

05,11

# Формирование магнитных фазовых диаграмм в системе $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ с разнесенными по температуре структурными и магнитными фазовыми переходами

© В.И. Вальков<sup>1</sup>, И.Ф. Грибанов<sup>1</sup>, Е.П. Андрейченко<sup>1</sup>, О.Е. Ковалев<sup>1</sup>, В.И. Митюк<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, Россия

<sup>2</sup> НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

E-mail: valkov09@gmail.com

Поступила в Редакцию 22 августа 2023 г.

В окончательной редакции 3 сентября 2023 г.

Принята к публикации 4 сентября 2023 г.

Проведен анализ и моделирование магнитоструктурных диаграмм системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$  при использовании обменно-структурной модели взаимодействующих параметров спинового и структурного порядков. Спиновая подсистема с гелимагнитным порядком в ромбической фазе описывается в приближении среднего поля, а изменение симметрии структурной подсистемы учитывается в приближении смещенного гармонического осциллятора. Получено качественное согласие между теоретическими и экспериментальными особенностями магнитоструктурных диаграмм под давлением до 14 kbar.

**Ключевые слова:** магнитоструктурный переход, магнитные фазовые диаграммы, гелимагнетизм, барические особенности.

DOI: 10.61011/FTT.2023.10.56324.187

## 1. Введение

В твердых растворах систем на основе  $MnNiGe$  [1–3] в ряде случаев структурный парамагнитный переход 1-го рода, типа смещения  $PM(P_{63}/mmc)–PM(P_{nma})$  из гексагональной (hex) фазы с кристаллической решеткой типа  $Ni_2In$  в ромбическую (orth) с кристаллической решеткой типа  $TiNiSi$  фазу отделен от низкотемпературных магнитных фазовых переходов второго рода парамагнетизм–ферромагнетизм ( $PM(P_{nma})–FM(P_{nma})$ ) [1], парамагнетизм–гелимагнетизм ( $PM(P_{nma})–HM(P_{nma})$ ) [2–3] существенным (до 100 K) температурным интервалом, рис. 1. Наиболее характерной особенностью магнитоструктурных P–T диаграмм, этих систем является, парадоксальное поведение, согласно рис. 2 ([4–5]), линий магнитных фазовых изоструктурных и магнитоструктурных переходов порядок–беспорядок.

При этом, когда  $T_C(h-h) \equiv T_C(hex-hex) = \text{const}$  (рис. 1, a), возрастание зависимости температур изоструктурного магнитного упорядочения  $T_C(o-o)$ ,  $T_N(o-o)$  при увеличении давления, вплоть до соприкосновения этих линий переходов 2-го рода с температурами лабильности  $T_{f1}, T_{f2}$  гексагональной, ромбической фаз является парадоксом так как противоречит, „картине“ возникновения ромбического магнитного порядка, которую можно выделить из характерных температурных зависимостей обратной парамагнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$ , рис. 2.

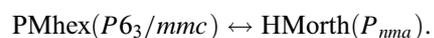
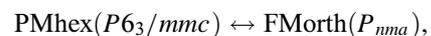
Действительно, из зависимостей  $\chi_{hex}^{-1}(T)$  и  $\chi_{orth}^{-1}(T)$  видно, что парамагнитные температуры Кюри гекса-

гональной ( $\Theta_{hex}$ ) и ромбической ( $\Theta_{orth}$ ) фаз близкие к температурам спонтанного возникновения магнитного порядка в соответствующих фазах соотносятся как  $\Theta_{hex} \ll \Theta_{orth}$ . Отсюда очевидно, что устойчивость спонтанной магнитоупорядоченной фазы с ромбической кристаллической структурой определяется устойчивостью ромбической фазы. Поэтому если температура устойчивости ромбической фазы понижается при возрастании давления ( $\partial T_{f1,2}/\partial P < 0$ , рис. 1) то очевидным было бы предположить, что и устойчивость ромбической магнитоупорядоченной фазы также понижается. Однако, согласно рис. 1 в температурно-барической области переходов 2-го рода  $\partial T_{C,N}/\partial P > 0$ . Это противоречие составляет основу парадоксального поведения линий магнитных фазовых переходов 2-го рода P–T-диаграммы.

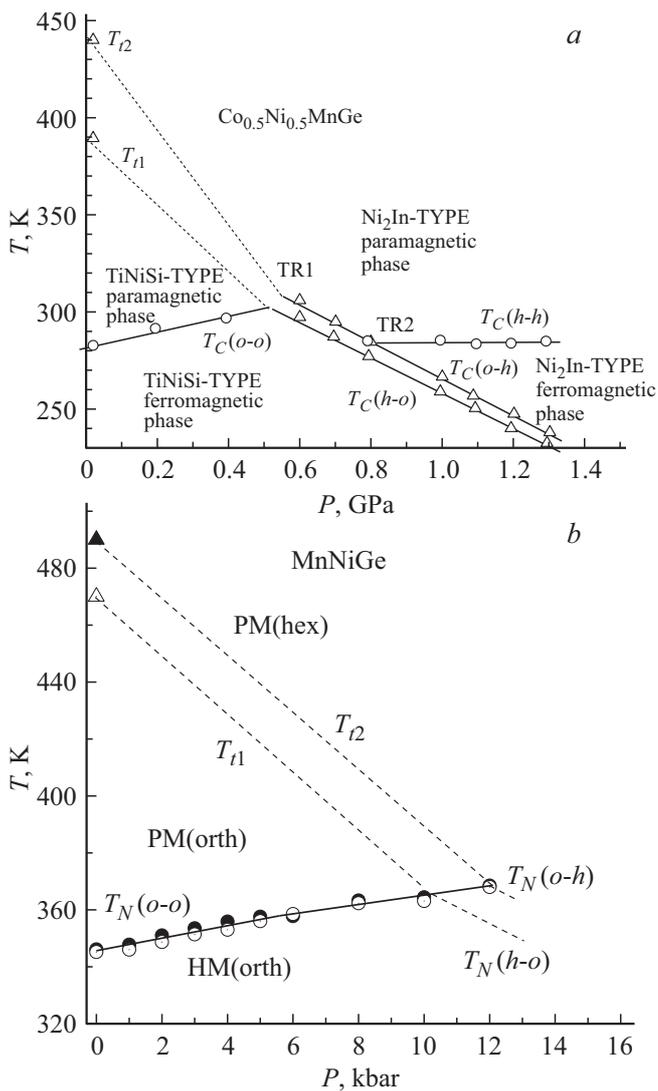
При давлениях  $P > 0.5$  GPa (рис. 1, a) и  $P > 10$  kbar (рис. 1, b) происходит совмещение магнитного и структурного переходов. Последующее увеличение давления приводит к трансформации изоструктурных переходов 2-го рода



к магнитоструктурным переходам 1-го рода



Этот процесс сопровождается не только слиянием температур лабильности структурного  $T_{f1}, T_{f2}$  и



**Рис. 1.** P–T-диаграммы  $Co_{0.5}Ni_{0.5}MnGe$  (a)  $MnNiGe$  (b) типичные для ряда германидов с разнесенными по температуре структурным и магнитным фазовыми переходами, a — [3], b — [2].  $T_{C(N)}(o-o)$ ,  $T_N(o-o)$  и  $T_C(h-h)$  — линии изоструктурных переходов 2-го рода  $PM_{orth}(P_{nma}) \leftrightarrow FM(HM)_{orth}(P_{nma})$  и  $PM_{hex}(P_{63}/mmc) \leftrightarrow FM_{hex}(P_{63}/mmc)$ ;  $T_{C(N)}(o-h)$ ,  $T_{C(N)}(h-o)$  — соответствующие линии магнитоструктурных переходов 1-го рода  $FM(HM)_{orth}(P_{nma}) \rightarrow PM_{hex}(P_{63}/mmc)$ ,  $PM_{hex}(P_{63}/mmc) \rightarrow FM(HM)_{orth}(P_{nma})$ .

магнитного  $T_{C,N}(o-h)$ ,  $T_{C,N}(h-o)$  переходов, но и исчезновением аномального барического поведения ромбической магнитоупорядоченной фазы: происходит изменение знака производных этих величин по давлению ( $\partial T_{C,N}(o-h)/\partial P < 0$ ,  $\partial T_{C,N}(h-o)/\partial P < 0$ ), рис. 1.

Следует отметить также, что возникновение магнитоструктурных переходов под давлением приводит к дополнительному увеличению магнитокалорического эффекта (МКЭ). Поскольку повышение кристаллической симметрии от ромбической до гексагональной, сопровождающее спонтанное магнитное разупорядоче-

ние  $HM_{orth}(P_{nma}) \rightarrow PM_{hex}(P_{63}/mmc)$ , суммируется с повышением магнитной симметрии и дополнительным увеличением общей энтропии системы. Как следствие, это приводит к увеличению модуля МКЭ при размагничивании. Поэтому понимание механизмов температурно-барических особенностей имеют существенное прикладное значение.

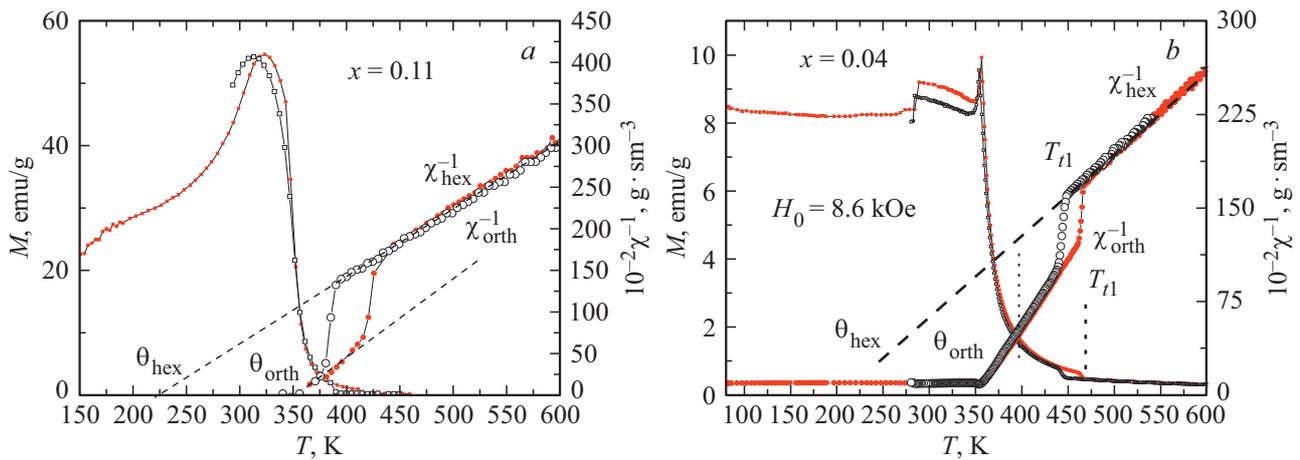
Настоящая работа посвящена анализу и объяснению аномальных особенностей магнитных фазовых диаграмм системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$  в рамках, так называемой, обменно-структурной модели.

## 2. Основные положения обменно-структурной модели для взаимодействующих структурных и спиновых степеней свободы

Частично исходим из положений, изложенных в работах [5–6], в которых исходное высокосимметричное парамагнитное (PM) состояние при  $T \geq T_{i2}$  соответствует гексагональному (hex) парамагнитному состоянию ( $P_{63}/mmc$ ). Низкосимметричное PM-состояние при  $T \leq T_{i1}$ , возникающее в результате структурного перехода 1-го рода  $PM_{hex}(P_{63}/mmc) \leftrightarrow M_{orth}(P_{nma})$  характеризуется параметром структурного порядка  $Q_0$ . Согласно [5]  $Q_0$  является средним статистическим  $Q_0 = \langle Q_n \rangle_\rho$  значением величин  $Q_n$  (Приложение). Величины  $Q_n = (U_{nz}^{Ni_1} - U_{nz}^{Ni_2})/c_{hex}$  описывают в классическом приближении локальные групповые смещения атомов  $Ni_1$ ,  $Ni_2$  в  $n$ -ой гексагональной ячейке вдоль направления  $z$ , рис. 3. Появление средних  $Q_0 = \langle Q_n \rangle_\rho$  как межъядерных корреляций между локальными смещениями  $Q_n$ , возникает в результате конкуренции внутриячейного одночастичного потенциала  $W(Q_n) = \sum_n (\tilde{\omega}^2 Q_n^2 + \tilde{\gamma} Q_n^4 + \tilde{\Gamma} Q_n^6)$  и межъядерных многочастичных взаимодействий ( $-\sum_{n,n'} V(n, n') Q_n Q_{n'}$ ) (Приложение).

При этом полагается, что нелокальные (общие с соседними ячейками) смещения атомов  $Mn_1$  ( $Mn_2$ ) —  $U_{nx}^{Mn_1}$  ( $U_{nx}^{Mn_2}$ ) возникают вследствие ортогональных локальных (принадлежащих одной  $n$ -ой ячейке) смещений атомов  $Ni$   $U_{nz}^{Ni_1}$ , ( $U_{nz}^{Ni_2}$ ) и  $Ge$   $U_{nx}^{Ge_1}$ , ( $U_{nx}^{Ge_2}$ ). В целом групповые смещения всех атомов ячейки могут характеризовать амплитуду фононной мягкой моды, замерзание которой приводит к понижению гексагональной симметрии  $P_{63}/mmc$  до ромбической  $P_{nma}$  и возникновению кооперативного структурного перехода  $P_{63}/mmc - P_{nma}$  во всей системе.

Согласно экспериментальным данным [7–8] магнитоупорядоченному состоянию с ромбической сингонией (orth) соответствует простая гелимагнитная структура, описываемая волновым вектором  $\mathbf{q} = [0, 0, q_a]$ . В качестве параметра магнитного порядка рассматривается величина  $y = \langle U_{nk}^k \rangle / s = \langle \hat{m}_n^k \rangle / s \equiv m/s$ , которая в рам-



**Рис. 2.** Характерные температурные зависимости намагниченности  $\sigma$  и обратной восприимчивости  $\chi^{-1}$  образцов системы  $\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{NiGe}$ , [4-5].

как модели Гейзенберга в приближении среднего поля (ПСП) определяется (Приложение) как статистическое среднее  $\langle \hat{m}_n^k \rangle \equiv m$  проекции оператора  $\hat{m}_n^k$   $k$ -того спина атома (Mn)  $\hat{s}_n^k$  в  $n$ -ой гексагональной ячейке на направление локальной оси квантования  $\mathbf{U}_n^k$  [6].

В исходных работах [5-6] взаимосвязь между спиновой и структурной подсистемами определялась присутствием в составляющих  $J_i$  Фурье-компоненты межатомных обменных взаимодействий (1) комбинаций параметров структурного порядка  $Q_n^2$  с упругими деформациями типа  $e_1 Q_0^2$ .

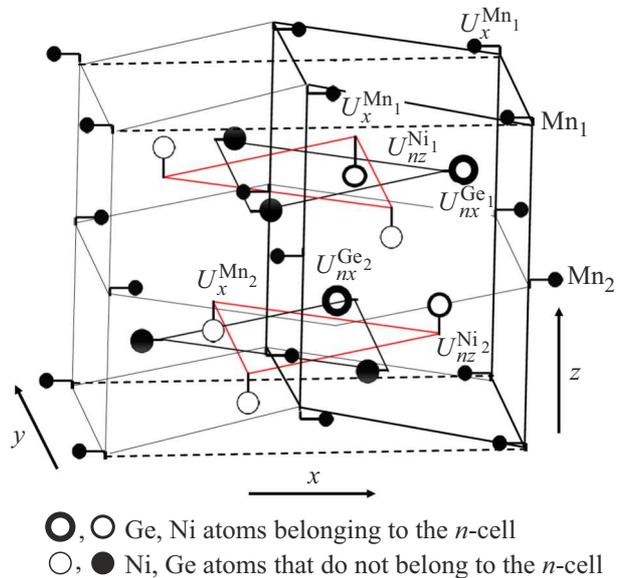
$$J(q_a) = \sum_{\Delta \mathbf{R}} J(|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|) \cos(\mathbf{q} \Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'})$$

$$\approx \sum_{i=0}^2 J_i(Q_0^2, e_1 Q_0^2) \cos(i\Psi), \quad (1a)$$

$$J_i = \sum_{\Delta \mathbf{R}_{i=0}}^2 J(|\Delta \mathbf{R}_i|), \quad (1b)$$

где  $\Delta \mathbf{R}_i = [\Delta R_x, \Delta R_y, ic_{\text{hex}}/2]$ ;  $J_i$  — соответствующие составляющие Фурье-компоненты интегралов обменных взаимодействий внутри ферромагнитного слоя и между ближайшими слоями на расстояниях  $|\Delta \mathbf{R}_1| = c_{\text{hex}}/2$  и  $|\Delta \mathbf{R}_2| = c_{\text{hex}}$ ,  $\Psi = \mathbf{q}_a c_{\text{hex}}/2$ ,  $2\Psi = \mathbf{q}_a c_{\text{hex}}$ , при учете ближайших соседей в гексагональной базовой плоскости  $\sqrt{(\Delta R_x)^2 + (\Delta R_y)^2} = a_{\text{hex}}$  где  $c_{\text{hex}}$  и  $a_{\text{hex}}$  — параметры гексагональной решетки вдоль и перпендикулярно направлению  $z$ .

При этом в работах [5-6] появление зависимостей  $J_i(Q_0^2, e_1 Q_0^2)$  как ограниченной реакции спиновой подсистемы на смещения атомов Ni принималось априори. Подобный подход позволял описывать возрастание температур магнитного разупорядочения ( $\partial T_{N,C}/\partial P > 0$ ) в области изоструктурных переходов 2-го рода,  $\text{PM}(P_{nma})\text{--}\text{NM}(P_{nma})$ , при малых давлени-



**Рис. 3.** Локальные оптические смещения  $U_x^{\text{Ni}_1}$ ,  $(U_{nz}^{\text{Ni}_2})$ ,  $U_{nx}^{\text{Ge}_1}$ ,  $(U_{nz}^{\text{Ge}_2})$  атомов Ni и Ge соответственно, относящиеся к  $n$ -ой гексагональной ячейке  $\text{MnNiGe}$  типа  $\text{Ni}_2\text{In}$  (показана жирными линиями). Штриховыми линиями выделен базисный участок ромбической ячейки типа  $\text{MnNiGe}$ .

ях порядка  $P < 7$  kbar и трансформацию этих переходов к магнитоструктурным переходам 1-го рода при больших давлениях. Однако сохранение возрастания зависимостей  $T_{N_{1,2}}(P)$ , совпадающих с температурами лабильности магнитооупорядоченных переходов 1-го рода  $\text{PM}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{NM}(P_{nma})$  определяет качественное несоответствие между теоретическими и экспериментальными (рис. 1)  $P$ – $T$ -диаграммами, на которых подобные зависимости претерпевают излом и становятся убывающими функциями давления.

В настоящей работе мы исходим из того, что связь между спиновой и структурной подсистемами долж-

на описываться конкурирующими вкладами. Один из них может быть получен при учете реакции структурной (фононной) подсистемы на изменение степени поляризации связующих и антисвязующих электронных  $d$ -состояний магнитоактивных атомов. В рассматриваемом подходе, использующем гейзенберговскую форму для описания взаимодействий в спиновой подсистеме, гамильтониан структурно-спинового взаимодействия можно представить в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_{sQ} &= - \sum_{nk,n'k'} (L_{nn'}^{kk'} \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} Q_n Q_{n'} + e_1 l_{nn'}^{kk'} \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} Q_n Q_{n'}) \\ &\approx - \sum_{nk,n'k'} (L_{nn'}^{kk'} + e_1 l_{nn'}^{kk'}) \langle \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} \rangle Q_n Q_{n'} \\ &\quad - \sum_{nk,n'k'} (L_{nn'}^{kk'} + e_1 l_{nn'}^{kk'}) \langle \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} \rangle_h Q_n Q_{n'}. \end{aligned} \quad (2)$$

В этом случае, согласно (П15b) Приложения компоненты  $J(q_a)$  и  $j_i$  трансформируются в компоненты  $\tilde{J}(q_a)$  и  $\tilde{J}_i(Q_0)$ , которые выражаются через

$$\sum_{nk,n'k'} L_{nn'}^{kk'} \langle Q_n Q_{n'} \rangle_\rho$$

и имеют вид

$$\tilde{J}(q_a) \approx \sum_{i=0}^2 \tilde{J}_i(Q_0^2, e_1 Q_0^2) \cos(i\Psi), \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{J}_i(Q_0) &= \sum_{\Delta \mathbf{R}_i} [J(|\Delta \mathbf{R}_i|) + [2L(|\Delta \mathbf{R}_i|) + e_1 2l(|\Delta \mathbf{R}_i|)] Q_0^2] \\ &= J_i + [2L_i + e_1 2l_i] Q_0^2. \end{aligned} \quad (3b)$$

Этот вклад идентичен по форме (1) и сохраняет все его недостатки. Второй конкурирующий вклад может возникать, если непосредственно учитывать изменения составляющих Фурье-компоненты обменного взаимодействия  $J_i$  при смещениях атомов Ni. Появление конкурирующего вклада может быть следствием более сложных изменений величины  $\tilde{J}(q_a)$ , сопровождающих структурный переход. Действительно, логично допустить, что в исследуемой системе межатомные обменные взаимодействия формируются в виде суперпозиции косвенного и кинетического обменов [9] и существенным образом зависят от перекрытия и искажения волновых функций  $d$ -электронов. Можно предположить, что изменения перекрытия, обусловленные нарушением гексагональной сингонии формируют зависимость  $J_i \equiv J_i(Q_0)$ , качественно отличающуюся от  $[2L_i + e_1 2l_i] Q_0^2$ .

Выражения для полного ТП системы  $\Omega = \tilde{\Omega}_s + \tilde{\Omega}_Q + \Omega_e$  с учетом (3) приводится в Приложении ( $\Omega_e$  — ТП упругой подсистемы с гексагональной симметрией [10]).

Равновесные зависимости магнитных, структурных и упругих характеристик можно получить из уравнений

$$\begin{aligned} \partial J(q_a)/\partial \Psi = 0, \quad \partial \Omega/\partial \vartheta = 0, \quad \partial \Omega/\partial \tilde{\sigma} = 0, \\ \partial \Omega/\partial e_1 = 0, \quad \partial \Omega/\partial e_2 = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\partial \Omega/\partial y = 0, \quad \partial \Omega/\partial Q_0 = 0, \quad (5)$$

$e_1 = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$  и  $e_2 = (e_{xx} - e_{yy})/\sqrt{3} \neq 0$  упругие объемные и ромбические деформаций ячейки как целого. Уравнения  $\partial J(q_a)/\partial \Psi = 0$ ,  $\partial \Omega/\partial \vartheta = 0$ , позволяют получить условия существования гелимагнитной структуры без поля (П14) и в поле при  $\mathbf{H}_0 = [0, 0, H_0]$ ,  $H_0 > 0$  (П21).

При задании конкретной аппроксимации зависимости  $J_i \equiv J_i(Q_0)$  последующие три уравнения имеют аналитические решения в виде зависимостей:  $e_1 = e_1(y, Q_0, T, P)$ ,  $e_2 = e_2(Q_0)$ ,  $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(Q_0, T)$ . Последние два уравнения (5)  $\partial \Omega/\partial Q_0 = 0$ ,  $\partial \Omega/\partial y = 0$  приводятся к виду (6) и решаются численно

$$(\partial \Omega/\partial Q_0) = 0, \quad (6a)$$

$$y = B_s(X), \quad (6b)$$

$$B_s(X) = \left[ \left( \frac{1}{2s+1} \right) \coth \frac{1}{2s+1} X - \left( \frac{1}{2s} \right) \coth \frac{1}{2s} X \right]$$

— функция Бриллюэна  $X = hs/k_B T$ .

Решения системы уравнений (6) определяют поведение температурных зависимостей магнитоструктурных характеристик исследуемой модели. Это параметры структурного  $Q_0(T)$  и магнитного  $y(T)$  порядков; намагниченность  $\sigma(T)$  для заданных значений напряженности магнитного поля  $H_0$  (7a) и безразмерная обратная парамагнитная восприимчивость  $\chi^{-1}(T)$  в пределе  $H_0 \rightarrow 0$  (7b).

$$\sigma(T) = M_0(x) y(T) \cos \vartheta(T), \quad (7a)$$

$$\chi^{-1}(T) = \frac{T}{T_0} - h_{Fm}(T), \quad (7b)$$

$$h_{Fm}(T) = h_m(q_a = 0, y = 0),$$

$M_0(x)$  — максимальный магнитный момент при коллинеарной конфигурации ( $\cos \vartheta(T) = 1$ ) локализованных спинов Mn для образца с заданным числом  $x$  и спином  $s = 3/2$ ; для его расчета используем выражение

$$\begin{aligned} M_0 [\text{emu/g}] &= (1-x) 2s \mu_B / A(x) \\ &= 1.116906 * s * 10\,000 * (1-x) / A, \end{aligned} \quad (8)$$

$A(x)$  — атомный вес на формульную единицу.

Последующий анализ решений (6) показал, что сближение теоретических и экспериментальных P–T-диаграмм достигается если зависимости  $J_i(Q_0)$ ,  $\tilde{J}(q_a)$  представляются в виде (9), (10) при  $1/2 < d < 1$ . В этом случае конкуренция между исходными вкладами  $L_i Q_0^2$  и вкладами от  $J_i(Q_0)$  может приводить к изменению знака  $\partial T_{C_{1,2}}(P)/\partial P$ ,  $\partial T_{N_{1,2}}(P)/\partial P$  при высоких давлениях.

$$J_i(Q_0) = J_{i0} + |Q_0|^{2d} \{ \lambda_{i0} + \lambda_{i1} e_1 + \lambda_{i4} |Q_0|^{2d} \}, \quad (9)$$

**Таблица 1.** Основные экспериментальные данные и их изменения под давлением для системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$

$x \downarrow$	$T_{12}$	$T_{11}$	$\cos \psi$	$\frac{\sigma_m(0)}{\sigma_m(12)}$	$(\frac{\partial T_N}{\partial P})_0$	$(\frac{\partial T_{N2}}{\partial P})_{12}$	$\theta_{hex}$	$\theta_{orth}$
Ед. измер. $\rightarrow$	К			emu/g	К/kbar		К	
0.11	431	390	0.92–0.9	$\frac{49.9}{51.2}$	3.05	–4.6	225	350
0.07	449	423		$\frac{28}{49}$	2.5	–1.4		
0.04	460	443	0.8–0.87	$\frac{10.5}{27.5}$	2.7	–5.7	225	350

**Таблица 2.** Основные опорные постоянные термодинамического потенциала, используемые для описания барических особенностей магнитоструктурных характеристик

$x \downarrow$	$v_0$	A	B	$\delta$	$\lambda_{00}$	$\lambda_{20}$	$M_0(x)$	$-L_{20}$	$-\lambda_{01}$	$\frac{a_3}{10^{-5}}$	$T_0$
Ед. измер. $\rightarrow$	kbar						emu/g			kbar	К
0.11	43.616	9	98	0.918	27.2	1.646	80.2	2.68	141.9	307	50
0.07	44/137	11.8	98	0.827	28	2.02	83.75	10.56	141.9	321	50
0.04	44.544	18	08	0.724	34.4	1.197	86.4	12.32	141.9	331	49

Примечание. Значения  $a_3 = Nk_B$  вычислены на основе значений рентгеновской плотности. Величины  $M_0(x)$  вычислены для спина  $s = 3/2$  по формуле (8),  $L_{00} = \lambda_{21} = 0$ .

$$\begin{aligned} \tilde{J}(q_a) &\approx \sum_{i=0}^2 \tilde{J}_i(Q_0) \cos(i\Psi) \\ &\equiv \sum_{i=0}^2 J_i(Q_0) \cos(i\Psi) + \sum_{i=0}^2 2L_i(Q_0) \cos(i\Psi) \\ &\equiv J_{00} \left[ r_{AF} + |Q_0|^{2d} (\lambda_{AF} + \lambda_{1AF} e_1)^2 + 2\lambda |Q_0|^{4d} \right] + J_{00} 2L_{AF} Q_0^2, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} r_{AF} &= 1 + K(\Psi, Q_0), \quad \lambda_{AF} = \lambda_{00} + \lambda_{20} K(\Psi, Q_0), \\ \lambda_{1AF} &= \lambda_{01} + \lambda_{21} K(\Psi, Q_0), \end{aligned} \tag{11a}$$

$$\begin{aligned} \lambda_{4AF} &= \lambda_{04} + \lambda_{24} K(\Psi, Q_0), \quad L_{AF} = L_{00} + L_{20} K(\Psi, Q_0), \\ \delta(Q_0) &= 1 - A Q_0^2 + B Q_0^4, \end{aligned} \tag{11b}$$

$$J_{00} = J_0(Q_0 = e_1 = 0) = k_B T_0 2/3s(s + 1),$$

$$K(\Psi, Q_0) = \frac{J_{20}}{J_{00}} (\cos(\Psi) - 1) [2\delta(Q_0) - \cos(\Psi) - 1]. \tag{11c}$$

Значения постоянных в (11) приводятся в табл. 1, 2.

### 3. Результаты численных решений уравнений состояния для конкретных систем $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ с заданной концентрацией $x$

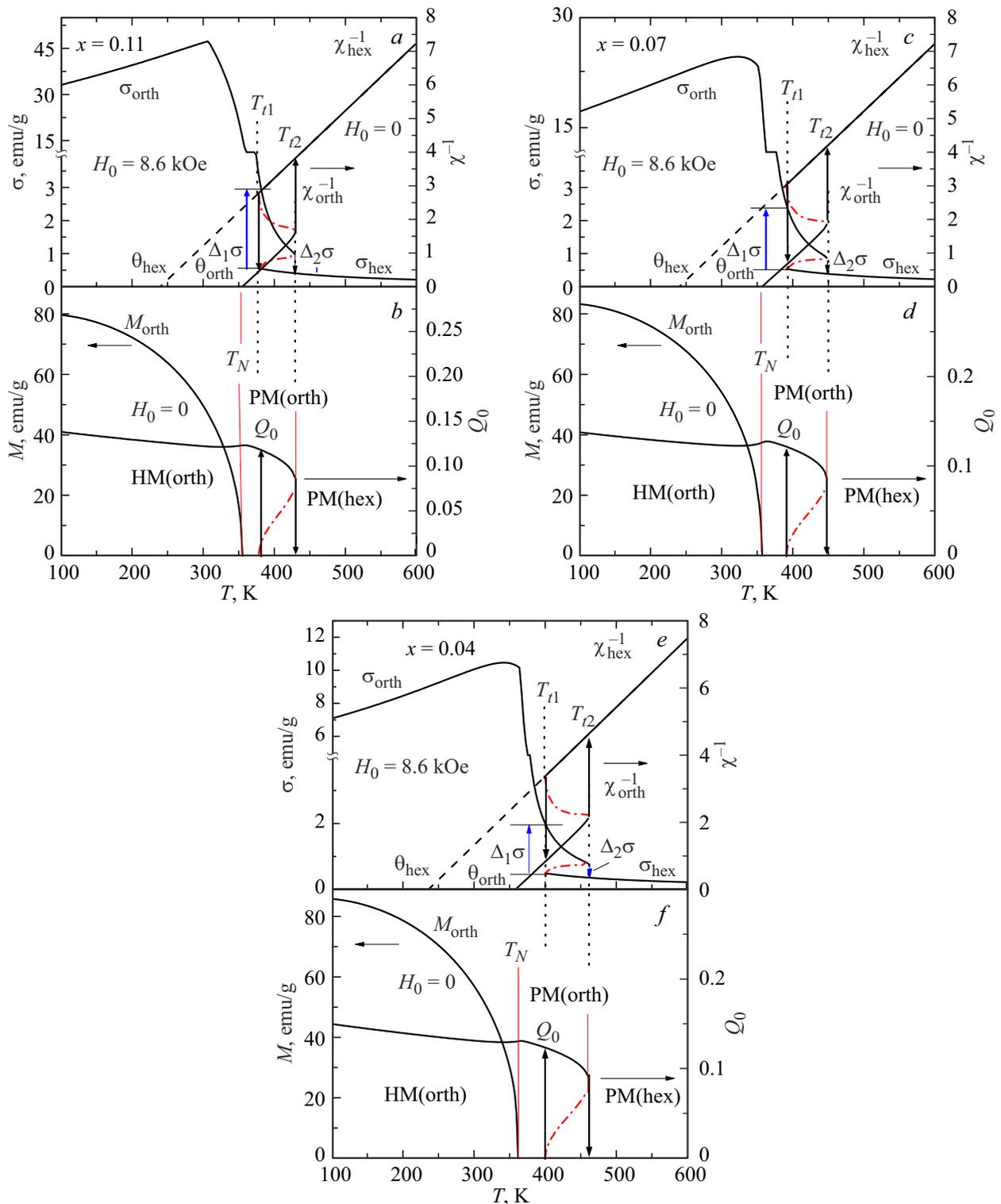
При выборе значений постоянных (табл. 2) использовались ряд экспериментальных данных при атмосферном

давлении (табл. 1). К которым относятся параметры геликоидальной структуры  $\cos(\Psi)$ , максимальные величины намагниченности  $\sigma_m(0)$ ,  $\sigma_m(12)$  в поле  $H_0 = 9.7$  kOe и давлениях  $P = 0$ ,  $P = 12$  kbar, величины температур магнитных  $T_N(x)$  и структурных  $T_{1,2}(x)$  переходов и их производных  $(\partial T_N / \partial P)_0$ ,  $(\partial T_{N2} / \partial P)_{12}$  при  $P = 0$  и  $P = 12$  kbar, значения парамагнитных температур Кюри  $\theta_{hex}(x)$ ,  $\theta_{orth}(x)$ .

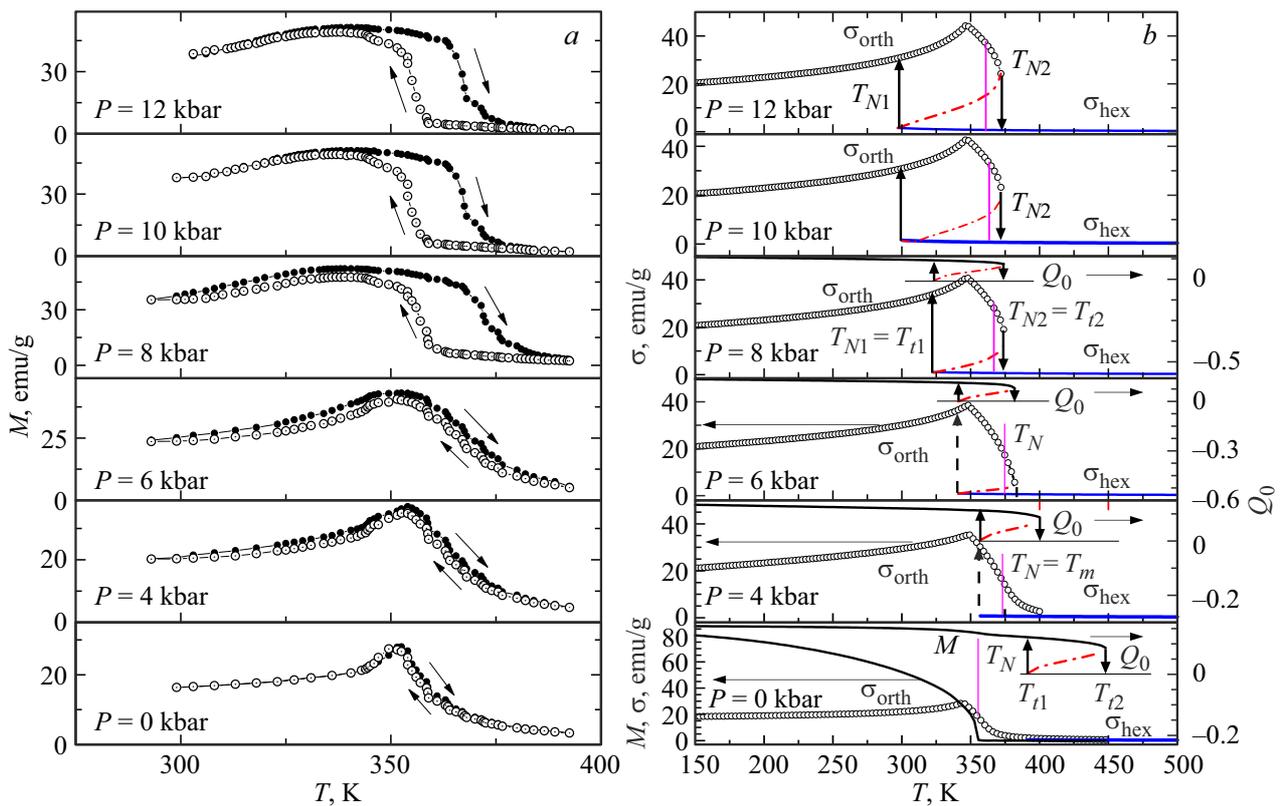
Верификация теоретических результатов для образцов системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$  полагалась удовлетворительной, если единожды сделанный выбор постоянных с привязкой к экспериментальным данным для атмосферного давления позволял качественно верно описывать их изменения для произвольных давлений (табл. 1).

К примеру проводилось сопоставление изобарических экспериментальных и теоретических зависимостей обратной парамагнитной восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  и намагниченности  $\sigma(T) = y(T)M_0(x) \cos[\vartheta(T)]$  в диапазоне давлений 0–12 kbar и магнитных полей до  $H_0 = 9.7$  kOe, рис. 4, 5.

На рис. 4 периферийные высокотемпературные скачки намагниченности  $\Delta_{1,2}\sigma$  иллюстрируют магнитоструктурный механизм аномального поведения в области РМ структурного перехода 1-го рода  $hex(P6_3/mmc) \leftrightarrow orth(Pnma)$ ; рис. 2. Связь скачков  $\Delta_{1,2}\sigma = H_0/\chi^{-1}(T)$  со скачками параметра структурного порядка  $Q_0$  при структурном переходе прослеживается из рис. 4, *b, d, f*. Появление максимума намагниченности при понижении температуры на рис. 4 коррелирует с экспериментальными графиками (рис. 2)



**Рис. 4.** Теоретические температурные зависимости магнитоструктурных характеристик, сопоставляемые образцам системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$  при атмосферном давлении. Намагниченность  $\sigma(T) = M_0(x)y(T) \cos \vartheta(T)$  и безразмерный параметр структурного порядка  $Q_0(T)$  рассчитывалась в поле  $H_0 = 8.6$  kOe; спиновый магнитный момент атомов марганца  $M(T) = y(T)M_0(x)$  в единицах emu/g, безразмерная обратная парамагнитная восприимчивости  $\chi^{-1}(T)$  рассчитаны в поле  $H_0 = 0$ ; штрихпунктирные линии — описывают метастабильные участки соответствующих зависимостей.



**Рис. 5.** Сопоставление изобарических экспериментальных (слева) и теоретических (справа) температурных зависимостей намагниченности  $\sigma$  образца  $\text{Mn}_{0.83}\text{Cr}_{0.07}\text{NiGe}$  во внешнем магнитном поле  $H_0 = 9.7 \text{ kOe}$ . Зависимость  $M(T) = y(T)M_0(x)$  рассчитывалась при  $H_0 = 0$  для определения спонтанной температуры Нееля  $T_N$  в  $P$ - $T$ -области переходов 2-го рода.

и возникает в результате конкуренции двух вкладов в среднее поле (П16). Обменного пространственно-периодического вклада  $2s y [\tilde{J}(q_a) \sin^2(\vartheta) + \tilde{J}(0) \cos^2(\vartheta)]$  и пространственно-однородного вклада от внешнего магнитного поля  $2\mu_0 H_0 \cos(\vartheta)$ . В этом случае, при температурах  $T_m < T \leq T_N$  когда  $y(T) \ll 1$  в конечном поле  $H_0$  согласно (П21)  $\cos(\vartheta) = 1$  и возрастание параметра магнитного порядка при понижении температуры согласно (6b) влечет за собой возрастание намагниченности  $\sigma(T) = M_0(x)y(T) \cos \vartheta(T)$ . При температурах  $T \leq T_m$ , если возникает выполнение условия (П21)  $\cos \vartheta(T)$  отклоняется от 1 и, согласно расчетам, стремительно уменьшается по величине, что делает очевидным возможность реализации максимума на температурной зависимости  $\sigma(T) = M_0(x)y(T) \cos \vartheta(T)$ .

Основные эффекты воздействия гидростатического давления на образцы системы  $\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{NiGe}$  с разнесенными по температуре магнитными и структурными переходами можно отследить на рис. 5. Наиболее значительным среди них является изменение характера магнитного упорядочения от изоструктурных переходов 2-го рода  $\text{PM}(P_{nma}) - \text{NM}(P_{nma})$  при относительно небольших давлениях к магнитоструктурным переходам 1-го рода  $\text{PM}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{NM}(P_{nma})$  при давлениях порядка 8 kbar и выше.

Механизм барической трансформации магнитного упорядочения обусловлен совмещением температур магнитного и структурного переходов. Это видно из рис. 5, b, на котором сближение и совмещение разнесенных по температуре зависимостей магнитных  $\sigma, y$  и структурных  $Q_0$  характеристик при увеличении давления до 8 kbar приводит к исчезновению плавных магнитных фазовых переходов в пределах ромбической симметрии ( $Q_0 \neq 0$ ) и появлению скачкообразных магнитоструктурных переходов, сопровождающихся изменением симметрии  $\text{PM}(P6_3/mmc - Q_0 = 0) \leftrightarrow \text{NM}(P_{nma} - Q_0 \neq 0)$ . При этом трансформация переходов сопровождается не только появлением температурного гистерезиса, но и характерным скачкообразным изменением однородной магнитоструктурной деформации элементарной ячейки (рис. 6, c, d), что может являться причиной virgin-эффекта, исследованного в [11]. При атмосферном давлении скачкообразное изменение этих величин наблюдается только в области структурного  $\text{PM}$ -перехода, рис. 6, a, b. Этот результат отражает факт суперпозиции магнитной и структурной деформационных вкладов для магнитоструктурных переходов 1-го рода  $\text{PM}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{NM}(P_{nma})$  при  $P = 12 \text{ kbar}$ . Аналогичная суперпозиция энтропийных вкладов наблюдается

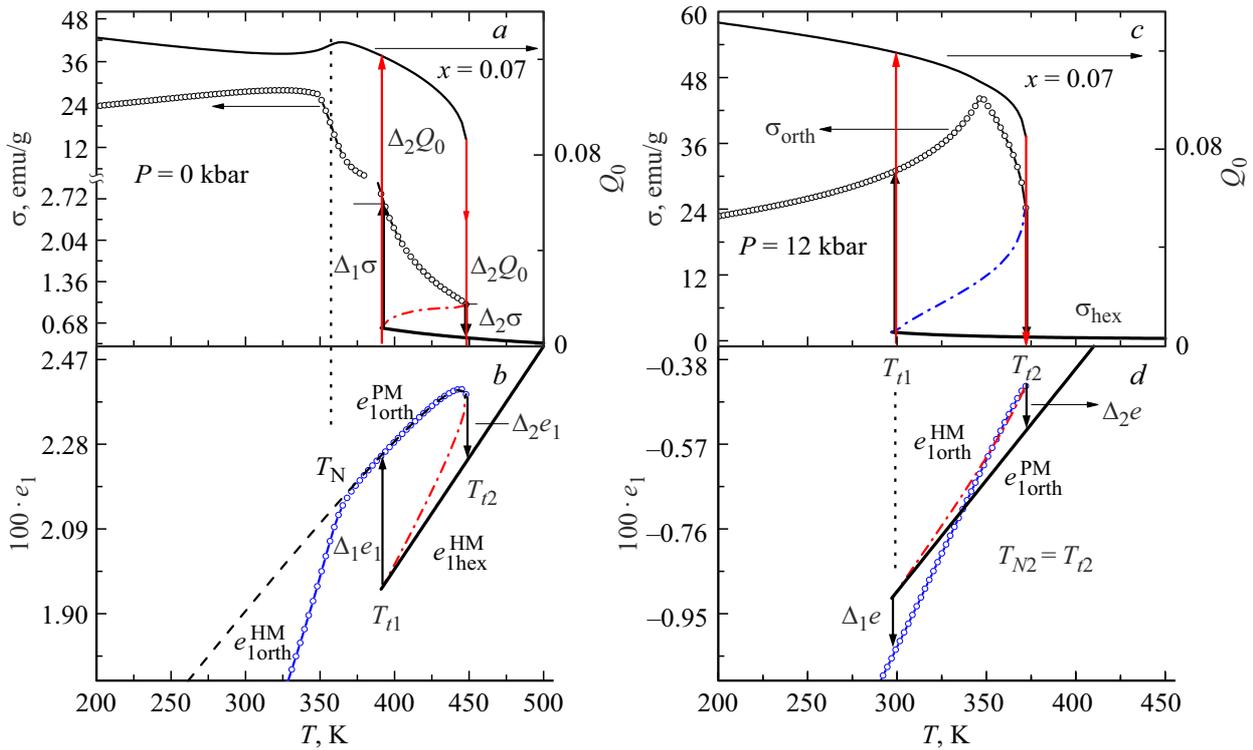


Рис. 6. Изменение магнитоструктурных характеристик при возрастании давления.

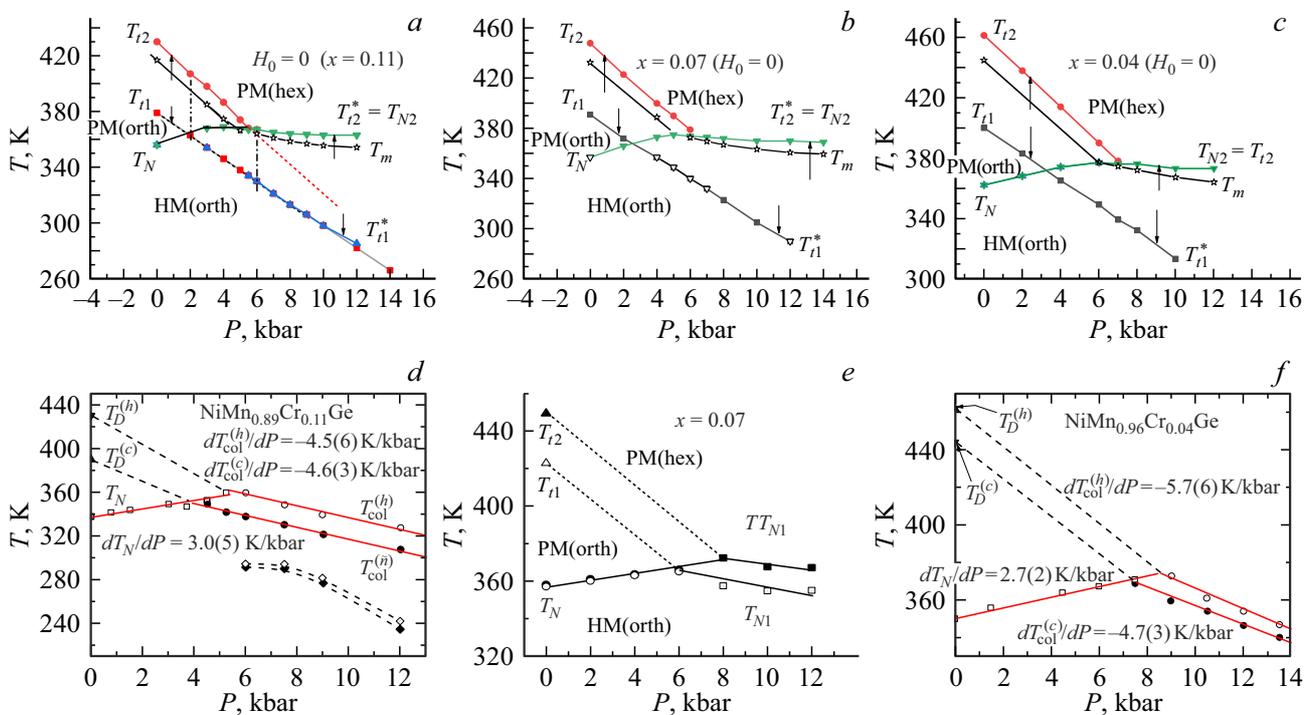


Рис. 7. Сопоставление теоретических (a, b, c) и экспериментальных (d, e, f) [8] P–T-диаграмм сплавов системы  $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ .  $\downarrow, \uparrow$  указывают на температуры лабильности hex( $P6_3/mmc$ ), orth( $Pnma$ ) фаз при понижении, повышении температуры при  $T = T_m$ .  $\Omega(|Q_0| > 0, |y| \geq 0) = \Omega(|Q_0| = 0, |y| = 0)$ .

для магнитокалорического эффекта при расчетах барических эффектов усиления изменения изотермической энтропии  $\Delta IS = S_{\text{1orth}}^{H_0} - S_{\text{1hex}}^0 \gg S_{\text{1orth}}^{H_0} - S_{\text{1orth}}^0$  [12].

Еще одной важной особенностью зависимостей  $\sigma(T)$  сопровождающей увеличение давления является значительное возрастание намагниченности (почти двукратное). Этот эффект можно интерпретировать как уменьшение пространственно-неоднородного вклада в обменное поле, обусловленное барической неустойчивостью ромбической структуры.

Следует также отметить, что вышеуказанные особенности, возникают вследствие барического сближения и совмещения структурных и магнитных переходов. Когда понижение температур структурного перехода происходит при возрастании температуры Нееля магнитного перехода. Как мы отмечали, это может быть следствием конкуренции противоположных тенденций в стабилизации магнитоупорядоченной фазы со стороны спиновой и фононной подсистем. Поэтому представляет значительный интерес анализ сопоставления экспериментальных (рис. 7, *d, e, f*) и расчетных (рис. 7, *a, b, c*) магнитных фазовых Р–Т диаграмм для 3 образцов, исследуемой системы.

Магнитоструктурные переходы 1-го рода из гелимагнитной ромбической фазы в парамагнитную гексагональную фазу  $\text{HM}(P_{nma}) \rightarrow \text{PM}(P6_3/mmc)$  сопровождающиеся, согласно рис. 6, стрикционными явлениями происходят при температуре лабильности  $T = T_{12} \equiv T_{N2}$ . Обратный переход  $\text{PM}(P6_3/mmc) \rightarrow \text{HM}(P_{nma})$ , сопровождающийся, возрастанием объема элементарной ячейки в зависимости от микроструктуры образцов может реализоваться в интервале  $T_{11} \leq T_{N1} \leq T_m$ . Сравнение с экспериментальными Р–Т диаграммами указывает, что реальные Р–Т границы потери устойчивости гексагонального состояния  $T_{11}$  и  $T_{N1}$  ближе к линии  $T_m$ .

## 4. Заключение

В рассматриваемой обменно-структурной модели в приближении идеального однодоменного кристалла на качественном уровне удалось отразить наиболее важные барические особенности наблюдаемых магнитоструктурных и магнитообъемных характеристик, к которым можно отнести следующее.

Барическая трансформация изоструктурных переходов 2-го рода к магнитоструктурным переходам 1-го рода.

Возрастание наведенной магнитным полем намагниченности гелимагнитного состояния при возрастании давления.

Противоположные тенденции стабилизации магнитоупорядоченной фазы в Р–Т области существования переходов 1-го и 2-го рода.

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках бюджетного задания.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Приложение

$$\hat{\mathbf{H}}_s = - \sum_{nk, n'k'} J_{nn'}^{kk'} \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} - 2\mu_0 \mathbf{H}_0 \sum_{nk} \hat{s}_n^k, \quad (\text{P1})$$

$$\hat{\mathbf{H}}_{sQ} = - \sum_{nk, n'k'} L_{nn'}^{kk'} \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} Q_n Q_{n'}, \quad (\text{P2})$$

$$H_Q = \sum_n \left( \frac{1}{2} \omega^2 Q_n^2 + \frac{1}{4} \gamma Q_n^4 + \frac{1}{6} \Gamma Q_n^6 \right) - \frac{1}{2} \sum_{n, n'} V(n, n') Q_n Q_{n'}. \quad (\text{P3})$$

Полный ТП системы  $\Omega$  определяется суперпозицией

$$\Omega = \tilde{\Omega}_s + \tilde{\Omega}_Q + \Omega_e, \quad (\text{P4})$$

$$\tilde{\Omega}_s = \langle \hat{\mathbf{H}}_s - \hat{\mathbf{H}}_{hs} \rangle_h - Nk_B T \ln[z(X)], \quad (\text{P5})$$

$$\tilde{\Omega}_Q = \langle \tilde{H}_Q \rangle_\rho - TS(\rho), \quad (\text{P6})$$

где для ТП упругой подсистемы используется упрощенный вариант

$$\Omega_e = \frac{1}{2} e_1^2 / \kappa_1 + \frac{1}{2} (e_2)^2 / \kappa_2 + Pe_1 - T\alpha e_1 / \kappa_1 \quad [10];$$

$\alpha$ ,  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  — коэффициенты объемного температурного расширения, объемная сжимаемость и упругая постоянная соответственно

$$\hat{\mathbf{H}}_{hs} = - \sum_{nk} h \mathbf{U}_n^k \hat{s}_n^k = - \sum_{nk} h \hat{m}_n^k = N h \hat{m}, \quad (\text{P7})$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_s = - \sum_{nk, n'k'} (J_{nn'}^{kk'} + L_{nn'}^{kk'} \langle Q_n Q_{n'} \rangle_\rho) \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} - 2\mu_0 \mathbf{H}_0 \sum_{nk} \hat{s}_n^k, \quad (\text{P8})$$

где  $\hat{s}_n^k (\hat{s}_{n'}^{k'})$  — операторы спинов  $k (k')$  атомов в  $n (n')$  элементарных гексагональных ячейках;  $|\mathbf{U}_n^k| = 1$ ,  $\hat{m}_n^k = U_n^k \hat{s}_n^k$  — оператор проекции спина на ось квантования,

$$\tilde{H}_Q = \sum_n \left( \frac{1}{2} \omega^2 Q_n^2 + \frac{1}{4} \gamma Q_n^4 + \frac{1}{6} \Gamma Q_n^6 \right) - \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \left( V(n, n') + 2 \sum_{k, k'} L_{nn'}^{kk'} \langle \hat{s}_n^k \hat{s}_{n'}^{k'} \rangle_h \right) Q_n Q_{n'}, \quad (\text{P9})$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Omega}_s + \tilde{\Omega}_Q &= \sum_{nk, n'k'} (J_{nn'}^{kk'} + 2L_{nn'}^{kk'} \langle Q_n Q_{n'} \rangle_\rho) \langle \tilde{s}_n^k \tilde{s}_{n'}^{k'} \rangle_h \\
 &- 2\mu_0 \mathbf{H}_0 \sum_{nk} \langle \tilde{s}_n^k \rangle_h + Nh \langle \hat{m} \rangle_h - Nk_B T \ln[z(X)] \\
 &+ \sum_n \left( \frac{1}{2} \tilde{\omega}^2 \langle Q_n^2 \rangle_\rho + \frac{1}{4} \tilde{\gamma} \langle Q_n^4 \rangle_\rho + \frac{1}{6} \tilde{\Gamma} \langle Q_n^6 \rangle_\rho \right) \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{n, n'} (V(n, n')) \langle Q_n Q_{n'} \rangle_\rho - TS(\rho).
 \end{aligned} \tag{П10}$$

В (П5)–(П10) усреднение в ПСП

$$\langle A(\hat{m}) \rangle_h = Sp A(\hat{m}) e^{\beta h \hat{m}} / z(X);$$

Для усреднения

$$\langle B(Q_n) \rangle_\rho = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{dso}} B(Q_n) dQ_n$$

используется одночастичная плотность вероятности  $\rho_{\text{dso}}(Q_n)$  для смещенного гармонического осциллятора [13].

$$z(X) = Sp e^{\beta h \hat{m}} \equiv \sum_{m_s = -s}^s e^{\beta h m_s}; \quad X = hs/k_B T, \tag{П11}$$

$$y_s = \langle \hat{m} \rangle = Sp \hat{m} e^{\beta h \hat{m}} / z(X), \tag{П12a}$$

$$\rho_{\text{dso}} \equiv \rho_{\text{dso}}(Q_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}}} \exp \left[ -\frac{(Q_n - Q_0)^2}{2\tilde{\sigma}} \right], \tag{П12b}$$

$$\tilde{\sigma} = \langle [Q_n - Q_0]^2 \rangle_\rho; \quad \langle Q_n \rangle_\rho = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{dso}} Q_n dQ_n. \tag{П12c}$$

При этом величины  $Q_0$ ,  $\tilde{\sigma}$  рассматриваются как независимые переменные. Тогда при  $\mathbf{H}_0 \mathbf{U}_n^k = H_0 \cos(\vartheta)$ ;  $\langle \tilde{s}_n^k \rangle_h = \mathbf{U}_n^k \langle \hat{m}_n^k \rangle_h = \mathbf{U}_n^k \langle \hat{m} \rangle_h = \mathbf{U}_n^k y_s$  (П10) может быть приведено к виду

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Omega}_s + \tilde{\Omega}_Q &= -N \langle \hat{m} \rangle_h^2 [\tilde{J}(q_a) \sin^2(\vartheta) + \tilde{J}(0) \cos^2(\vartheta)] \\
 &- N 2\mu_0 H_0 \cos(\vartheta) \langle \hat{m} \rangle_h + N \langle \hat{m} \rangle_h h + U(Q_0, \tilde{\sigma}) - TS(\tilde{\sigma}),
 \end{aligned} \tag{П13a}$$

$$\begin{aligned}
 U(Q_0, \tilde{\sigma}) &= \frac{\omega^2}{2} (Q_0^2 + \tilde{\sigma}) + \frac{\gamma}{4} (Q_0^4 + 6Q_0^2 \tilde{\sigma} + 3\tilde{\sigma}^2) \\
 &+ \frac{\Gamma}{6} (Q_0^6 + 15Q_0^4 \tilde{\sigma} + 45Q_0^2 \tilde{\sigma}^2 + 15\tilde{\sigma}^3) \\
 &- \frac{1}{2} \nu_0 (1 + L_2 e_1 + L_3 e_2) Q_0^2,
 \end{aligned} \tag{П13b}$$

$$\begin{aligned}
 S(\tilde{\sigma}) &= -k_B \sum_n \langle \ln \rho_{\text{dso}}(Q_n) \rangle \\
 &= -k_B N_0 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{dso}}(Q_n) \ln \rho_{\text{dso}}(Q_n) dQ_n \\
 &= \frac{k_B}{2} N_0 \ln \tilde{\sigma} + \text{const},
 \end{aligned} \tag{П13c}$$

$$\omega^2 = N_0 \tilde{\omega}^2, \quad \gamma = N_0 \tilde{\gamma}, \quad \Gamma = N_0 \tilde{\Gamma}, \quad N_0 V_0 = N_0 \sum_{n'} V_{nn'} N_0 V_0$$

$$\equiv N_0 V_0 (e_1, e_2) = \nu_0 (1 + L_2 e_1 + L_3 e_2).$$

$$\tilde{J}(q_a) = \sum_{\Delta \mathbf{R}} \tilde{J}(|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|) \cos(\mathbf{q} \Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'})$$

$$\approx \sum_{i=0}^2 \sum_{\Delta \mathbf{R}_i} \tilde{J}(|\Delta \mathbf{R}_i|) \cos(\mathbf{q} \Delta \mathbf{R}_i)$$

$$= \tilde{J}_0 + \tilde{J}_1 \cos(\Psi) + \tilde{J}_2 \cos(2\Psi), \tag{П14}$$

$$\tilde{J}(|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|) = \tilde{J}_{nn'}^{kk'} = J(|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|) + L(|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|) Q_0^2$$

эффективные интегралы обменного взаимодействия между магнитоактивными атомами на расстоянии  $|\Delta \mathbf{R}_{nn'}^{kk'}|$ ,

$$\Psi = q_a c_{\text{hex}}/2, \quad 2\Psi = q_a c_{\text{hex}},$$

$c_{\text{hex}}$  — параметры гексагональной решетки вдоль оси  $Oz$ .

$$\tilde{J}(0) \equiv \tilde{J}(q_a = 0) \equiv \tilde{J}(\Psi = 0) = \tilde{J}_0 + \tilde{J}_1 + \tilde{J}_2, \tag{П15a}$$

$$\tilde{J}_1 = \sum_{\Delta \mathbf{R}_i} [J(|\Delta \mathbf{R}_i|) + L(|\Delta \mathbf{R}_i|) Q_0^2] = J_i + L_i Q_0^2, \tag{П15b}$$

$\Delta \mathbf{R}_i = [\Delta R_x, \Delta R_y, i c_{\text{hex}}/2]$ ,  $J_i \equiv J_i(Q_0)$ , в приближении ближайших соседей  $\sqrt{\Delta R_x^2 + \Delta R_y^2} \approx a_{\text{hex}}$ .

Из условия минимума  $\tilde{\Omega}_s + \tilde{\Omega}_Q \equiv \tilde{\Omega}$  относительно  $h$  получим

$$h = 2s y [\tilde{J}(q_a) \sin^2(\vartheta) + \tilde{J}(0) \cos^2(\vartheta)] + 2\mu_0 H_0 \cos(\vartheta). \tag{П16}$$

Тогда полный ТП системы  $\Omega = \tilde{\Omega} + \Omega_e$  с учетом (П16) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 \Omega &= a h_m(Q_0, e_1) y^2 - k_B N T \ln z(X) + U(Q_0, \tilde{\sigma}) \\
 &- T \frac{k_B}{2} N_0 \ln \tilde{\sigma} + \Omega_e,
 \end{aligned} \tag{П17}$$

$$h_m = s^2 [\tilde{J}(q_a) \sin^2(\vartheta) + \tilde{J}(0) \cos^2(\vartheta)],$$

$$a = N \tilde{J}(q = Q_0 = e_1 = 0) s^2 = (3/2) s^2 a_3 T_0 / (s + 1),$$

$$a_2 = N_0 k_B = 2(1 - x) a_3, \quad a_3 = N k_B.$$

Равновесные зависимости магнитных, структурных и упругих модельных характеристик можно получить из уравнений

$$\partial J(q_a) / \partial \Psi = 0, \quad \partial \Omega / \partial \vartheta = 0, \quad \partial \Omega / \partial \sigma = 0,$$

$$\partial \Omega / \partial e_1 = 0, \quad \partial \Omega / \partial e_2 = 0, \tag{П18}$$

$$\partial \Omega / \partial y = 0, \quad \partial \Omega / \partial Q_0 = 0. \tag{П19}$$

Первое из уравнений (П18) приводит к условию существования гелимагнитной структуры при  $\mathbf{H}_0 = 0$ . Которое при  $\tilde{J}(Q_0, e_1) = -4\delta \tilde{J}_2(Q_0, e_1) > 0$  и  $\tilde{J}_2(Q_0, e_1) < 0$  имеет вид

$$\cos \Psi = \begin{cases} \delta(Q_0) & \text{при } |\delta(Q_0)| < 1, \\ 1 & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{П20}$$

Конкурирующими состояниями при этом будут только геликоидальное

$$(\cos \Psi = \tilde{J}_1(Q_0, e_1)/4|\tilde{J}_2(Q_0, e_1)| = \delta < 1)$$

с более высоким значением величины  $\tilde{J}(q_a)$

$$(\tilde{J}(q_a) = \tilde{J}_0(Q_0, e_1) + (2\delta^2 + 1)|\tilde{J}_2(Q_0, e_1)|)$$

и ферромагнитное ( $\Psi = 0$ ) с более низким значением величины  $\tilde{J}(0)$

$$(J(0) = \tilde{J}_0(Q_0, e_1) + (4\delta - 1)|\tilde{J}_2(Q_0, e_1)|)$$

поскольку при  $\delta < 1$

$$\Delta\tilde{J}(q_a) \equiv \tilde{J}(q_a) - \tilde{J}(0) = 2(\delta - 1)^2|\tilde{J}_2(Q_0, e_1)| > 0.$$

Второе уравнение (П18) при  $\mathbf{H}_0 = [0, 0, H_0] > 0$  приводит к условию

$$\cos \vartheta = \begin{cases} \frac{2H_0\mu_B}{(J(q_a) - J(0))y} & \text{при } |\delta(Q_0)| < 1 \\ \text{и } 0 < \frac{2H_0\mu_B}{(J(q_a) - J(0))y} < 1, & \text{(П21)} \\ 1 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

При этом, если предположить, что НМ структура ограничивается областью существования ромбической фазы то  $\delta(Q_0)$  можно представить соотношением

$$\delta(Q_0) = 1 - A Q_0^2 + B Q_0^4. \quad (\text{П22})$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  варьируют спонтанные и полевые характеристики НМ структуры.

Равновесные значения дисперсии  $\tilde{\sigma}$  объемных деформаций  $e_1$  и ромбических искажений  $e_2$ , удовлетворяющие последним 3 уравнениям (П18) имеют вид

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(Q_0, T), \quad (\text{П23a})$$

$$e_1 = e_1(Q_0, y, T), \quad (\text{П23b})$$

$$e_2 \equiv e_2(Q_0) = \frac{L_3}{2} Q_0^2 \kappa_2. \quad (\text{П23c})$$

## Список литературы

- [1] J.S. Niziol, A. Zieba, R. Zach, M. Baj, L. Dmowski. JMMM **38**, 205 (1983).
- [2] И.Ф. Грибанов, А.В. Головчан, В.Д. Запорожец, В.И. Каменев, Л.Д. Клищенко, В.В. Коледов, В.И. Митюк, А.П. Сиваченко. ФТВД **28**, 3, 13 (2018).
- [3] Yu.S. Koshkid'ko, E.T. Dilmieva, J. Cwik, K. Rogacki, A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, V.G. Shavrov, V.I. Valkov, A.V. Golovchan, A.P. Sivachenko, S.N. Shevurtalov, V.V. Rodionova, V. Sampath. J. Alloys Compd. **798**, 810 (2019).
- [4] В.И. Вальков, В.И. Каменев, В.И. Митюк, И.Ф. Грибанов, А.В. Головчан, Т.Ю. Деликатная. ФТТ **59**, 266 (2017).
- [5] В.И. Вальков, А.В. Головчан, В.В. Коледов, В.И. Митюк, И.Ф. Грибанов, В.Д. Запорожец, Б.М. Тодрис, Т.С. Сиваченко. ФТВД **29**, 3, 5 (2019).
- [6] В.И. Вальков, В.И. Каменев, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, В.И. Митюк, П. Дуда. ФТТ **63**, 5, 628 (2021).
- [7] B. Pencs, A. Hoserb, S. Barana, A. Szytuła. Phase Transitions **91**, 2, 118 (2018).
- [8] A. Szytuła, S. Baran, T. Jaworska-Goła, M. Marzec, A. Deptuch, Yu. Tyvanchuk, B. Pencs, A. Hoser, A. Sivachenko, V. Val'kov, V. Dyakonov, H. Szymczak. J. Alloys Comp. **726**, 978, (2017).
- [9] Д. Маттис. Теория магнетизма. Мир, М. (1967). 4097 с.
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 245 с.
- [11] И.Ф. Грибанов, В.В. Бурховецкий, В.И. Вальков, А.В. Головчан, В.Д. Запорожец, В.И. Каменев, Т.С. Сиваченко. ФТВД **30**, 1, 83 (2020).
- [12] В.И. Вальков, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, Е.П. Андрейченко, О.Е. Ковалев, В.И. Митюк, А.В. Маширов. В сб.: Дни калорики в Дагестане: функциональные материалы и их приложения. (27–31 мая 2023), Дербент С. 43–454.
- [13] B. Zeks, R. Blinc. Soft modes in ferroelectrics and antiferroelectrics. Series of Monographs on Selected Topics in Solid State Physics. Elsevier, N.Y. (1974). V. 13. 398 p.

Редактор Т.Н. Василевская