01,07

Магнитообъемные эффекты и аномалии теплового расширения при фазовом переходе в киральном ферромагнетике MnSi с топологическими особенностями электронной структуры

© А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына, Э.И. Лопатко

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

E-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Поступила в Редакцию 1 апреля 2024 г.
В окончательной редакции 5 июня 2024 г.
Принята к публикации 5 июня 2024 г.

В рамках теории зонного магнетизма и в модели Хейне для зависимости электронного спектра от объема, исследуются магнитообъемные эффекты. В качестве конкретного примера рассматривается киральный квантовый ферромагнетик MnSi, с топологическими особенностями электронной структуры. Изучены новые механизмы магнитообъемных эффектов, в возникающей при размытом по температуре фазовом переходе флуктуационной фазе. Рассчитанные температурные зависимости объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР), описывают наблюдаемые аномалии и показывают, что исчезновение киральных топологических зарядов, связанных с взаимодействием Дзялошинского–Мория сопровождается сменой знака ОКТР. Рассмотренная флуктуационная фаза, соответствует наблюдаемой при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов.

Ключевые слова: геликоидальный ферромагнетизм, киральность, спиновые флуктуации, электронная структура, тепловое расширение.

DOI: 10.61011/FTT.2024.08.58594.73

1. Введение

В сильно коррелированном зонном ферромагнетике MnSi с кубической нецентросимметричной кристаллической структурой без центра инверсии (типа B20), возникает спин-орбитальное антисимметричное взаимодействие Дзялошинского–Мории (ДМ). В области ферромагнитного дальнего порядка при нейтронографических исследованиях (см., например [1,2]) наблюдается закручивание магнитных моментов $M_{\boldsymbol{\nu}}$ на узлах $\boldsymbol{\nu}$ в так называемые спиновые спирали (рис. 1) с магнитными моментами [3,4]:

$$M_{\nu}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu}), \;\; M_{\nu}^{(y)} = \pm M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu}), \qquad (1)$$

и волновым вектором $\mathbf{q}_0$ направленным вдоль оси z, связанным с магнитным периодом $\lambda = \pi/|\mathbf{q}_0|$. В работе Янсена и Бака [5] было показано, что причиной возникновения спиновых спиралей является конкуренция симметричного неоднородного обменного взаимодействия, и антисимметричного взаимодействия Дзялошинского–Мория.

Ab initio расчеты основного состояния дают заметные расхождения по величине магнитного момента, полученного на эксперименте и вычисленного *ab initio* в случае MnSi [6]. Ликвидировать эту трудность удалось в работе [7], где было показано, что указанное расхождение связано с аномально большими нулевыми флуктуациями в основном состоянии MnSi. При этом оказалось, что имеет место кроссовер магнитного фазового перехода первого рода, сопровождаемый изменением знака параметра межмодового взаимодействия в функционале Гинзбурга–Ландау, и квантового перехода, приводящего к подавлению спиновых нулевых флуктуаций. В работе [7] были получены выражения для среднеквадратических амплитуд нулевых и термодинамических спиновых флуктуаций, которые определялись из флуктуационно-диссипативной теоремы.

Нейтронографические исследования привели к выводу о неприменимости (1) к описанию флуктуационной фазы („катастрофа" решений Янсена–Бака). В работах [3,4] было показано, что вихревые спиновые микроструктуры есть топологически защищенные фрагменты лево киральных спиновых спиралей [1,2]:

$$M_{\nu}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi), \;\; M_{\nu}^{(y)} = -M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi), \quad (2)$$

а также спиралей с флуктуациями киральностей [8]:

$$M_{\nu}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi), \;\; M_{\nu}^{(y)} = \pm M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi). \quad (3)$$

Фрагменты спиновых спиралей возникают в областях спиновых корреляций с фиксированными фазами Берри [3,4]. Протектораты Берри на поверхности Ферми MnSi были найдены в работе [9].

Магнитные вклады в теплофизические свойства при фазовых переходах в зонных магнетиках неоднократно рассматривались в рамках спин-флуктуационной теории, описанной в [10]. Однако термодинамическая модель не дает однозначного объяснения наблюдаемой сложной

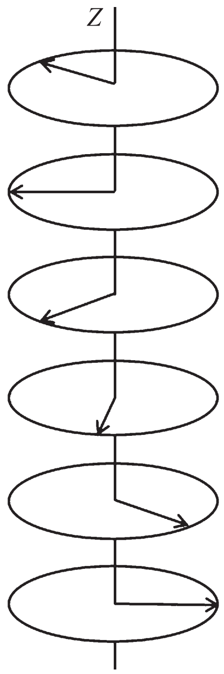

Рис. 1. Плоская геликоидальная спираль.

картины, поскольку до сих пор не учитывалось, что рассматриваемый фазовый переход, должен сопровождаться объемными эффектами. В работе [11] было показано, что в MnSi должен иметь имеет место „срыв" перехода второго рода, на переход первого рода из-за взаимодействия спиновых и решеточных степеней свободы. В частности, на это указывает наблюдаемое на эксперименте (см., например [12]) размытие лямбда-подобной аномалии температурных зависимостей теплоемкости и коэффициента теплового расширения вблизи температуры Кюри.

В настоящей работе ранее сформулированная модель кроссовера квантового и термодинамического фазового перехода первого рода в MnSi [3,4,7], дополняется учетом взаимозависимости локальной намагниченности и объема, приводящей к магнитообъемным эффектам. Полученные результаты указывают на наличие скрытого топологического электронного перехода (ТЭП) в основном состоянии MnSi, который возникает вследствие подавления нулевых спиновых флуктуаций при переходе во флуктуационную фазу. Рассмотрен наблюдаемый на эксперименте аномальный магнитный вклад в объемный коэффициент теплового расширения.

2. Модель

Рассмотрим электронную структуру основного состояния зонного ферромагнетика MnSi, с учетом зависимости энергетического спектра сильно коррелированных d-электронов $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ от объема элементарной ячейки V, которую будем описывать в соответствии с известной формулой Хейне [13]:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}(V) = \theta^{-1}\varepsilon_{\mathbf{k}}(V_0),\ \ \theta\big(\equiv \theta(V)\big) = (V/V_0)^{5/3},$$

где $V_0 = 95.01\,\text{Å}^3$ — объем ячейки в основном состоянии.

Для учета кулоновских корреляций в системе d-электронов воспользуемся гамильтонианом Хаббарда, дополненным учетом кирального ДМ-взаимодействия. Используя связь операторов спиновой $(\mathbf{S}_\nu)$ и зарядовой (n_ν) плотности на узле $\boldsymbol{\nu}$, с операторами вторичного квантования d-электронов $(a^+_{\mathbf{k},\sigma}, a_{\mathbf{k},\sigma})$ в состоянии с квазиимпульсом и спином, следуя за [3,4] гамильтониан системы представим в виде

$$H = H_0 - U\sum_{\boldsymbol{\nu}}(S_\nu^2 - n_\nu^2/4) + \sum_{\boldsymbol{\nu},\nu'}\mathbf{d}[\mathbf{S}_\nu \times \mathbf{S}_{\nu'}], \qquad (4)$$

где

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k}}(V)a^+_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} - \qquad (5)$$

слагаемое зонного движения электронов, U — константа хаббардовского взаимодействий, d — параметр ДМ-взаимодействия, для которого в силу его релятивистской малости, введем среднее поле на узле $\boldsymbol{\nu}$:

$$\mathbf{h}_\nu^{(D)} = \sum_{\nu'}\big[d_{\nu,\nu'}\langle\mathbf{S}_{\nu'}\rangle\big]. \qquad (6)$$

Статистическую сумму системы сильно коррелированных электронов опишем, применяя мацубаровскую технику для комплексных переменных [14]:

$$Z = \operatorname{Sp} T_\tau\left\{-\int_0^{T^{-1}} d\tau H(\tau)\right\},$$

$$H(\tau) = \exp(H_0\tau)H\exp(-H_0\tau).$$

Флуктуационную картину фазового перехода, рассмотрим используя при записи статистической суммы преобразования Стратоновича–Хаббарда [10]:

$$\exp(-|A|^2) = \int d\zeta\,\exp(-|\zeta|^2 + A\zeta),$$

где

$$(\zeta = \xi,\ \eta,\ A = \mathbf{S}_\nu, n_\nu),$$

которые позволяют свести возникающую при учете квадратичных по операторам $(\mathbf{S}_\nu)$ и зарядовой (n_ν) плотности слагаемых гамильтониана (4), проблему многих тел, к рассмотрению движения электронов во флуктуирующих в пространстве и времени обменных и зарядовых ξ и η-полях

$$Z(\xi,\eta) = Z_0\left\{\int (d\xi d\eta)\exp\big(-\Phi(\xi,\eta)\big)\right\}, \qquad (7)$$

здесь $Z_0 = Z(0,0)$ — статистическая сумма зонного движения d-электронов с гамильтонианом H_0,

$$(d\eta d\xi) = d\xi_0 d\eta_0 \Bigg[\prod_{q\neq 0,\, j} d\xi_q^{(j)} d\eta_q^{(j)}\Bigg];$$

T — температура в энергетических единицах; $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$, $\mathbf{q}$ — квазиимпульс; ω_{2n} и ω_{2n+1} — мацубаровские Бозе и Ферми частоты.

При этом, можно показать, что функционал свободной энергии электронов, движущихся во флуктуирующих полях

$$\Phi(\xi, \eta) = \Phi_0(\xi, \eta) + \Delta\Phi, \tag{8}$$

в соответствии с [10] состоит из слагаемого, описываемого в приближении однородных локальных полей

$$\Phi_0(\boldsymbol{\xi}, \eta) = \int_0^\beta d\tau \sum_{\boldsymbol{\nu}\,\alpha(=\pm 1)} \int g_0(\varepsilon) \ln\Big(1 + \exp T^{-1} \times \big(\mu - \varepsilon + \alpha c|\boldsymbol{\xi}_\nu(\tau)| + ic\tilde{\eta}_\nu(\tau)\big)\Big) d\varepsilon,$$

и поправок к вершинным частям второго порядка ряда по ξ, определяющих аномальную зависимость от квазиимпульса и частоты, при магнитном фазовом переходе фактора Стонера ($D_0(q, V, T)$):

$$\Delta\Phi = -T \ln \int_{-\infty}^{\infty} (d\boldsymbol{\xi}, d\eta) \times \exp\Big(-\sum_q \big(X_q|\eta_q|^2 + X_q|\boldsymbol{\xi}_q - c^{-1}\mathbf{h}_q|^2\big)\Big),$$

здесь $\mathbf{h}_\mathbf{q}^{(\gamma)} = (\mathbf{h}\delta_{q,0} + \mathbf{h}_\mathbf{q}^{(D)})\delta_{q,\mathbf{q}}$, $\mathbf{h}$ — однородное внешнее магнитное поле,

$$D_0(q, V, T) = \big(1 - U\chi_q^{(0)}(q, V, T)\big)^{-1},$$

$$\chi_q^{(0)}(q, V, T) = \sum \Bigg(\frac{f\big(\varepsilon_k(V) - \mu\big) - f\big(\varepsilon_{k+q}(V) - \mu\big)}{\big(\varepsilon_k(V) - \varepsilon_{k+q}(V)\big)}\Bigg),$$

μ — химический потенциал.

Для согласованного описания изменений состояния спиновой системы и изменения объема учтем известное соотношение между статистической суммой и свободной энергией ($F = T\ln Z - \mu N$). При этом свободную энергию системы сильно коррелированных электронов, дополним слагаемым, связанным с энергией упругой деформации кристаллической решетки с параметром изотермической сжимаемости K и запишем в виде

$$F = T \ln Z(\xi, \eta) - \mu T + K(\Delta V)^2/2, \tag{9}$$

где $\Delta V = V - V_0$.

3. Магнитное состояние и магнитообъемные эффекты

Рассмотрим условия минимумов свободной энергии (9) с учетом связи равновесных значений спиновых и зарядовых переменных, модуля волнового вектора спиновой структуры с объемом. При этом будем использовать условия седловой точки по переменным флуктуирующих полей

$$\xi_q^{(\gamma)} = r_q^{(\gamma)} \exp(\phi_{q,\gamma}),$$

$$r_q^{(\gamma)} = |\xi_q^{(\gamma)}| \text{ и } \xi_\mathbf{q}^{(\gamma)} = |\xi_\mathbf{q}^{(\gamma)}| \exp(\phi_{\mathbf{q},\gamma}),\ (\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0),$$

связанных с локальными намагниченностями и парными спиновыми корреляторами известными соотношениями [14],

$$M_\mathbf{q}^{(\gamma)} = (U^{-1})\xi_\mathbf{q}^{(\gamma)} - h_\mathbf{q}^{(\gamma)},\ |\xi_q^{(\gamma)}|^2 = 2^{-1}\Big(\langle T_\tau |S_q^{(\gamma)}|^2\rangle + 1\Big),$$

γ — индекс пространственных координатных осей.

Из условий минимумов получаем уравнение состояния, состоящее из уравнения для проекций намагниченностей на оси системы координат

$$M_q^{(\gamma)}\Big(D^{-1} + \kappa\big(M_S^2 + \langle m^2\rangle/3\big) + X(\mathbf{q}, 0)\Big) = 2\mathbf{h}_\mathbf{q}^{(\gamma)}/U, \tag{10a}$$

и уравнения для объема

$$\omega = \Delta V(T)/V_0 = K^{-1}U^{-1}\big(\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}^2 + (2U)^{-1}\langle\delta M^2\rangle + \langle m^2\rangle\big). \tag{10b}$$

В полученных уравнениях фигурирует фактор обменного усиления

$$D = D(V, T) = \big(1 - U\theta\chi^{(\perp)} + 3^{-1}\theta\kappa\langle m^2\rangle\big)^{-1}, \tag{10c}$$

параметр межмодовой связи

$$\kappa = \kappa(V, T) = U\langle m^2\rangle^{-2}(\chi^{(\perp)} - \chi^{(\parallel)}), \tag{10d}$$

средний квадрат локальной намагниченности

$$M_S = \langle\delta M\rangle^{1/2},\ \langle\delta M^2\rangle = \sum_q |\mathbf{M}_\mathbf{q}|^2,$$

и среднеквадратичная амплитуда термодинамических нулевых и тепловых спиновых флуктуаций

$$\langle m^2\rangle = \langle m^2\rangle_0 + \langle m^2\rangle_T = (4\pi U)^{-1} \times \sum_{q\gamma} \int_0^\infty \big(1/2 + f_B(\omega/T)\big)\,\mathrm{Im}\big(D^{-1} + 2\kappa|M_{\mathbf{q}_0}^{(\gamma)}| + X_q\big)^{-1} d\omega, \tag{11}$$

где слагаемое с функцией Бозе–Эйнштейна соответствует тепловым флуктуациям, а слагаемое с „1/2“-нулевым.

При этом в (10d) входят поперечная и продольная восприимчивости, соответственно равные

$$\chi^{(\perp)} = \lim_{q\to 0} \sum \Big(f\left(\varepsilon_k(V) - \mu\right) - f\left(\varepsilon_{k+q}(V) - \mu\right) / \left(\varepsilon_k(V) - \varepsilon_{k+q}(V)\right) \Big),$$

$$\chi^{(\parallel)} = \lim_{q\to 0} \sum f\left(\varepsilon_k(V) - \mu\right) - f\left(\varepsilon_{k+q}(V) - \mu\right) / \left(\varepsilon_k(V) - \varepsilon_{k+q}(V)\right).$$

Решая уравнение состояния (10a), видим что в рассматриваемой системе локальная намагниченность и магнитообъемный эффект (ΔV) возникают не только для геликоидальных спиралей (1) с волновым вектором $|\mathbf{q}_0| = d/U^2 g(\theta, \mu)$ (область дальнего порядка), но также во флуктуационной фазе с фрагментами спиновых спиралей (2), (3).

1. При отрицательных значениях фактора обменного усиления (10c) и положительном параметре межмодового взаимодействия (10d), в рассматриваемой системе возникает дальний порядок с киральными ферромагнитными спиралями, приводящий при $T < T_c$ (-температура Кюри) и в интервале $V < V_c (= V(T_c))$, к относительному изменению объема

$$\omega_1 = (V_c - V_0)/V_0 \approx K^{-1} U^{-1} [M_S^2 + \langle m^2 \rangle], \qquad (12)$$

где квадрат локальной намагниченности

$$M_S^2 = M_S^2(V, T) = (2\kappa)^{-1} \Big(\left(D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0)\right)^2 - \left(d|\mathbf{q}_0|/U\right)^2 \Big)^{1/2}.$$

2. При смене знака параметра межмодового взаимодействия, ферромагнетизм теряет устойчивость, возникает спиновый ближний порядок, с парными спин-спиновыми корреляторами $\langle \mathbf{S}_\nu, \mathbf{S}_\mu \rangle \sim \exp(|\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\mu}|/R_c)$, радиус которых в соответствии с теорией фазовых переходов есть $R_c = \left(Ug(\mu, V)A\right)^{1/2} |D|^{-1/2}$, причем параметр A характеризует неоднородность функции Линдхарда ($\chi_0(q) = \chi_0 + Aq^2$).

В пределах пространственных областей спиновых корреляций возникают фрагменты спиновых спиралей (2), (3) с фиксированными фазами Берри (ϕ) [3,4]

При этом следует различать левокиральный ферромагнитный ближний порядок с $D < 0$, и возникающую при $T_c < T < T_{extS}$ в интервале объемов от V_c до V_s ($= V(T_S)$), а также область смешанной (правой и левой) киральности спиралей с $D > 0$ [3,4].

2a) В области кирального ферромагнитного ближнего порядка получаем решения для левокиральных спиралей (2), которое приводит к относительному изменению объема

$$\omega_2 = (V_s - V_c)/V_0 \approx K^{-1} U^{-1} [M_s^2 + \langle m^2 \rangle]. \qquad (13)$$

2b) В области смешанной киральности (3), возникающей вследствие смены знака D, при $T_S < T < T_{\mathrm{DM}}$ в интервале от V_S до V_{DM} $(= V(T_{\mathrm{DM}}))$, имеем

$$\omega_3 = (V_{\mathrm{DM}} - V_s)/V_0 \approx K^{-1} U^{-1} [M_s^2 + \langle m^2 \rangle_T]. \qquad (14)$$

Здесь значения T_{DM} и V_{DM} соответствуют верхней границе фазы кирального спинового ближнего порядка.

Для всей рассмотренной флуктуационной фазы, так же как в [3] можно показать, что во внешнем магнитном поле с намагниченностью $M_0^{(z)}$ возникают не нулевые значения тройных спиновых корреляторов, трактуемых как киральные топологические заряды

$$\chi_c = \sum_{\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2, \boldsymbol{\nu}_3} \langle \mathbf{S}_{\boldsymbol{\nu}_1} [\mathbf{S}_{\boldsymbol{\nu}_2} \times \mathbf{S}_{\boldsymbol{\nu}_3}] \rangle = \pm 2 M_0^{(z)} M_S^2 (|\mathbf{q}_0| R_c)^{-1} \sin^2(|\mathbf{q}_0| R_c).$$

При этом для области с флуктуациями левокиральных спиралей нужно поставить знак „–“, а в области смешанной киральности возникают топологические заряды обеих знаков „+“.

Возникновение топологических зарядов означает сохранение эффектов спиновой киральности во флуктуационной фазе, и дает прямое указание на ТЭП, который в основном состоянии фазы спинового ближнего порядка можно связать только с изменениями объема (магнитообъемные эффекты).

При этом химический потенциал μ и энергия Ферми (равная μ при $T = 0$), определяются условиями электронейтральности для чисел $s(p)$- и d-электронов, (записанном с учетом условий седловой точки по зарядовой переменной η_0):

$$N_e = N_S + \sum_{\alpha = \pm 1} \int d\varepsilon\, f(\varepsilon - \mu + \alpha U m) g(\varepsilon, V). \qquad (15)$$

Здесь N_e — общее число электронов, N_S — число s-электронов, $f(\varepsilon)$ — функция Ферми–Дирака, $m = (\langle m \rangle_0^2 + M_s^2 + \langle m^2 \rangle_T)^{1/2}$.

4. Модель электронной структуры

При численном анализе основного состояния с учетом условия электронейтральности (15), рассмотрим плотность электронных состояний, найденную ранее в [4], с использованием GGA + U приближения в программном пакете Elk (http://elk.sourceforge.net).

Плотность электронных состояний из [4] приведена на рис. 2, где дополнительно показаны энергетические сдвиги энергии Ферми, связанные с изменениями объема (см. ниже раздел 5). Численный анализ, с учетом DOS, найденной в [4], показывает, что вследствие изменения объема, в основном состоянии флуктуационной фазы уровень Ферми оказывается в области кривизны Берри [9], причем параметр межмодовой связи в этой области оказывается отрицательным.

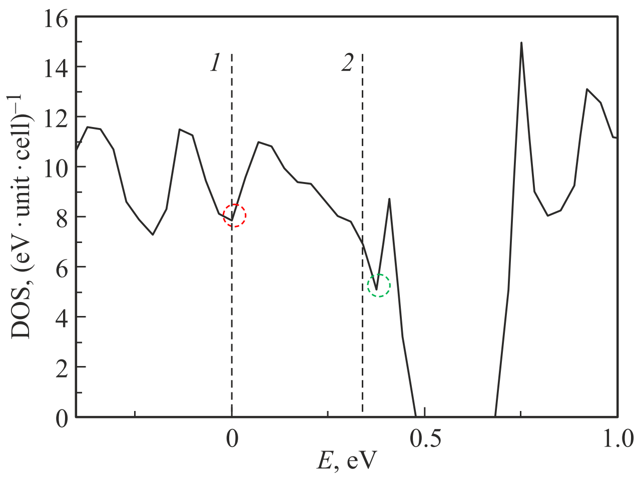

Рис. 2. Фрагмент плотности электронных d-состояний MnSi, рассчитанной в [4] в GGA + U — приближении: *1* — положение уровня Ферми в основном состоянии с нулевыми спиновыми флуктуациями; *2* — положение уровня Ферми в основном состоянии флуктуационной фазы.

При температурном сдвиге химического потенциала с учетом условия электронейтральности (15), определяются границы областей дальнего порядка с геликоидальными спиновыми спиралями, а также областей флуктуационной фазы. Парамагнитная фаза, в которой локальная намагниченность M_S^2 исчезает, получается при сдвиге уровня химического потенциала за пределы области с отрицательной межмодовой связью.

5. Магнитный вклад в тепловое расширение

При сопоставлении рассмотренных магнитных и объемных эффектов с экспериментом проанализируем наблюдаемые температурные зависимости ОКТР, которые дают не только дополнительные, но и наиболее точные способы экспериментального определения температур и объемов.

Температурная зависимость объемного коэффициента теплового расширения, определялась через производную по температуре от относительного изменения объема (10b):

$$\beta = \partial\omega/\partial T.$$

При этом наряду с магнитным вкладом в ОКТР (β_{mag}), оценивались не магнитные: фононная (β_{oph}) [15] и электронная (β_{oel}) составляющие

$$\beta = \partial\omega/\partial T = \beta_{\text{oel}} + \beta_{\text{oph}} + \beta_{\text{mag}}. \quad (16)$$

Оценки фононной составляющей ($\beta_{\text{oph}} \sim (T/T_{\text{D}})^3$, где Дебая $T_{\text{D}} = 450\,\text{K}$) и вклада связанного с электронными фермиевскими возбуждениями ($\beta_{\text{oel}} \sim (T/T_{\text{F}})$, где температура Ферми $T_{\text{F}} \sim 10^4\,\text{K}$) показывают, что в рассматриваемой области температур фазового магнитного перехода ($T < T_{\text{DM}} = 32\,\text{K}$) они оказываются пренебрежимо малыми $\beta(T) \approx \beta_{\text{mag}}(T)$.

Магнитный вклад в ОКТР, был найден численно, путем решения уравнений, вытекающих из условий седловой точки. Причем при вычислении амплитуд спиновых флуктуаций (11), использовалось приближение эффективной массы для функции Линдхарда

$$X(\mathbf{q}, \omega) = U\big(\chi^{(0)}(0,0) - \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)\big)$$
$$= \big(A\mathbf{q}^2 - iB\omega\theta(\omega_0 - \omega)/|\mathbf{q}|\big),$$

где параметры функции Линдхарда $A = 0.07$, $B = \pi/2.45$ заимствованы из [3,4], где они были определены из сопоставления результатов расчетов магнитной восприимчивости с экспериментом, с использованием в качестве параметра экспериментальных значений температуры T_c.

Полученная численно температурная зависимость магнитного вклада в ОКТР приведена на рис. 3. Из проведенных расчетов магнитной составляющей ОКТР видно, что возникновение флуктуационной фазы сопровождается подавлением нулевых спиновых флуктуаций при температуре Кюри (T_c) [7]. Это приводит к аномалии β_{mag} вблизи T_c, причем во флуктуационной фазе с фрагментами спиралей (2) в чрезвычайно узком интервале от $T_c = 28.74$ до $T_{\text{S}} = 29.1\,\text{K}$, имеет место резкое возрастание $\beta_{\text{mag}}(T)$, связанное с изменением объема (13). При $T_{\text{S}} < T < T_{\text{DM}}$ ($T_{\text{DM}} = 32\,\text{K}$) в области смешанной спиновой киральности ((3), (14)), на участке слабой температурной зависимости M_S^2 возникает своеобразное „плечо“. При переходе в парамагнитную фазу, согласно уравнению магнитного состояния (10а) реализуется приближенная квадратическая зависимость

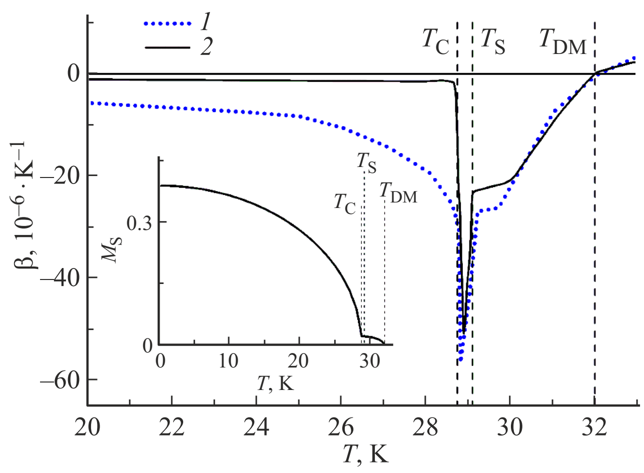

Рис. 3. Температурная зависимость объемного коэффициента теплового расширения MnSi: *1* — экспериментальные данные [12], *2* — расчет магнитного вклада в настоящей работе. На вставке: температурная зависимость локальной намагниченности MnSi.

локальной намагниченности

$$M_S^2 \approx M_S^2(T_S)\big(1 - (T/T_{DM})^2\big),$$

и при T_{DM} получаем смену знака отрицательного ОКТР на положительный.

При этом интегрируя вытекающую из рассмотренной модели зависимость $\beta(T)$ получаем, что в диапазоне температур фазы дальнего порядка $T < T_c$ $\omega_1 \approx 2.2 \cdot 10^{-5}$; $T_c < T < T_S$, $\omega_2 \approx 1.4 \cdot 10^{-5}$, а в области при $T_S < T < T_{DM}$ $\omega_3 \approx 3.4 \cdot 10^{-5}$.

6. Заключение

Таким образом в сильно коррелированном киральном ферромагнетике MnSi, с кристаллической структурой без центра инверсии имеет место взаимозависимое изменение намагниченности и объема. Это приводит к картине кирального спинового ближнего порядка во флуктуационной фазе, которая согласуется с результатами экспериментов по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов [1,2,8] и наблюдаемыми аномалиями ОКТР.

Во флуктуационной фазе возникают особенности температурной зависимости ОКТР, приводящие к лямбдаподобной аномалии, „плечу“ на зависимости отрицательного $\beta_{mag}(T)$, и к смене его знака, при сдвиге химического потенциала за пределы области с отрицательной межмодовой связью.

Очевидно, что аналогичные причины приводят и к наблюдаемой лямбда-подобной аномалии, и „плечу“ на температурной зависимости теплоемкости при постоянном давлении [11], которая отличается от теплоемкости при постоянном объеме на поправку пропорциональную β.

Рассмотренные здесь на примере прототипа спинтронных топологических материалов MnSi фазовые переходы, также возможны в легированных вейлевских полуметаллах (например, на основе CoSi [16]), в которых скирмионо-подобные микроструктуры наблюдаются в области комнатных температур.

Финансирование работы

Результаты получены в рамках задания Министерства науки и высшего образования, контракт № FEUZ-2023-0015.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Boni, C. Pfleiderer. Phys. Rev. B **87**, 134407 (2013).
[2] A. Bauer, M. Garst, C. Pfleiderer. Phys. Rev. B **93**, 235144 (2016).
[3] A.A. Povzner, A.G. Volkov, M.A. Chernikova, T.A. Nogovitsyna. Solid State Commun. **371**, 115279 (2023).
[4] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, М.А. Черникова. ФТТ **65**, *12*, 2243 (2023).
[5] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L1881 (1980).
[6] R.D. Collyer, D.A. Browne. Physica B **403**, 1420 (2008).
[7] A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.A. Nogovitsyna. Physica B: Condens. Matter **536**, *1*, 408 (2018).
[8] C. Pappas, E. Leliévre-Berna, P. Falus, P.M. Bentley, E. Moskvin, S. Grigoriev, P. Fouquet, B. Farago, Phys. Rev. Lett. **102**, 197202 (2009).
[9] M.A. Wilde, M. Dodenhöft, A. Niedermayr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Schnyder, C. Pfleiderer. Nature **594**, 374, (2021).
[10] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
[11] S.A. Pikin. JETP Lett. **106**, *12*, 793 (2017).
[12] S.M. Stishov, A.E. Petrova, S. Khasanov, G.Kh. Panova, A.A. Shikov, J.C. Lashley, D. Wu, T.A. Lograsso. Phys. Rev. B **76**, 052405 (2007).
[13] V. Heine. Phys. Rev. **153**, 673 (1967).
[14] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М. (1962). 444 с.
[15] A.N. Filanovich, A.A. Povzner. Rus. Phys. J. **60**, *10*, 1769 (2018).
[16] B. Balasubramanian, P. Manchanda, R. Pahari, Z. Chen, W. Zhang, S.R. Valloppilly, X. Li, A. Sarella, L. Yue, A. Ullah, P. Dev, D.A. Muller, R. Skomski, G.C. Hadjipanayis, D.J. Sellmyer. Phys. Rev. Lett. **124**, 057201 (2020).

Редактор Ю.Э. Китаев