

Особенности электронной структуры трехкомпонентных сверхпроводников RRh_4B_4 ($R = Y, Lu$)

Г.Е. Гречнев, А.В. Логоша, А.С. Панфилов, И.П. Журавлева, А.А. Лёгенькая

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: grechnev@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 25 июня 2015 г., опубликована онлайн 23 ноября 2015 г.

Проведены расчеты из первых принципов электронной структуры и ряда термодинамических характеристик трехкомпонентных систем сверхпроводников RRh_4B_4 ($R = Y, Lu$) в нормальной фазе. Выполнен анализ электронных состояний и взаимодействий, ответственных за сверхпроводящие и магнитные свойства исследуемых систем. Установлено, что у соединений YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ уровень Ферми находится в непосредственной близости от пика в плотности электронных состояний, и примерно на 1 эВ выше псевдощели в электронном спектре. Выявлено наличие ряда групп квазивырожденных электронных состояний с малой эффективной массой вблизи уровня Ферми. Эти состояния могут быть источником значительного диамагнитного вклада электронов проводимости в магнитную восприимчивость и обуславливать сильную зависимость восприимчивости от температуры в боридах родия.

Проведено розрахунки з перших принципів електронної структури та ряду термодинамічних характеристик трьохкомпонентних систем надпровідників RRh_4B_4 ($R = Y, Lu$) у нормальному стані. Виконано аналіз електронних станів та взаємодій, що відповідають за надпровідні та магнітні властивості досліджуваних систем. Встановлено, що у сполуках YRh_4B_4 та $LuRh_4B_4$ рівень Фермі знаходиться в безпосередній близькості від піку в густині електронних станів, та приблизно на 1 еВ вище псевдощільності в електронному спектрі. Виявлено наявність ряду груп квазівироджених електронних станів з малою ефективною масою поблизу рівня Фермі. Ці стани можуть бути джерелом значного діамагнітного внеску в магнітну сприйнятливості та обумовлювати сильну залежність сприйнятливості від температури в боридах родію.

PACS: 74.20.Pq Расчеты электронной структуры;
74.70.Dd Тройные, четверные и многокомпонентные соединения (включая фазы Шевреля, боркарбиды и т.д.);
75.10.Lp Зонные и делокализованные модели.

Ключевые слова: RRh_4B_4 , электронная структура, сверхпроводимость, магнитная восприимчивость.

Открытие сверхпроводимости с критической температурой $T_c = 2,5\text{--}11,9$ К в ряде соединений семейства RRh_4B_4 ($R = Y, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu$ и Th) [1,2] стимулировало значительный научный интерес к этим трехкомпонентным боросодержащим материалам [3,4]. Среди этих систем с кристаллической структурой типа $CeCo_4B_4$ [2] сверхпроводниками являются соединения с $R = Y, Nd, Sm, Er, Tm, Lu$ и Th , тогда как в соединениях с $R = Gd, Tb, Dy$ и Ho имеет место ферромагнитное упорядочение. Весьма интересным представляется обнаружение в $ErRh_4B_4$ ($T_c = 8,7$ К) магнитного упорядочения при $T \approx 0,9$ К, сопровождающегося возвратом соединения в нормаль-

ное состояние [5]. Аналогичные переходы при понижении температуры из парамагнитного в сверхпроводящее состояние с последующим магнитным упорядочением и подавлением сверхпроводимости наблюдали также в квазитройных сплавах $Lu_{1-x}Ho_xRh_4B_4$ [6], $Er_{1-x}Gd_xRh_4B_4$, $Y_{1-x}Gd_xRh_4B_4$ [7] и $Er_{1-x}Ho_xRh_4B_4$ [8] с существенной зависимостью фазовых границ от состава. Присущее рассматриваемой системе широкое разнообразие магнитных и сверхпроводящих характеристик благоприятствует изучению природы ее магнетизма и сверхпроводимости, а также их возможного сосуществования.

Как следует из немногочисленных результатов ранних расчетов электронной структуры соединений RRh_4B_4 ($R = Y, Er$ и Ho) [9,10], их характерной чертой является сравнительно высокая плотность электронных состояний $N(E)$ вблизи уровня Ферми E_F . К сожалению, расчеты [9,10] были выполнены для малого количества k -точек (около 20) в неприводимой части зоны Бриллюэна, что дало лишь качественную картину электронных спектров. В то же время детальные расчеты особенностей электронной структуры, необходимые для анализа спектральных характеристик этих систем и их связи с физическими свойствами, до настоящего времени отсутствуют и представляются весьма актуальными.

Среди соединений RRh_4B_4 наиболее высокие значения температуры перехода в сверхпроводящее состояние обнаруживают немагнитные системы: YRh_4B_4 ($T_c \approx 11$ К), не имеющее $4f$ -электронов, и $LuRh_4B_4$ ($T_c \approx 11,5$ К) с полностью заполненной $4f$ -оболочкой. Целью настоящей работы являлось проведение детальных *ab initio* расчетов электронной структуры этих соединений, выявление тонких особенностей электронных спектров и анализ их связи со сверхпроводящими и магнитными свойствами рассматриваемых систем.

Расчет и анализ электронной структуры YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$

Кристаллическая структура слоистых соединений RRh_4B_4 относится к тетрагональному типу $CeCo_4B_4$ [2,11]. Атомы R и центры тетраэдров родия образуют слегка искаженную решетку типа NaCl (см. рис. 1). Штриховыми линиями показан контур соответствующей примитивной тетрагональной элементарной ячейки. Для наглядности в увеличенном масштабе изображены кубы, представляющие ячейки Rh_4B_4 .

Расчеты электронной структуры проводили с использованием релятивистского метода LMTO с полным потенциалом (FP-LMTO [12–14]). Обменно-корреляционный потенциал учитывали в рамках приближения локальной плотности (LDA) [15] теории функционала плотности (DFT). Для расчетов электронных структур использовали разложения по сферическим гармоникам базисных волновых функций внутри МТ-сфер, с сохранением значений главного l и орбитального l квантовых чисел, соответствующих внешним электронным оболочкам атомов. В процессе проведения самосогласованных расчетов кристаллического потенциала состояния ионного остова вычисляли на каждой итерации, т.е. приближение «замороженного остова» не использовали. В рамках данного метода FP-LMTO с полным потенциалом никакие ограничения не накладывались на плотность заряда или потенциал исследуемых систем, что особенно важно для анизотропных открытых структур исследуемых сверхпроводников. В процессе

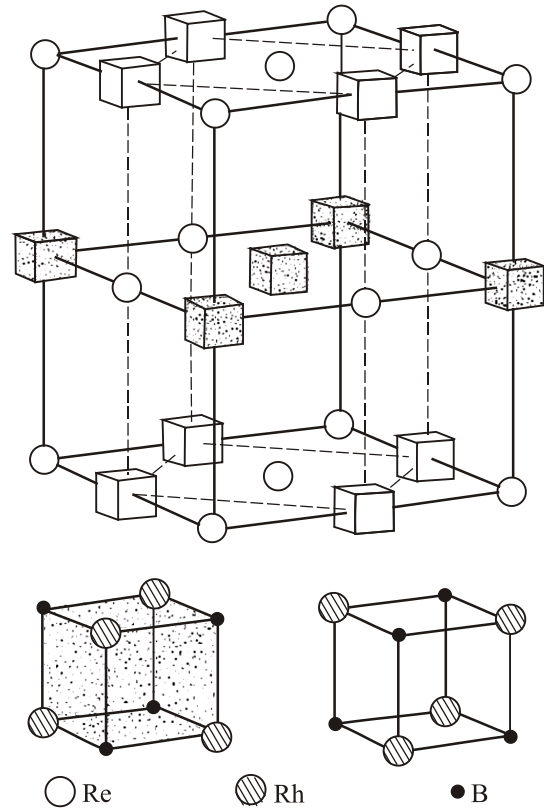


Рис. 1. Кристаллическая структура трехкомпонентных боридов родия RRh_4B_4 .

самосогласованного расчета кристаллического потенциала спин-орбитальное взаимодействие учитывали на каждой итерации. Все расчеты проводили с использованием 868 k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна. Расчеты электронной структуры YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ были проведены для экспериментальных значений параметров тетрагональной решетки [2].

На рис. 2 представлены плотности электронных состояний (DOS) $N(E)$ для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$, рассчитанные в широком интервале энергий E . На рисунке видно, что для этих изовалентных систем электронные структуры имеют близкий вид и отличаются тонкими деталями спектров. В частности, обращает на себя внимание наличие в $N(E)$ в обеих системах псевдощели в районе 1 эВ ниже энергии Ферми E_F . Следует отметить, что в работах [9,10] псевдощель в рассчитанных спектрах $ErRh_4B_4$ и $HoRh_4B_4$ не была выявлена, хотя и отмечалось некоторое понижение $N(E)$ при энергиях около 1 эВ ниже уровня Ферми. Рассчитанная в настоящей работе плотность состояний для YRh_4B_4 также находится в качественном согласии с результатами экспериментов по оже-спектроскопии для системы сплавов $Y(Rh_{1-x}Ru_x)_4B_4$ [16].

Результаты расчетов парциальных плотностей состояний (см. рис. 3) свидетельствуют о сильной гибридизации d -состояний родия с d -состояниями иттрия (или лютеция) и с p -состояниями бора. Это приводит к

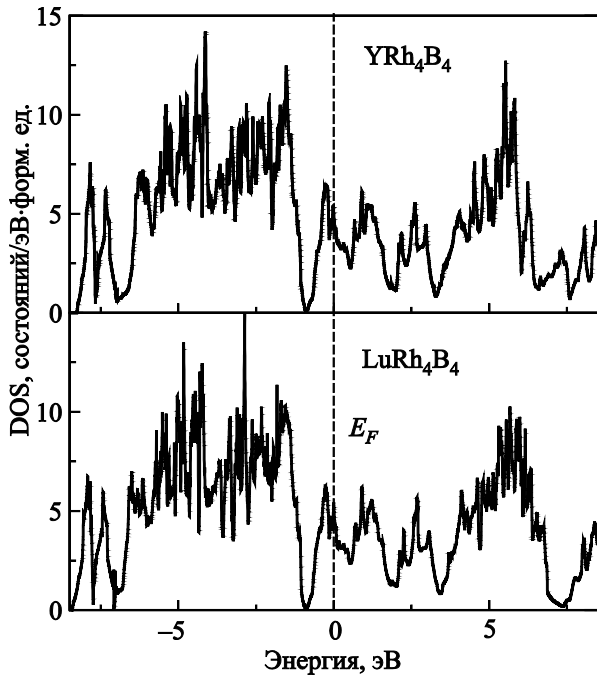


Рис. 2. Плотности электронных состояний $N(E)$ для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$. Уровень Ферми ($E = 0$) отмечен вертикальной пунктирной линией.

появлению групп связывающих и антисвязывающих состояний, разделенных псевдощелью в электронном спектре ниже уровня Ферми. На рис. 2 и 3 видно, что в непосредственной близости от уровня Ферми в плотности электронных состояний сверхпроводящих боридов YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ имеется острый пик. При этом основной вклад в $N(E_F)$ вносят d -состояния родия.

В целом результаты наших расчетов для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ качественно согласуются с рассчитанными DOS для $ErRh_4B_4$ [9] и $HoRh_4B_4$ [10]. Однако настоящие расчеты позволили с большой точностью описать тонкие детали электронных спектров, в частности пик в плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, а также наличие и положение псевдощели для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$. Следует отметить, что использованный в настоящей работе метод расчета электронной структуры (FP-LMTO) является наиболее адекватным для систем с сильно неоднородным распределением электронной плотности, каковыми и являются соединения RRh_4B_4 .

Рассчитанная зонная структура $E(k)$ соединения YRh_4B_4 представлена на рис. 4, где можно видеть присутствие вблизи уровня Ферми квазивырожденных состояний на линиях симметрии $\Gamma-X$, $P-Z$ и $\Gamma-N$, а также почти бездисперсионной ветви спектра $E(k)$ в направлении $P-Z$. Положение этой ветви соответствует острому пику плотности состояний в окрестности E_F (особенности Ван Хофа на рис. 3). Зонная структура изовалентного соединения $LuRh_4B_4$ имеет похожий вид.

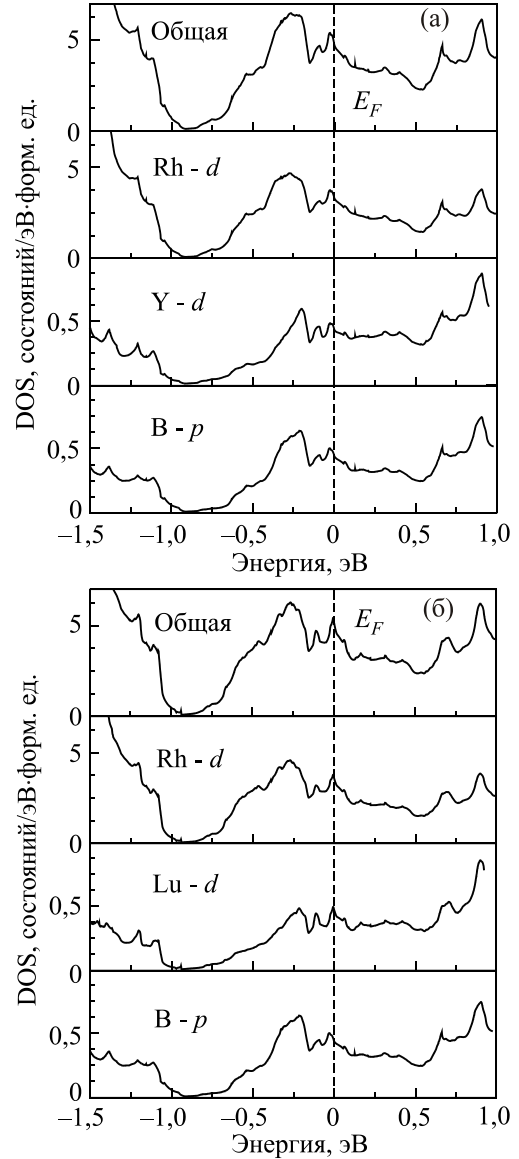


Рис. 3. Полные и парциальные плотности электронных состояний $N(E)$ соединений YRh_4B_4 (а) и $LuRh_4B_4$ (б) вблизи уровня Ферми ($E = 0$).

Рассчитанные значения плотностей электронных состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ представлены в табл. 1. Их сопоставление с имеющимися экспериментальными данными о коэффициентах электронной теплоемкости γ_{exp} [17–19] в рамках выражения

$$\gamma_{\text{exp}} = (1 + \lambda)\pi^2 k_B^2 N(E_F)/3 \quad (1)$$

указывает на заметную величину параметра λ , описывающего перенормировку эффективных масс вследствие, главным образом, электрон-фононного взаимодействия (табл. 1). Соответствующие приведенным значениям параметра λ оценки температуры сверхпроводящего перехода могут быть получены с использованием формулы Макмиллана [21]:

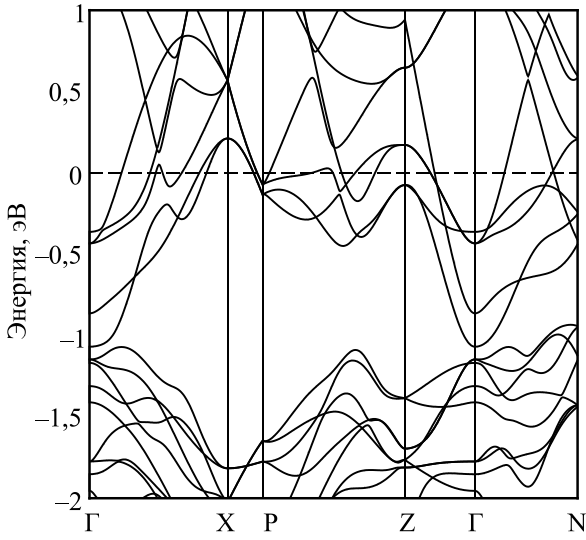


Рис. 4. Зонная структура YRh_4B_4 , рассчитанная вдоль направлений симметрии зоны Бриллюэна. Уровень Ферми отмечен горизонтальной пунктирной линией.

$$T_c = \frac{\Theta_D}{1,45} \exp \left[-\frac{1,04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0,62\lambda)} \right], \quad (2)$$

где Θ_D — температура Дебая, λ — константа электрон-фононного взаимодействия, μ^* — кулоновский псевдопотенциал Мореля–Андерсона. Подставляя в (2) экспериментальные значения Θ_D и величину $\mu^* = 0,13$, принятую для переходных металлов [21], находим значения T_c для исследуемых соединений, которые приведены в табл. 1. Отметим, что точность полученных оценок T_c обусловлена, в основном, погрешностями определения значений коэффициента электронной теплоемкости γ и вытекающих из него значений параметра λ , зависимость от которого температуры сверхпроводящего перехода наиболее существенна. Укажем также на возможное наличие спин-флуктуационного вклада в параметр перенормировки эффективных масс λ , учет которого приводил бы к более низким оценкам константы электрон-фононного взаимодействия и улучшению согласия расчетных значений T_c с экспериментом. Тем не менее приведенные в табл. 1 данные в целом свидетельствуют в пользу электрон-фононного механизма сверхпроводимости типа БКШ в боридах родия с $\lambda \approx 1$.

Таблица 1. Термодинамические характеристики боридов RRh_4B_4 ($R = Y$ и Lu): $N(E_F)$ — плотность электронных состояний на уровне Ферми, γ — коэффициент электронной теплоемкости, Θ_D — температура Дебая, λ — параметр перенормировки эффективных масс, T_c — экспериментальное и теоретическое значения температур перехода в сверхпроводящее состояние.

Соединение	$N(E_F)$ состояний/эВ·форм. ед.	γ (эксп) мДж/моль·К ²	Θ_D , К	λ	T_c (эксп), К	T_c (теор), К
YRh_4B_4	4,81	22–28 [18,20]	334 [18]	1,0–1,5	11,3 [1]	16,5–28,7
$LuRh_4B_4$	5,30	24 [17], 31 [19]	444 [17]	0,9–1,5	11,5 [17]	18,0–38,2

Исследование магнитной восприимчивости соединений YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$

Одной из особенностей магнетизма соединений YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ является сильная зависимость их магнитной восприимчивости от температуры, представленная на рис. 5. С целью выявления природы и основных вкладов в магнетизм этих соединений нами были проведены расчеты их парамагнитной восприимчивости путем вычисления магнитного момента, индуцированного внешним полем \mathbf{B} , согласно [12,13]. При этом влияние магнитного поля на электронную структуру учитывалось самосогласованным образом путем включения в гамильтониан FP-LMTO оператора Зеемана:

$$\mathcal{H}_Z = \mu_B \mathbf{B} \cdot (2\hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{l}}), \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{s}}$ — оператор спина и $\hat{\mathbf{l}}$ — оператор орбитального углового момента. Вычисленные во внешнем поле $\mathbf{B} = 10$ Тл индуцированные спиновый и орбитальный (ван-Флекавский) магнитные моменты позволили получить соответствующие компоненты магнитной восприимчивости, χ_{spin} и χ_{orb} , путем дифференцирования по полю индуцированных намагниченностей. Значения этих компонент, рассчитанные для направления внешнего поля вдоль оси c , приведены в табл. 2, где также представлены расчетные значения восприимчивости Паули, $\chi_P = \mu_B^2 N(E_F)$. Как видно из данных табл. 2, значения χ_P и χ_{spin} оказываются близкими по величине, что свидетельствует о слабости эффектов обменного усиления спиновой восприимчивости в боридах YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$.

В общем виде полная магнитная восприимчивость металлических систем в отсутствие спонтанного магнитного упорядочения может быть выражена в виде слагаемых ([12,13]):

$$\chi_{\text{tot}} = \chi_{\text{spin}} + \chi_{\text{orb}} + \chi_{\text{dia}} + \chi_L, \quad (4)$$

которые представляют, соответственно, спиновую восприимчивость (χ_{spin}), орбитальный парамагнетизм Ван Флека (χ_{orb}), ланжевенковский диамагнетизм электронных оболочек ионов (χ_{dia}), а также орбитальный диамагнетизм электронов проводимости (χ_L), известный как диамагнетизм Ландау. Из данных табл. 2 видно, что спиновый вклад и орбитальный вклад Ван Флека являются определяющими, причем χ_{orb} оказывается того же порядка, что и χ_{spin} . Диа-

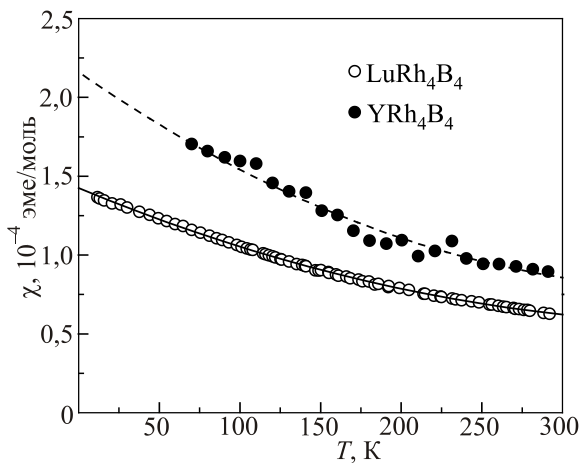


Рис. 5. Температурная зависимость магнитной восприимчивости соединений RRh_4B_4 , ($R = Y, Lu$). Данные для $LuRh_4B_4$ воспроизведены из работы [17], результаты для YRh_4B_4 получены обработкой данных рис. 2 из работы [22].

магнитный вклад ионного остова в восприимчивость исследуемых соединений составил $\chi_{dia} \approx -1 \cdot 10^{-4}$ эме/моль (согласно оценкам из [23]). Таким образом, ланжевенский диамагнетизм также необходимо учитывать при анализе экспериментальной магнитной восприимчивости. В целом рассчитанная парамагнитная восприимчивость YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ находится в качественном согласии с данными экспериментальных исследований [17,22]. Необходимо отметить, однако, что вклады χ_{spin} , χ_{orb} и χ_{dia} не объясняют сильную температурную зависимость магнитной восприимчивости, наблюдаемую в экспериментах для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ [17,22] (см. рис. 5). При этом монотонный рост восприимчивости, наблюдаемый в эксперименте при понижении температуры, также не характерен для проявления возможных магнитных примесей в образцах.

Сопоставление экспериментальных данных по магнитной восприимчивости исследуемых боридов родия YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ с рассчитанными вкладами χ_{spin} , χ_{orb} из табл. 2, а также с оцененными из [23] χ_{dia} позволяет предполагать присутствие существенных диамагнитных вкладов электронов проводимости в их восприимчивость. Известное приближение Ландау

Таблица 2. Магнитные свойства YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$: χ_{exp} — экспериментальные значения магнитной восприимчивости при $T \rightarrow 0$ К по данным рис. 5, χ_{spin} и χ_{orb} — рассчитанные спиновый и орбитальный вклады в восприимчивость, $\chi_{total} = \chi_{spin} + \chi_{orb}$, $\chi_P = \mu_B^2 N(E_F)$ — восприимчивость Паули.

Соединение	χ_{exp}	χ_{spin}	χ_{orb}	χ_{total}	χ_P
YRh_4B_4	~ 2,2	1,7	2,0	3,7	1,5
$LuRh_4B_4$	1,4	1,8	2,1	3,8	1,7

для диамагнетизма свободных электронов χ_L^0 составляет $-1/3$ от соответствующей спиновой восприимчивости Паули и часто используется для оценок. В отличие от спинового вклада, диамагнитная восприимчивость электронов проводимости χ_L обратно пропорциональна эффективной массе электрона m^* , поскольку влияние магнитного поля на орбитальное движение прямо пропорционально скорости электрона. В литературе широко распространено мнение, что в переходных металлах и их соединениях вклад χ_L пренебрежимо мал по сравнению с парамагнитными вкладами в восприимчивость χ_{spin} и χ_{orb} , поскольку в спектре этих металлов вблизи уровня Ферми доминируют d -электроны с большими эффективными массами m^* . К этому выводу следует относиться с осторожностью, поскольку при наличии вырождения s -, p - и гибридных зон в окрестности E_F в соединениях d -металлов возможна реализация аномально больших вкладов в χ_L [24–27].

Ранее было установлено, что небольшие группы квазивырожденных электронных состояний с малыми эффективными массами, расположенные в непосредственной близости от уровня Ферми E_F (около 0,1 эВ или ближе), дают доминирующие диамагнитные вклады в восприимчивость многих систем [28,29]. В таких системах вклады χ_L могут во много раз превосходить оценку Ландау χ_L^0 для диамагнетизма свободных электронов и этот аномальный диамагнетизм обусловлен малыми эффективными массами носителей заряда, малыми спин-орбитальными расщеплениями в спектре и относительной близостью критических точек спектра к E_F [29].

Расчет диамагнитного вклада χ_L в магнитную восприимчивость является довольно сложной задачей (см. [28,29] и ссылки в них). Подобные расчеты χ_L выйдут за рамки настоящей работы, и в качестве первого шага следует определить электронные состояния вблизи E_F , которые могут быть источником большого диамагнетизма и сильной зависимости его от температуры в боридах родия YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$. Как видно на рис. 4, расчеты зонной структуры указывают на присутствие квазивырожденных гибрированных электронных состояний, близких к E_F в YRh_4B_4 на линиях симметрии $\Gamma-X$, $P-Z$ и $\Gamma-N$. Аналогичные квазивырожденные состояния с малыми эффективными массами вблизи E_F присутствуют и в $LuRh_4B_4$. При повышении температуры, с учетом «размытия» функции Ферми-Дирака, возможно относительное приближение уровня химического потенциала к этим точкам вырождения энергетических зон, близким к E_F . В этих точках происходят электронные топологические переходы, которые, согласно [28,29], во многих случаях сопровождаются сингулярностями диамагнитной орбитальной восприимчивости χ_L . Необходимо отметить, что в рамках DFT расчетов тонкие детали спектра $E(k)$, в частности положение критических точек спектра или

же точек вырождения энергетических зон относительно E_F , могут быть достоверно определены с точностью не более 0,1 эВ. Тем не менее на качественном уровне можно предполагать, что сингулярный диамagnetизм в критических точках спектра вблизи E_F может обуславливать экспериментально обнаруженное сильное уменьшение парамагнитной восприимчивости соединений YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ при повышении температуры (см. рис. 5).

Заклучение

Результаты расчетов плотностей электронных состояний $N(E)$ для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ свидетельствуют, что в этих системах энергия Ферми E_F расположена в окрестности ярко выраженных пиков в $N(E)$. Необходимо отметить, что близость псевдощели и особенностей Ван Хофа в $N(E)$ к уровню Ферми E_F в настоящее время рассматривается как важное условие для реализации сверхпроводимости в соединениях d -металлов [30,31].

С использованием результатов расчетов плотности электронных состояний на уровне Ферми был проведен анализ экспериментальных данных об электронной теплоемкости в YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$. Полученные оценки перенормировки эффективных масс электронов проводимости свидетельствуют о возможности реализации электрон-фононного механизма сверхпроводимости в этих системах с $\lambda_{el-ph} \approx 1$. Наряду с этим можно ожидать, что вклад электрон-парамагнитных (спин-флуктуационных) взаимодействий в λ для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ может быть заметным, несколько снижая оценку значений λ_{el-ph} из данных об электронной теплоемкости.

Сопоставление экспериментальных и вычисленных значений магнитной восприимчивости для YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$ указывает на наличие значительного диамагнитного вклада, который можно отнести к орбитальному диамagnetизму электронов проводимости χ_L . Предполагается, что значительная величина χ_L в исследуемых системах связана с наличием квазивырожденных электронных состояний с малой эффективной массой вблизи уровня Ферми. Такие состояния могут быть источником сильной зависимости магнитной восприимчивости от температуры в боридах родия YRh_4B_4 и $LuRh_4B_4$.

Работа выполнена при поддержке гранта НАНУ-РФФИ 78-02-14, а также с использованием вычислительных ресурсов грид-кластера ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины, Харьков.

1. B.T. Matthias, E. Corenzwit, J.M. Vandenberg, and H. Barz, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **74**, 1334 (1977).
2. J.M. Vandenberg and B.T. Matthias, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **74**, 1336 (1977).
3. В.М. Дмитриев, А.В. Терехов, А. Залеский, Е.Н. Хацько, П.С. Калинин, А.И. Рыкова, А.М. Гуревич, С.А. Глаголев,

- Е.П. Хлыбов, И.Е. Костылева, С.А. Лаченков, *ФНТ* **38**, 191 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 154 (2012)].
4. А.В. Терехов, *ФНТ* **39**, 827 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 640 (2013)].
5. W.A. Fertig, D.C. Johnston, L.E. DeLong, R.W. McCallum, M.B. Mapple, and B.T. Matthias, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 987 (1977).
6. M.B. Maple, H.C. Hamaker, D.C. Johnston, H.B. MacKay, and L.D. Woolf, *J. Less-Common Metals* **62**, 251 (1978).
7. R.H. Wang, R.J. Laskowski, C.Y. Huang, J.L. Smith, and C.W. Chu, *J. Appl. Phys.* **49**, 1392 (1978).
8. D.C. Johnston, W.A. Fertig, M.B. Maple, and B.T. Matthias, *Solid State Commun.* **26**, 141 (1978).
9. T. Jarlborg, A.J. Freeman, and T.J. Watson-Yang, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1032 (1977).
10. A.J. Freeman and T. Jarlborg, *J. Appl. Phys.* **50**, 1876 (1979).
11. Ю.Б. Кузьма, Н.С. Билонижко, *Кристаллография* **16**, 1030 (1971) [*Sov. Phys. Crystallogr.* **16**, 897 (1971)].
12. G.E. Grechnev, R. Ahuja, and O. Eriksson, *Phys. Rev. B* **68**, 64414 (2003).
13. G.E. Grechnev, *ФНТ* **35**, 812 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 638 (2009)].
14. J.M. Wills, M. Alouani, P. Andersson, A. Delin, O. Eriksson, and A. Grechnev, *Full-Potential Electronic Structure Method. Energy and Force Calculations with Density Functional and Dynamical Mean Field Theory. Springer Series in Solid-State Sciences*, Springer Verlag, Berlin (2010), Vol. 167.
15. U. von Barth and L. Hedin, *J. Phys. C* **5**, 1629 (1972).
16. H.C. Hamaker, G. Zajac, and S.D. Bader, *Phys. Rev. B* **27**, 6713 (1983).
17. L.D. Woolf, D.C. Johnston, H.B. MacKay, R.W. McCallum, and M.B. Maple, *J. Low. Temp. Phys.* **35**, 651 (1979).
18. K. Kumagai, Y. Inoue, and K. Asayama, *J. Soc. Jpn.* **47**, 1363 (1979).
19. H.R. Ott, A.M. Campbell, H. Rudiger, H.C. Hamaker, and M.B. Mapple, *Physica B* **108**, 751 (1981).
20. J.J. Rieger, W.W. Kim, G. Fraunberger, A.Mielke, E.W. Scheidt, and G.R. Steward, *J. Alloys. Comp.* **200**, 59 (1993).
21. W.L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).
22. P.K. Tse, A.T. Aldred, and F.Y. Fradin, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1825 (1979).
23. П. Селвуд, *Магнетохимия, Изд-во иностр. лит.*, Москва, (1958).
24. А.Е. Барановский, Г.Е. Гречнев, Г.П. Микитик, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **29**, 473 (2003) [*Low Temp. Phys.* **29**, 356 (2003)].
25. А.Е. Baranovskiy, G.E. Grechnev, I.V. Svechkarov, and A. Czopnik, *Czech. J. Phys.* **54**, 355 (2004).
26. А.Е. Барановский, Г.Е. Гречнев, А.С. Панфилов, И.В. Свечкарев, О. Zogal, А. Czopnik, and А. Hackemer, *ФНТ* **33**, 1353 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 1028 (2007)].
27. G.E. Grechnev, A.V. Fedorchenko, A.V. Logosha, A.S. Panfilov, I.V. Svechkarov, V.B. Filippov, A.B. Lyashchenko, and A.V. Evdokimova, *J. Alloys Comp.* **481**, 75 (2009).

28. Г.Е. Гречнев, И.В. Свечкарев, Ю.П. Серeda, *ЖЭТФ* **75**, 993 (1978) [*Sov. Phys. JETP* **48**, 502 (1978)].
29. Г.П. Микитик, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **15**, 295 (1989) [*Sov. Low Temp. Phys.* **15**, 165 (1989)].
30. А.А. Кордюк, *ФНТ* **38**, 1119 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 901 (2012)].
31. А.А. Кордюк, *ФНТ* **41**, 417 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 319 (2015)].

Features of the electronic structure of the ternary superconductors RRh_4B_4 ($R = Y, Lu$)

G.E. Grechnev, A.V. Logosha, A.S. Panfilov,
I.P. Zhuravleva, and A.A. Lyogenkaya

First-principles calculations of the electronic structure and a number of thermodynamical characteristics are performed for the ternary superconducting systems RRh_4B_4 ($R = Y, Lu$) in the normal state. The analysis of electronic states and their interactions responsible for superconducting and magnetic properties of the in-

vestigated systems is carried out. It is found that in YRh_4B_4 and $LuRh_4B_4$ compounds the Fermi level is situated in close proximity to a peak in the density of electronic states, and about 1 eV above of the pseudo-gap in the electronic spectrum. The existence of a number of groups of quasi-degenerate electronic states with a small effective mass near the Fermi level is revealed. These states can be the origin of a substantial conduction electrons diamagnetic contribution to the magnetic susceptibility, and can provide strong temperature dependences of the susceptibility in the rhodium borides.

PACS: 74.20.Pq Electronic structure calculations;
74.70.Dd Ternary, quaternary, and multinary compounds (including Chevrel phases, borocarbides, etc.);
75.10.Lp Band and itinerant models.

Keywords: RRh_4B_4 , electronic structure, superconductivity, magnetic susceptibility.