0.544
Fc(II)	4	(1/8, 1/8, 1/8)	0.216
稀土位(I)	4	(-1/4, -1/4, -1/4)	0.433
稀土位(II)	6	(1/2, 0, 0)	0.500

### 3 结果和讨论

#### 3.1 $\text{CeFe}_2$ 和 $\text{YFe}_2$ 的态密度和磁矩的比较

表 2  $\text{Fe}_{12}\text{Fe}_4\text{Ce}_x\text{Y}_{10-x}$  ( $x = 0, 4, 6, 10$ ) 簇的费米能级(eV), Mulliken 电荷集居数、稀土位的和中心铁位的局域磁矩值( $\mu_B$ )以及计算的  $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  的局域磁矩值( $\mu_B$ )

	$\text{Fe}_{12}\text{Fe}_4\text{Ce}_4\text{Ce}_6$	$\text{Fe}_{12}\text{Fe}_4\text{Y}_4\text{Ce}_6$	$\text{Fe}_{12}\text{Fe}_4\text{Ce}_4\text{Y}_6$	$\text{Fe}_{12}\text{Fe}_4\text{Y}_4\text{Y}_6$
费米能级	-0.69	-1.10	-1.66	-1.85
$\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$ 磁矩值	2.12	2.53	2.72	2.88
中心铁位				
3d	6.484/1.608	6.487/1.812	6.497/1.856	6.758/1.824
4s	1.624/0.003	1.681/0.003	1.687/0.000	1.201/0.006
电荷/磁矩				
4p	0.467/-0.139	0.258/-0.150	0.290/-0.132	0.267/-0.081
净电荷/自旋	0.33/1.472	-0.425/1.665	-0.474/1.724	-0.226/1.749
稀土位 I				
Ce5s	2.000/0.000		2.000/0.000	
Ce5p	5.989/-0.005		5.993/-0.004	
Ce6s	0.369/-0.053		0.311/-0.040	
Ce4f 或 Y3d	0.691/-0.386	1.868/-0.439	0.720/-0.495	1.768/-0.499
Ce5d 或 Y4s	2.149/-0.342	0.672/-0.066	1.973/-0.340	0.514/-0.034
Ce6p 或 Y4p	0.143/-0.024	0.447/-0.109	0.076/-0.016	0.392/-0.098
净电荷/自旋	0.659/-0.810	0.012/-0.613	0.926/-0.894	0.327/-0.632
稀土位 II				
Ce5s	2.000/-0.000	2.000/0.000		
Ce5p	5.984/-0.002	5.995/-0.006		
Ce6s	0.342/-0.059	0.320/-0.051		
Ce4f 或 Y3d	0.745/-0.409	0.761/-0.506	1.748/-0.428	1.658/-0.456
Ce5d 或 Y4s	1.940/-0.349	1.825/-0.414	0.671/-0.062	0.682/-0.087
Ce6p 或 Y4p	0.137/-0.013	0.066/-0.010	0.385/-0.069	0.346/-0.044
净电荷/自旋	0.852/-0.834	1.034/-0.987	0.196/-0.559	0.316/-0.588

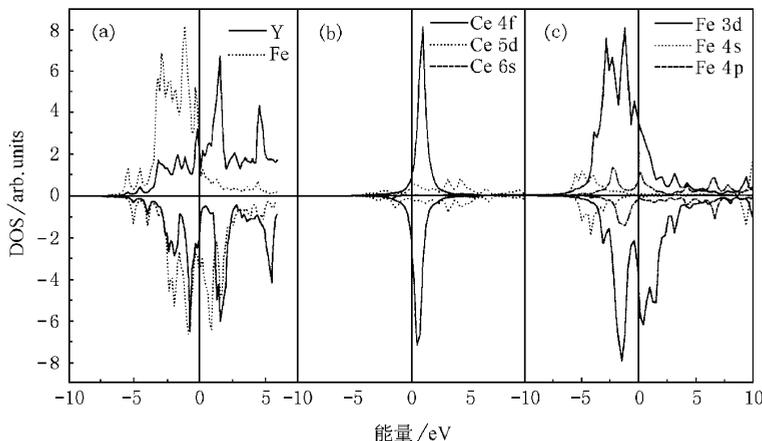
图 1  $\text{YFe}_2$  (a) 和  $\text{CeFe}_2$  (b, c) 的态密度图

表 2 中给出了 CeFe<sub>2</sub> 和 YFe<sub>2</sub> 的 Mulliken 电荷集居数和自旋磁矩值,图 1 给出了它们的各分态密度图(PDOS).计算得到的 YFe<sub>2</sub> 的局域磁矩值为 Fe 1.75  $\mu_B$ , Y -0.63  $\mu_B$ ,与实验值<sup>[12]</sup>1.77  $\mu_B$  和 -0.67  $\mu_B$  极好的符合.由于表面效应的影响,在靠近表面处,原子的波函数存在着较大的衰减,使得簇的电子 Mulliken 集居数在簇中心处堆积,因此中心位的原子的电子数通常偏大;而表面效应的存在又使得外层原子的磁矩值增大.虽然如此,从计算结果中看到,除外层 Fe 原子的磁矩差异稍大外,表面效应对稀土位的影响并不太大,说明我们采用的镶嵌簇的取法对此体系是合适的.

计算得到的 Y 的局域磁矩为小的负值,它主要是由于 Fe 的 3d 轨道和 Y 的 4d 轨道杂化所致:Y 的 4d 能带向上自旋的主要部分位于费米面之上,而 Fe 位于费米面之上的是其自旋向下的 3d 自旋.自旋向下的 3d 自旋与 Y 的 4d 态的杂化作用,使得 Y 的部分自旋向上的 4d 电子转移到其自旋向下的 4d 带,从而导致了 Y 具有负的小磁矩.这种情形也出现在其他的 Y-Fe 金属间化合物中<sup>[13]</sup>.

CeFe<sub>2</sub> 计算的磁矩值和早期能带计算值<sup>[14]</sup>和中子散射的实验值是相符的<sup>[15]</sup>,Ce 的负局域磁矩值来源与 YFe<sub>2</sub> 完全不同:从 PDOS 图上可以看到,尖锐的 Ce 的 4f 能带的上、下旋的主要部分均位于费米面之上,到少存在着两种杂化作用:一是 4f 的下旋带在费米面上和 3d 的下旋带之间的杂化;二是 4f 的上旋带在费米面处和自身的 5d 的上旋带之间的杂化.而 s 态与 4f 电子的极化则不明显,说明 RKKY 作用在 CeFe<sub>2</sub> 中并不是最重要的因素.这两种杂化作用并没有引起向相反自旋方向的电子转移,这和 YFe<sub>2</sub> 不同.可见 Ce 的负局域磁矩值出现的原因与 YFe<sub>2</sub> 中 Y 的磁矩的起源是不同的,它是 Ce 并不处在完全退局域态的结果.

### 3.2 CeFe<sub>2</sub> 和 YFe<sub>2</sub> 的电子结构和磁性随体积的变化

图 2 中给出了 YFe<sub>2</sub> 簇中心 Fe 原子位和 Y 位的局域磁矩值随体积收缩时的变化关系.随着体积的收缩,Fe 位的局域磁矩是直线下降的,下降的速率为体积每收缩 1% 磁矩下降 0.03  $\mu_B$ .当体积收缩到 15% 时其磁矩急剧下降,磁有序接近坍塌.由于具有巡游特性的 Fe 的磁性产生于能带的劈裂,费米能级附近的上旋态几乎均被电子占据,而下旋态存在着

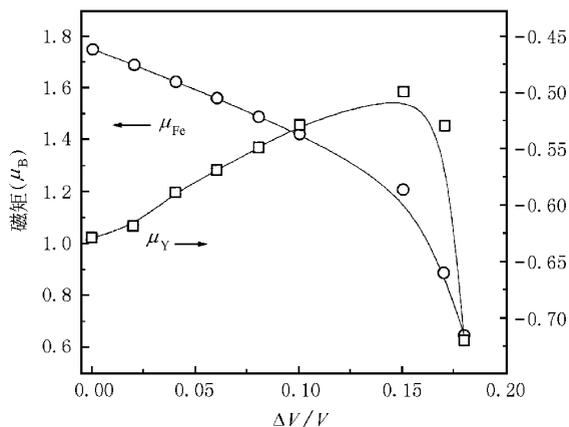


图 2 YFe<sub>2</sub> 簇中心 Fe 原子位和 Y 位的局域磁矩值随体积收缩时的变化

空位.当体积收缩时,增加的占据下旋态的电子数目要大于占据上旋态的电子数目,因而磁矩呈减小趋势.随着体积收缩(小于 6%),费米面处的上旋态的电子数目几乎不变,而下旋态的电子数目则呈上升趋势.Y 位的磁矩在体积收缩小于 15% 时稍有增大,从未收缩时的 -0.63  $\mu_B$  增大到收缩 15% 时的 -0.47  $\mu_B$ ,当体积收缩大于 15% 时,磁矩值急剧下降.Y 位磁矩随体积变化的原因显然不同于 Fe 位的情形,这是因为 Y 位的磁矩是由 3d-4f 杂化引起的上下旋电子的转移的数目决定的,随着体积的收缩,Fe 位的下旋态电子进入了费米面内,因而参与 3d-4f 杂化的电子数减少,杂化作用减弱,Y 位费米面处的上下旋电子数目的差值减小.

磁矩随体积变化的这种关系表明这是一个典型的巡游体系,在 Stoner 模型的框架内,磁矩随体积的变化关系遵循下式<sup>[16]</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta V(m) &= \frac{V}{m} \frac{\partial m}{\partial V} \\ &= \frac{5}{3} \frac{2I}{\left[ \frac{1}{N(\epsilon_F, \uparrow)} + \frac{1}{N(\epsilon_F, \downarrow)} - 2I \right]} \end{aligned} \quad (1)$$

这里  $I$  为有效交换积分常数,  $m$  为总的磁矩.  $N(\epsilon_F, \uparrow)$  为费米  $\epsilon_F$  面处的上旋态密度值(单位为 state/eV).当只考察 Fe 的磁矩随体积  $V$  的变化时可以通过(1)式求得  $I$  值.拟合结果为  $I = 1.139$  eV,稍大于金属铁时的 0.925 eV<sup>[17]</sup>.与有效积分  $I$  直接联系在一起的是所谓铁磁有序出现的 Stoner 标准<sup>[16]</sup>:

$$\bar{I} = IN(\epsilon_F) > N(\epsilon_F) = (N(\epsilon_F, \uparrow) + N(\epsilon_F, \downarrow)) \quad (2)$$

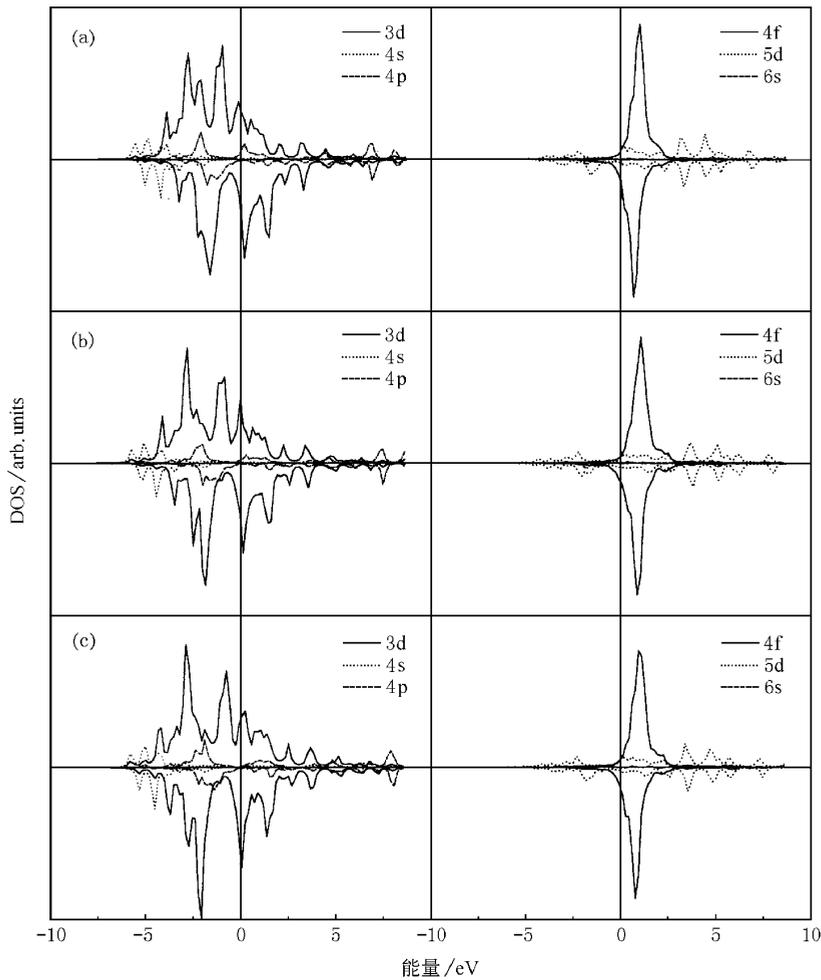


图3  $\text{CeFe}_2$  在体积收缩(a)6%(b)12%(c)18%时的态密度的变化

$\bar{I}$  是 Stoner 作用参量,它是衡量材料铁磁性出现的标准参量.只有在大于 1 时,铁磁性方能出现.对  $\text{YFe}_2$  的计算结果为 1.351.

在不同体积下计算的  $\text{CeFe}_2$  的各原子分态密度图示于图 3.随着体积的收缩,Fe 位和 Ce 位的态密度表现出不同的变化剧烈:随着体积的收缩,Fe 的上旋态存在着向费米面上移动的趋势,体积未收缩时,上旋态的主要部分均位于费米面之下,而在体积收缩到 12% 时,上旋态的反键态已经完全移动到费米面之上.而它的下旋态的移动的幅度并不像上旋态一样变化剧烈,在体积收缩到 18% 时,仅移动了不到 0.05 eV.这是由于在体积未收缩时,费米面位于下旋态的成键态与反键态之间,因而下旋态的移动需要较多的额外的电子转移.从计算的由 Mulliken 集居数表征的电子转移随体积的变化关系看到,Fe 位的净电荷转移并不大,大约每收缩 1%,仅有 0.005 个电子发生转移.因而 Fe 的上、下旋态费

米能级处态密度的这一变化趋势只能是由以下两个方面的原因造成的:其一是 3d 的下旋电子向上旋电子态的移动,其二是 4s 或 4p 电子向 d 电子的转移.从 Fe 的态密度图上可以看到,在体积收缩较小时,或在体积膨胀时,4s 和 4p 在费米面处存在峰值,而在体积收缩较大时,这一峰值明显被抑制. Mulliken 集居数计算结果表明,在体积收缩小于 12% 或是体积膨胀时,3d 态的 Mulliken 集居数几乎没有变化,而在体积收缩到 18% 时,它的集居数才发生较大的变化,但也只有 0.06 个电子的增加.因此,在体积收缩过程中,3d 态本身的不同自旋态的电子转移是造成上下旋态 DOS 变化的主要原因.

从 Ce 位的 DOS 图随体积的变化关系看到,尖锐的 Ce 的 4f 能带并没有随体积的变化产生大的改变,其上下旋态峰值的位置也几乎没有变化.不论是体积收缩还是体积膨胀这一趋势保持不变.这一结果表明,Ce 位的磁性质随着体积(更准确地说是 Ce-

Ce 或 Ce-Fe 的间距)的变化并不剧烈, Ce 的磁性基本上还是局域的. 原本在费米面处的 5d 的峰值随着体积的收缩也类似于 Fe 的 4s(4p)分布的特性, 即随体积的收缩, 它在费米面处的峰的幅度下降, 到体积收缩到 12% 时, 在费米面处已经不能观察到这一峰了. 可见 Ce 本身的 4f-5d 杂化作用与体积之间存在着某种依存关系. 由 Mulliken 集居数的计算看到, 随着体积的收缩, 5d 的电荷数是上升的, 而 4f 的电荷数下降, 与 Fe 的 3d 电荷数的变化相比, 这一电荷变化较大. 考虑到净的电荷数的增加幅度并不很大, 因此在 Ce 的 5d 和 4f 态之间随体积的变化存在着电荷转移. 这种随体积变化的电荷转移仅在同方向自旋的能级之间电子的转移, 对总的自旋值没有影响.

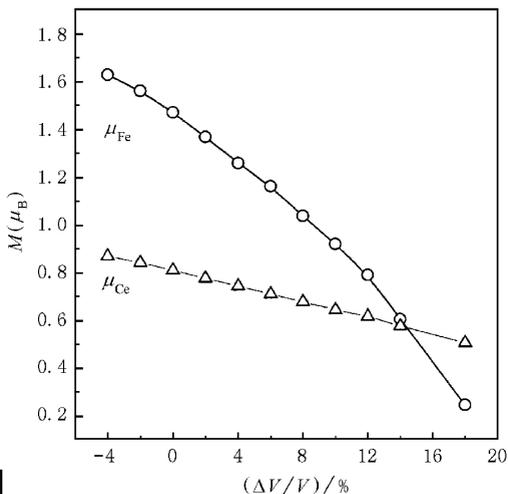


图 4  $\text{CeFe}_2$  的中心铁位和稀土位的局域磁矩随体积的变化

DOS 图的体积的变化也直接对应着各在位原子的局域磁矩值的变化. 图 4 给出了 Ce 和中心 Fe 的局域磁矩值随体积的变化曲线. 可以发现, 随着体

积的收缩, Fe 的磁矩值急剧下降, 在小的体积收缩值时, 这一下降趋势几乎为线性, 大约体积每收缩 1% 它的磁矩值下降  $0.05 \mu_B$ , 稍大于  $\text{YFe}_2$  时 Fe 位下降的  $0.03 \mu_B$ , 而在体积收缩到大于 12% 时, 铁的磁有序接近崩溃. Ce 的磁矩的绝对值下降则极小, 而且甚至到体积收缩 18% 时, 依然表现为线性关系.

用磁矩的这种体积变化关系利用 (1) 式和 (2) 式拟合了的 Ce 位、Fe 位以及  $\text{CeFe}_2$  位的 Stoner 作用参量. 簇的两个不等价 Ce 位的 Stoner 参量分别为 0.884 和 0.967, 均在 1.0 附近而稍小于 1, 而中心 Fe 位的 Stoner 参量为 1.211, 则大于 1. 考虑到 Stoner 标准和 (1) 式的近似性, Ce 位和 Fe 位的磁有序还是铁磁性的, 但是从计算结果看, 两个位的磁有序的程度是不相同的, Fe 位磁有序程度远大于 Ce 位的磁有序程度. 整个化合物的磁性主要由 Fe 位提供. 也应该注意到 Fe 位的 Stoner 参量值 (1.21) 比  $\text{YFe}_2$  中 Fe 的 1.35 还要小, 由于  $\text{YFe}_2$  是一个典型的弱铁磁体, 故  $\text{CeFe}_2$  (主要磁性提供者是 Fe) 的铁磁性更弱.

### 3.3 Y 原子的替代对电结构和磁性质的影响

计算的  $\text{Ce}_{0.6}\text{Y}_{0.4}\text{Fe}_2$  和  $\text{Ce}_{0.4}\text{Y}_{0.6}\text{Fe}_2$  的各分态密度图和 Mulliken 集居数、自旋磁矩值分别表示在图 5 和表 2 中. 没有掺入 Y 原子时,  $\text{CeFe}_2$  的费米能级为  $-0.69 \text{ eV}$ , 随着 Y 的浓度的增加, 费米能级的绝对值急剧增大. 从 DOS 图上也可以看到, 在 Y 掺入的过程中, Ce 位 DOS 峰形没有发生大的变化, 依然保持着尖锐的峰形, 发生变化的是其上下旋态的峰值的位置与费米能级的差距值. 没有掺入 Y 时, 下旋态的峰值的位置在费米面上  $0.04 \text{ eV}$  左右, 而在这两种簇模型下, 峰值的位置稍微向费米面接近,

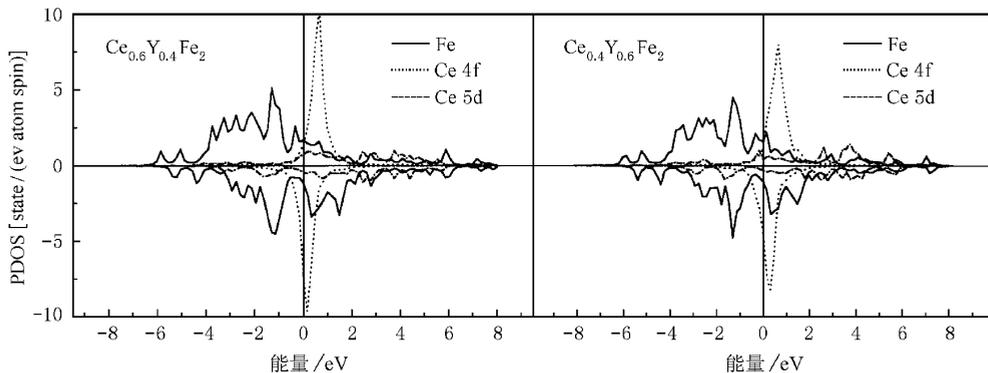


图 5  $\text{Ce}_{0.6}\text{Y}_{0.4}\text{Fe}_2$  和  $\text{Ce}_{0.4}\text{Y}_{0.6}\text{Fe}_2$  的态密度图

约在 0.02 eV 处. 因此虽然费米面是向下移动的, Ce 的能级还是向费米面下移动了. 表明其局域化程度随着 Y 的掺入而有所改变.

$\text{Ce}_{0.6}\text{Y}_{0.4}\text{Fe}_2$  和  $\text{Ce}_{0.4}\text{Y}_{0.6}\text{Fe}_2$  的 Y 位的磁矩值与  $\text{YFe}_2$  时的 Y 位磁矩值相差不大, 而 Mulliken 集居数却有较大的变化. 其实不仅是 Y 位的电荷数, Ce 位的电荷数也较  $\text{CeFe}_2$  时不同. 在  $\text{CeFe}_2$  时中心 Ce 位的净电荷数为 0.7 左右, 而在 Y 掺入时, 净电荷数为 1.0 左右. 这主要是由于费米面大的移动造成的.

Y 掺入导致了两个方面的影响: 费米面下降和 Ce 能级从费米面上向费米面下移动. 这两个方面对 Ce 的局域化程度的影响是相反的, 费米面的下降使 Ce 电子具有更大的动能因而键合使用加强; Ce 能级从费米面上向费米面下的移动又使它的动能减小. 这两种因素的相互竞争过程导致了 Y 原子掺入后形成的化合物的磁性及电子性质的复杂性. 其余稀土原子的替代可能造成这两个因素的不同变化趋势, 这反映在我们的实验中观察到的 Ce 的局域态程度随不同稀土元素的替代而造成的不同的变化

趋势.

## 4 结 论

通过对  $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  电子结构的第一性原理的计算, 得到了如下结论:  $\text{CeFe}_2$  中 Ce 的 4f 能级极其尖锐, 且位于费米能级之上, Ce 的负磁矩的来源与  $\text{YFe}_2$  中 Y 的负磁矩的来源是不同的:  $\text{YFe}_2$  中 Y 的负磁矩主要是源于 Fe 的 3d 轨道和 Y 的 4d 轨道杂化, 而  $\text{CeFe}_2$  中 Ce 的负磁矩则源于 Ce 的 4f 电子非完全退局域特性. 对  $\text{YFe}_2$  和  $\text{CeFe}_2$  的电子结构和磁矩值的体积依赖关系的计算得到了 Stoner 作用参量, 表明  $\text{CeFe}_2$  弱的铁磁性的提供者主要是 Fe, 且 Ce 的局域铁磁性是不稳定的. Y 原子对  $\text{CeFe}_2$  中 Ce 的替代对电子结构产生了两个方面的影响: 费米面的下降和尖锐的 4f 能级的降低. 费米面的下降使 Ce 的 4f 电子更加退局域, 而尖锐的 4f 能级的降低则使得 Ce 的 4f 电子的局域化程度增强. 这两个相互竞争的过程使得 Ce 的价态呈现出波动性的特征.

- [1] E. Callen, H. B. Callen, *Phys. Rev.* **129**(1963) 578.  
 [2] A. E. Clark, *Ferromagnetic Materials*, Vol. 2, ed. E. P. Wohlfarth (North-Holland, Amsterdam, 1980).  
 [3] A. V. Andreev, *Handbook of Magnetic Materials*, ed. K. H. J. Buschow, Vol. 8, 68, 1995.  
 [4] C. C. Tang, J. Du, Y. X. Li, F. W. Wang, G. H. Wu, W. S. Zhan, J. P. Qu, *Appl. Phys. Lett.* **73**(1998) 692.  
 [5] C. C. Tang, W. S. Zhan, Y. X. Li, D. F. Chen, J. Du, G. H. Wu, Z. W. Gan, S. R. Qi, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**(1998), 2426.  
 [6] C. C. Tang, W. S. Zhan, D. F. Chen, Y. X. Li, J. Du, G. H. Wu, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**(1998) 2797.  
 [7] D. E. Ellis, G. S. Painter, *Phys. Rev.* **B2**(1970) 2887.  
 [8] E. J. Baerends, D. E. Ellis, P. Ros, *Chem. Phys.* **2**(1973) 41.  
 [9] P. K. Khowash, D. E. Ellis, *Phys. Rev.* **B36**(1987) 3394.

- [10] D. E. Ellis, G. A. Benesh, E. Byrom, *Phys. Rev.* **B16**(1977), 3308.  
 [11] F. W. Kutzler, D. E. Ellis, D. J. Lam, B. W. Veal, *J. Chem. Phys.* **76**(1982) 1949.  
 [12] C. Ritter, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**(1989) 2765.  
 [13] A. Szytula, J. Leciejewicz, *Handbook of crystal structure and Magnetic properties of Rare earth Intermetallics* (CRC Press, 1994).  
 [14] O. Eriksson, L. Nordstrom, M. S. S. Brooks, B. Johansson, *Phys. Rev. Lett.* **60**(1988) 2523.  
 [15] S. J. Kennedy, P. J. Brown, B. R. Coles, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**(1993) 5169.  
 [16] J. Mathon, *J. Phys.* **F2**(1972) 159.  
 [17] K. B. Hathaway, H. J. F. Jansen, A. J. Freeman, *Phys. Rev.* **B31**(1985) 7603.

# ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$ COMPOUNDS\*

TANG CHENG-CHUN WU GUANG-HENG LI YANG-XIAN ZHAN WEN-SHAN

(*State Key Laboratory of Magnetism, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*)

(Received 27 April 2000; revised manuscript received 13 July 2000)

## ABSTRACT

Electronic structure and spin moment of  $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  are calculated using a fully self-consistent discrete variational method within the local density framework. These results are used to explain the effect of magnetic properties and magnetostriction on Ce-site substituted by Y in  $\text{CeFe}_2$ . Stoner action obtained indicates that the local Fe magnetic moment provides mainly the weak ferromagnetism from  $\text{CeFe}_2$ , and Ce-site local moment is unstable. The local magnetic moment of Fe-site depends strongly on the volume change of the investigated system, which does not noticeably affect the density of state and magnetic properties. The Ce-site substituted by Y results in two effects on electronic structure, that is, the descent of Fermi surface and the descent of the main peak of Ce 4f energy level. The competition of the two descents results in the fluctuation of Ce valence.

**Keywords** :  $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$ , electronic structure, spin moment, magnetostriction

**PACC** : 7525, 7530

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 59871062).