

01,03

## Решеточный ангармонизм и тепловые свойства сильно коррелированных сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

© А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына, А.Н. Филанович

Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,  
Екатеринбург, Россия

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

(Поступила в Редакцию 4 апреля 2015 г.)

В рамках самосогласованной термодинамической модели, учитывающей влияние решеточного ангармонизма, выполнен расчет температурных зависимостей тепловых и упругих свойств сильно коррелированных металлических сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$ ) с различной атомной киральностью. С использованием экспериментальных данных определены решеточные вклады в теплоемкость и коэффициент теплового расширения исследуемых сплавов. Показано, что инварный эффект в тепловом расширении решетки, наблюдаемый в магнитоупорядоченной области  $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$  и  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ , не связан с решеточным ангармонизмом, хотя его возникновение коррелирует с изменением атомной киральности.

Результаты были получены в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, контракт 3.1236.2014/К.

### 1. Введение

Сильно коррелированный моносилицид железа и его сплавы с моносилицидами кобальта и марганца, представляют значительный интерес для создания прототипов новых спинтронных материалов [1]. Кристаллическая структура сильно коррелированного изолятора  $\text{FeSi}$  и сильно коррелированных металлических сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  относится к структурному типу B20 с пространственной группой  $R\bar{2}_13$ , для которой характерно отсутствие центра инверсии [2]. Такая симметрия обуславливает возникновение в сплавах  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  антисимметричного релятивистского обмена Дзялошинского–Мория, приводящего к формированию в рассматриваемой сильно коррелированной электронной системе длиннопериодической геликоидальной спиновой спирали с аномально большими магнитными периодами (порядка 100–1000 Å) [3]. Направление закручивания спиновой спирали зависит как от атомной структуры, так и от сложных пока не выясненных особенностей электронной структуры, определяющих спиновую киральность и знак взаимодействия Дзялошинского–Мория [2].

Важной особенностью атомной структуры твердых растворов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  является то, что с возрастанием концентрации кобальта происходит изменение кристаллографических позиций атомов с  $x$  (где  $x$  — координата в единицах параметра решетки) на  $(1-x)$  (см. [4]). Такая замена ряда позиций атомов металла атомами кремния и наоборот трактуется как изменение атомной киральности от правовращающейся при  $x < 0.2$  к левовращающейся при  $x \geq 0.2$  [4]. Сплавы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  демонстрируют необычные тепловые свойства, такие как отрицательные значения коэффициента теплового расширения в температурном интервале магнитного упорядочения. В то же время нейтронографические и

синхротронные исследования фононных мод сильно коррелированных моносилицидов железа и кобальта ( $\text{FeSi}$ ,  $\text{CoSi}$  и  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ ) указывают на заметный и достаточно сильно изменяющийся с температурой и химическим составом решеточный ангармонизм, природа которого также является предметом дискуссий [5–7].

Анализ экспериментальных данных о тепловых и упругих свойствах  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  [8,9] ранее осуществлялся лишь в рамках простой модели Дебая–Грюнаизена. Поэтому достоверной информации о возможном влиянии на эти свойства решеточного ангармонизма и необычных электронной и магнитной подсистем рассматриваемых сплавов [10–12] до сих пор нет. В связи с этим, в настоящей работе развивается самосогласованная термодинамическая модель решеточных свойств сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ , в рамках которой учитывается и рассматривается решеточный ангармонизм. На основе этой модели определены вклады в теплоемкость и коэффициент теплового расширения, которые могут быть связаны с электронной и магнитной подсистемами и с их взаимодействием с кристаллической решеткой, для сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  с  $x = 0.1$  (правовращающаяся киральность) и  $x = 0.3, 0.5$  (левовращающаяся киральность).

### 2. Описание модели

Самосогласованная термодинамическая модель является обобщением традиционной модели Дебая–Грюнаизена и была ранее использована для расчета тепловых и упругих свойств сильно коррелированного  $\text{FeSi}$  [7]. Так как в настоящей работе рассматриваются сплавы, необходимо выполнить обобщение модели. Сплавы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  являются тройными, однако подход, представленный в [7,13] для сплавов бинарных, может быть распространен на случай и этих сплавов, поскольку в си-

лу малого отличия в атомных массах железа и кобальта, сплавы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  можно считать квазибинарными.

Очевидно, что спектр колебаний решетки сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$ ), как и любого вещества, состоящего из атомов различной массы, содержит три акустические и  $3n - 3$  оптические моды, где  $n$  — число атомов в элементарной ячейке. Однако в случае оптических ветвей возникают трудности с определением зависимости их характеристик от объема и температуры кристалла. Поэтому в работе [13] для расчета термодинамических свойств бинарного  $\text{CoSi}$  рассматривались „эффективные“ дебаевские моды, образующие плотность фоновых состояний, которая хотя и является приближенной, однако позволяет описать термодинамический потенциал и свободную энергию сплава.

Таким образом, решеточный термодинамический потенциал (ТДП) записывается в виде  $\Phi = \Phi_0 + \Phi_{ph}$ , где  $\Phi_0 = \Phi_0(P)$  — „постоянная“ часть ТДП, которая не зависит от температуры и является функцией давления, а  $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta(P), T)$  — молярная решеточная (фононная) часть ТДП, отражающая вклад акустических колебаний кристаллической решетки твердого тела

$$\Phi_{ph} = 3nR \left( \frac{3}{8} \theta + T \phi(z) \right). \quad (1)$$

Здесь  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $z = \theta/T$  — обратная приведенная температура,  $\phi(z) = \ln(1 - e^{-z}) - D(z)/3$  ( $D(z)$  — стандартная табулированная функция Дебая), а  $\theta$  — температура Дебая, которая выражается через молярный объем  $V$  и модуль всестороннего сжатия  $B$

$$\theta = \frac{\hbar}{k_B} (6\pi^2 n N_A)^{1/3} \sqrt{\frac{3}{n\mu'}} \Xi^{1/2} B^{1/2} V^{1/6}, \quad (2)$$

где  $k_B$ ,  $\hbar$ ,  $N_A$  — постоянные Больцмана, Планка и Авогадро, соответственно;  $\Xi(\sigma)$  — функция, зависящая от коэффициента Пуассона  $\sigma$ ;  $\mu'$  — молярная масса, которая определяет массу колеблющихся атомов. Поскольку здесь рассматриваются „эффективные“ дебаевские моды, в качестве значения  $\mu'$  мы используем среднюю молярную массу,  $\mu' = ((1-x)\mu_{\text{Fe}} + x\mu_{\text{Co}} + \mu_{\text{Si}})/2$ .

Из (1) и (2) следует, что температура Дебая  $\theta$  является функцией температуры и в то же время входит в определение фононной составляющей термодинамического потенциала  $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta, T)$ . Поскольку весь комплекс вычисляемых термодинамических и упругих свойств определяется через термодинамический потенциал  $\Phi_{ph} = \Phi_{ph}(\theta, T)$ , изменение моделируемого значения температуры Дебая  $\theta$  приводит к изменению вычисляемых значений упругих и тепловых характеристик и, наоборот, моделирование значений рассматриваемых величин приводит к перенормировке массива значений температур Дебая  $\theta$ . Последнее позволяет построить итерационную процедуру для самосогласованного расчета температурных зависимостей  $\theta$  и тепловых и упругих свойств с учетом эффектов решеточного ангармонизма.

Выражения для тепловых и упругих характеристик могут быть получены путем дифференцирования ТДП по различным термодинамическим переменным. Так, для решеточной составляющей теплоемкости получаем выражение

$$C_{ph}(T) = -T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} = 3nR \left\{ C_{VR}(z) \left[ 1 - \frac{1}{z} \left( \frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P \right]^2 - T \left[ \frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2} \right)_P \right\}, \quad (3)$$

где  $C_{VR}(z)$  — стандартная дебаевская теплоемкость, нормированная на  $3R$ .

Для молярного объема  $V(T)$  и объемного коэффициента  $\beta(T)$  теплового расширения (ОКТР) соответственно имеем

$$V(T) = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial P} \right)_T = V_0 - \frac{3nR\theta\gamma_\theta}{B} \left( \frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right), \quad (4)$$

где  $V_0$  — объем при  $T = 0$  К;

$$\beta(T) = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -\frac{3nR\theta\gamma_\theta}{VB} \left\{ C_{VR}(z) \left[ 1 - \frac{T}{\theta} \left( \frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P \right] \frac{1}{\theta} + \left[ \frac{3}{8} + \frac{D(z)}{z} \right] \left[ \frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial \theta}{\partial T} \right)_P + \frac{1}{\gamma_\theta} \left( \frac{\partial \gamma_\theta}{\partial T} \right)_P - \frac{1}{B} \left( \frac{\partial B}{\partial T} \right)_P \right] \right\}. \quad (5)$$

Наконец, для модуля всестороннего сжатия (МВС) можно записать выражение

$$B(T) = V \left( \frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_T = B_0 + \frac{3nR}{V} \times \left\{ \frac{3}{8} \gamma_\theta^* \theta - T [\gamma_\theta^* \cdot C_{VR}(\theta/T) - \gamma_\theta^* \cdot D(\theta/T)] \right\}, \quad (6)$$

где  $F$  — свободная энергия Гельмгольца, интегральное представление для которой имеет ту же форму, что и ТДП, и отличается только набором аргументов,  $B_0$  — начальное (при  $T = 0$  К) значение модуля всестороннего сжатия.

Фигурирующие в формулах выше величины  $\gamma_f$  и  $\gamma_f^*$  представляют собой обобщенные параметры Грюнайзена, которые для произвольной термодинамической величины  $f = f(T, V)$  при постоянных температуре и давлении определяются соотношениями

$$\gamma_f = \frac{V}{f} \left( \frac{\partial f}{\partial V} \right)_{TP}; \quad \gamma_f^* = \frac{V^2}{f} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial V^2} \right)_{TP}. \quad (7)$$

Параметрами модели выступают параметры Грюнайзена для начального (при  $T = 0$  К) значения МВС и коэффициента Пуассона  $\gamma_{B_0}$ ,  $\gamma_{B_0}^*$ ,  $\gamma_\sigma$ ,  $\gamma_\sigma^*$ , а также сам коэффициент Пуассона  $\sigma$ . Для последнего были получены значения  $\sigma = 0.237, 0.243, 0.25$  для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$

соответственно из экспериментальных данных по упругим модулям FeSi и CoSi (см. ниже) с использованием выражения

$$\sigma = \frac{1 - 2G/3B}{2 + 2G/3B}, \quad (8)$$

где  $G$  — модуль сдвига.

Значения остальных параметров были получены из условия наилучшего согласия расчетных и экспериментальных данных: для  $\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Si}$   $\gamma_{B_0} = -2.31$ ,  $\gamma_{B_0}^* = 3.6$ ,  $\gamma_\sigma = 2.5$ ,  $\gamma_\sigma^* = -3$ ; для  $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$   $\gamma_{B_0} = -2.1$ ,  $\gamma_{B_0}^* = 2.7$ ,  $\gamma_\sigma = 2.5$ ,  $\gamma_\sigma^* = -3.1$ ; для  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$   $\gamma_{B_0} = -1.8$ ,  $\gamma_{B_0}^* = 2.3$ ,  $\gamma_\sigma = 2.2$ ,  $\gamma_\sigma^* = -1.8$ .

Ранее в работах [14–16] путем исследования температурных зависимостей скорости звуковых волн были рассчитаны упругие постоянные моносилицидов FeSi и CoSi. Ввиду того что надежные экспериментальные данные для сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  в настоящее время отсутствуют, нами было осуществлено их моделирование с использованием теории эффективной среды [17]. Эта теория является математическим эквивалентом приближения когерентного потенциала (ПКП), используемого для получения электронной структуры сплавов. Поскольку нам известны модуль всестороннего сжатия  $B_1$  и модуль сдвига  $G_1$  FeSi, а также известны МВС  $B_2$  и модуль сдвига  $G_2$  CoSi [14], то мы можем найти значения этих же двух параметров для интересующих нас сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ , где  $x$  — это концентрация CoSi ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$ ), используя описанную в [17] итерационную процедуру на основе соотношений

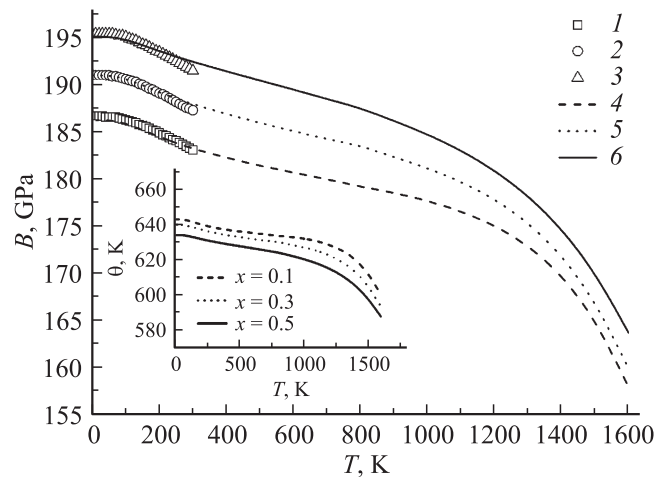
$$B^* = B_1 + x(B_2 - B_1) \frac{3B^* + 4G^*}{3B_2 + 4G^*}, \quad (9)$$

$$G^* = G_1 + x(G_2 - G_1) \frac{5(3B^* + 4G^*)G^*}{G^*(9B^* + 8G^*) + 6G_2(B^* + 2G^*)}. \quad (10)$$

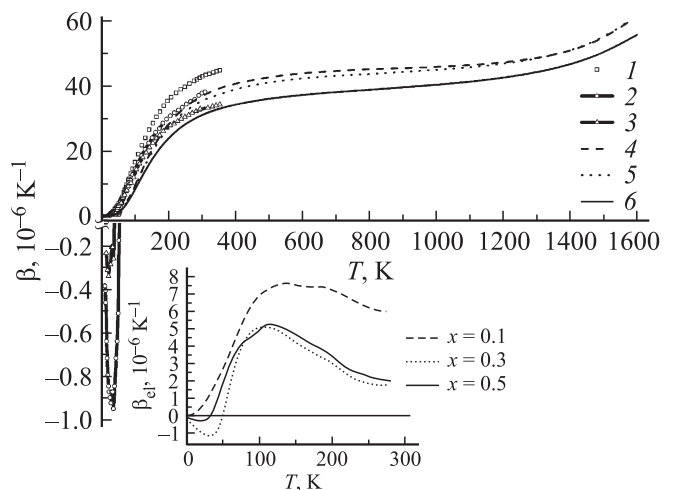
### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены температурные зависимости модуля всестороннего сжатия для сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$ ). Как можно видеть, смоделированные в рамках расширенной модели Дебая значения находятся в хорошем согласии со значениями, рассчитанными с помощью теории эффективной среды. Из этого можно сделать вывод, что за температурную зависимость МВС полностью отвечает решеточная подсистема. В области высоких температур ( $T > 1000$  К) видно, что МВС начинает быстрее убывать с ростом температуры, это говорит об усилении вклада ангармонических эффектов.

На вставке к рис. 1 приведена температурная зависимость характеристической температуры Дебая. До 1000 К происходит монотонное убывание с ростом температуры, затем, как и в случае МВС зависимость усиливается.



**Рис. 1.** Температурная зависимость модуля всестороннего сжатия  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ : 1, 2, 3 — значения, рассчитанные с помощью теории эффективной среды (псевдоэкспериментальные данные) для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета в настоящей работе для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; на вставке температурная зависимость температуры Дебая: результаты расчета в настоящей работе для  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ .



**Рис. 2.** Температурная зависимость объемного коэффициента теплового расширения  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ : 1, 2, 3 — экспериментальные данные [8] для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета в настоящей работе для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; на вставке результаты расчетов вклада  $\beta_{el}$  в ОКТР сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ .

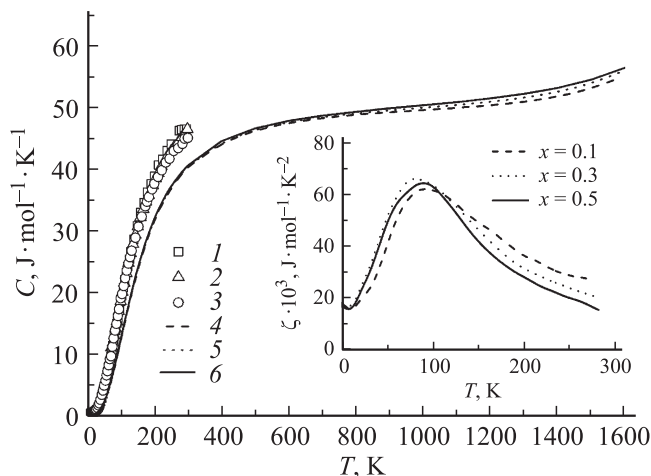
Далее, на рис. 2 представлены температурные зависимости объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР). Отклонение расчетов  $\beta$  в настоящей работе от экспериментальных значений [8] связано с наличием вклада  $\beta_{el}$ , который обусловлен влиянием электронной и магнитной подсистем на тепловое расширение кристаллической решетки. Этот вклад, полученный вычитанием рассчитанной решеточной составляющей из экспериментальных данных, показан на вставке к рис. 2. Можно

Сравнение параметров зависимостей  $\beta(T)$  сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ 

	Смена знака $\beta(T)$ , К		Температура минимума $\beta_{el}(T)$ , К		Смена знака $\beta_{el}(T)$ , К		Температура максимума $\beta_{el}(T)$ , К	
	Работа [8]		Настоящая работа		Работа [8]		Настоящая работа	
	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа	Работа [8]	Настоящая работа
$x = 0.1$	—	15	—	—	17.4	—	259	141
$x = 0.3$	47.1	44	34	—	56	50	—	102
$x = 0.5$	35.8	39	23	—	46	32	—	113

видеть, что суммарный электронно-магнитный вклад  $\beta_{el}$  в ОКТР для сплавов  $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$  и  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  при низких температурах отрицателен. Таким образом, именно электронная подсистема вызывает экспериментально наблюдаемые отрицательные значения ОКТР сплавов  $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$  и  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ . В таблице проведено сравнение параметров температурных зависимостей электронных составляющих ОКТР  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ , полученных в [8] в рамках простой модели Дебая–Грюнайзена, с результатами, полученными в настоящей работе. Можно видеть, что учет эффектов фононного ангармонизма приводит к существенному изменению значений этих параметров.

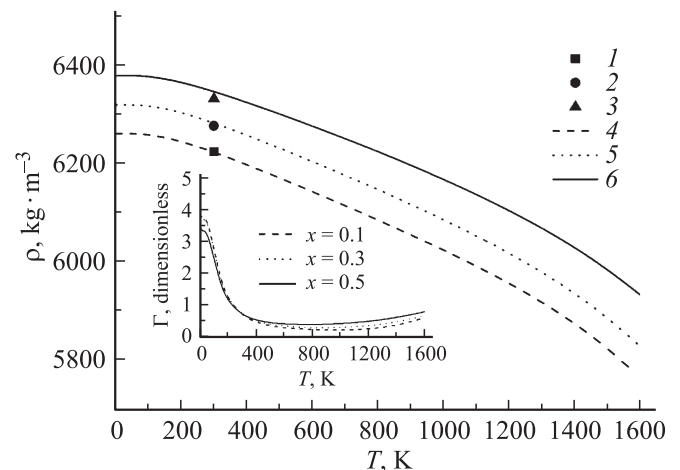
На рис. 3 приведены рассчитанные решеточные составляющие теплоемкости рассматриваемых сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  в сопоставлении с экспериментальными данными [9]. Видно, что расширенная модель Дебая при высоких температурах предсказывает значения теплоемкости, превышающие предел  $3R$  Дюлонга–Пти, что объясняется усилением ангармонических эффектов. На вставке к рис. 3 приведена температурная зависимость коэффициента электронной теплоемкости, который был получен путем вычитания из экспери-



**Рис. 3.** Температурная зависимость теплоемкости  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ : 1, 2, 3 — экспериментальные данные [9] для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; 4, 5, 6 — результаты расчета решеточной составляющей в настоящей работе для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; на вставке: температурная зависимость линейного коэффициента электронной теплоемкости для  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ .

ментальных данных по теплоемкости [9] рассчитанных в настоящей работе значений решеточной составляющей теплоемкости. С ростом температуры коэффициент электронной теплоемкости резко увеличивается, достигая максимума в точках 86 К, 76 К, 89 К для  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно), а затем уменьшается.

В настоящей работе также были рассчитаны значения плотности исследуемых сплавов (рис. 4), экспериментальные данные по которым отсутствуют. Оценка значений плотности при  $T = 300$  К была выполнена следующим образом. Поскольку экспериментальные данные по параметрам решетки для сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  отсутствуют, параметр решетки был рассчитан путем усреднения между значениями для соответствующих моносилцидов  $\text{FeSi}$  и  $\text{CoSi}$ , которые очень близки, т.е. параметр решетки сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  очень слабо изменяется с увеличением концентрации кобальта. Далее параметры решетки были использованы для расчета объемов элементарной ячейки, которые пересчитывались в молярный объем, и, с использованием молярной массы, была вычислена плотность каждого из сплавов. Таким образом были получены следующие значения:  $\rho = 6226$ ,



**Рис. 4.** Температурная зависимость плотности  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ : 1–3 — экспериментальные значения для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; 4–6 — расчет в настоящей работе для соединений  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  для  $x = 0.1, 0.3, 0.5$  соответственно; на вставке: температурная зависимость параметра Грюнайзена для соединений  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ .

6279, 6334 kg/m<sup>3</sup> для Fe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>Si ( $x = 0.1, 0.3, 0.5$ ) соответственно.

На вставке к рис. 4 приведена температурная зависимость параметра Грюнайзена, который определяется следующим образом:

$$\Gamma(T) = -\frac{\partial \ln \theta}{\partial \ln V} = -\frac{\partial \theta}{\theta} \frac{V}{\partial V}$$

$$= -\frac{\partial \theta / \partial T}{\theta} \frac{V}{\partial V / \partial T} = -\frac{1}{\theta \beta} \frac{\partial \theta}{\partial T}.$$

Можно видеть, что при низких температурах  $\Gamma$  максимален в случае Fe<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>Si, в то время как минимален в случае Fe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>Si, т.е. решеточный ангармонизм уменьшается с увеличением концентрации кобальта, что коррелирует с результатами работы [5]. При этом, однако, сплавы с меньшим содержанием кобальта демонстрируют не только более высокие значения  $\Gamma$ , но и более сильную температурную зависимость этого параметра. Вследствие этого, при температурах выше  $\sim 400$  К выполняются следующие соотношения между значениями параметра Грюнайзена для исследуемых сплавов:  $\Gamma(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Si}) < \Gamma(\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}) < \Gamma(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si})$ .

#### 4. Заключение

Из расчетов, выполненных в настоящей работе, следует, что зависимости от температуры некоторых свойств сплава Fe<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>Si несколько отличаются от таковых для двух других сплавов, исследуемых в настоящей работе, т.е. Fe<sub>0.7</sub>Co<sub>0.3</sub>Si и Fe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>Si. В частности, это проявляется в отсутствии инварного эффекта в Fe<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>Si в отличие от Fe<sub>0.7</sub>Co<sub>0.3</sub>Si и Fe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>Si, а также в более высоких значениях нерешеточных составляющих теплоемкости (при  $T > 100$  К) и ОКТР (см. вставки к рис. 2 и 3 соответственно). Можно ожидать, что эти отличия возникают вследствие различной структурной киральности сплавов, поскольку Fe<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>Si является правовращающимся, в то время как сплавы Fe<sub>0.7</sub>Co<sub>0.3</sub>Si и Fe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>Si — левовращающиеся. Для окончательного решения этого вопроса необходимы первопринципные теоретические исследования электронной структуры этих сплавов в области существования в них спиновых спиралей. Очевидно, что представления об электронной и магнитной структурах должны описывать установленные при анализе экспериментальных данных нерешеточные составляющие тепловых свойств. Представляют интерес также исследования ангармонизма фононных спектров, указания на который получены в нейтронографическом исследовании [5], где была выявлена существенная роль взаимодействия электронной подсистемы с кристаллической решеткой.

#### Список литературы

[1] A.L. Schmitt, J.M. Higgins, S. Jin. Nano Lett. **8**, 810 (2008).

- [2] G. Shirane, R. Cowley, C. Majkrzak. Phys. Rev. B **28**, 6251 (1983).
- [3] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L881 (1980).
- [4] S.V. Grigoriev, D. Chernyshov, V.A. Dyadkin, V. Dmitriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvina, D. Menzel, J. Schoenes, H. Eckerlebe. Phys. Rev. Lett. **102**, 037 204 (2009).
- [5] O. Delaire, K. Marty, M.B. Stone, P.R.C. Kent, M.S. Lucas, D.L. Abernathy, D. Mandrus, B.C. Sales. Proc. Nat. Acad. Sci. (USA) **108**, 4725 (2011).
- [6] П.П. Паршин, П.А. Алексеев, К.С. Немковский, Й. Перссон, А.И. Чумаков, Р. Рюффер. ЖЭТФ **145**, 279 (2014).
- [7] A.A. Povzner, A.N. Filanovich. Physica B **456**, 371 (2015).
- [8] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, Р.П. Кренцис. ДАН СССР **297**, 1359 (1987).
- [9] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, В.Н. Сафонов. ДАН СССР **289**, 351 (1986).
- [10] M.K. Chattopadhyay, S.B. Roy, S. Chaudhary. Phys. Rev. B **65**, 132 409 (2002).
- [11] P. Sinha, N.A. Porter, C.H. Marrows. Phys. Rev. B **89**, 134 426 (2014).
- [12] Y. Onose, N. Takeshita, C. Terakura, H. Takagi, Y. Tokura. Phys. Rev. B **72**, 224 431 (2005).
- [13] Y. Liu, Shi-Na Li, Zhi-Zhou Wang. Physica B **407**, 4700 (2012).
- [14] A.E. Petrova, V.N. Kransnorussky, A.A. Shikov, W.M. Yuhasz, T.A. Lograsso, J.C. Lashley, S.M. Stishov. Phys. Rev. B **82**, 155 124 (2010).
- [15] G.P. Zinoveva, L.F. Romasheva, V.A. Saperov. Solid State Phys. **26**, 3509 (1984).
- [16] G.P. Zinoveva, L.P. Andreeva, P.V. Geld. Phys. Status Solidi **23**, 711 (1974).
- [17] G. Grimvall. Thermophysical Properties of Materials. Hardbound, North-Holland, (1999). 424 с.