

05,11

## Электронная структура и спиновые флуктуации в геликоидальном ферромагнетике MnSi

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, И.А. Ясюлевич

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

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

(Поступила в Редакцию 1 декабря 2015 г.)

Исследуется влияние спиновых флуктуаций на магнитные свойства ферромагнитного гелимагнетика MnSi в модели Хаббарда, дополненной учетом антисимметричного релятивистского взаимодействия Дзялошинского–Мория для зонных электронов. Полученные уравнения магнитного состояния указывают на взаимосвязь тонкой структуры плотности электронных состояний с намагниченностью и коэффициентом межмодовой связи. Показано, что положение энергии Ферми в непосредственной близости от точки локального минимума плотности электронных состояний ведет к большим нулевым спиновым флуктуациям при малом значении намагниченности гелимагнетика. При приближении снизу к точке Нееля (примерно при  $0.9T_N$ ) нулевые флуктуации исчезают, а температурный рост тепловых спиновых флуктуаций сопровождается изменением знака коэффициента межмодовой связи. Магнитное поле, перпендикулярное плоскости геликоида, приводит к возникновению и последующему „схлопыванию“ гелимагнитного конуса. Однако условие смены знака коэффициента межмодовой связи делит фазовую диаграмму MnSi на две части, одна из которых отвечает индуцированному полем ферромагнитному состоянию, а другая — парамагнитному состоянию. При этом на  $h$ – $T$ -диаграмме формируется особая область, внутри которой парамагнитное и ферромагнитное состояния оказываются неустойчивыми. Границы этой области согласуются с экспериментальными данными о границах аномальной фазы ( $\alpha$ -фазы). Установлено, что результаты расчетов температурной зависимости магнитной восприимчивости согласуются с экспериментальными данными.

Моносилицид марганца с кристаллической структурой B20 в основном состоянии и нулевом магнитном поле является ферромагнитным длиннопериодическим гелимагнетиком с периодом магнитной сверхструктуры  $180 \text{ \AA}$  (см. обзор [1] и ссылки в нем). Причина формирования геликоидальной длиннопериодической спиновой структуры MnSi — конкуренция антисимметричного релятивистского взаимодействия Дзялошинского–Мория (ДМ-взаимодействия) и неоднородного обменного взаимодействия [2,3]. Во внешнем магнитном поле, перпендикулярном плоскости геликоидального упорядочения, возникает коническая спиновая структура (см. обзор [1] и ссылки в нем). При этом в сильных магнитных полях при температуре ниже температуры Нееля наблюдается „схлопывание“ геликоидального конуса и возникает индуцированная ферромагнитная фаза [1]. Однако окрестности точки Нееля при величине модуля вектора напряженности поля  $h$ , большей, чем значения  $h_C$ , соответствующие „схлопыванию“ гелимагнитного конуса, индуцируется парамагнитное состояние (см. обзор [1] и ссылки в нем). В дополнение к этой особенности на фазовой диаграмме MnSi, согласно экспериментальным данным [3], выделяется область значений  $T$  и  $h$ , при которых не реализуются известные типы магнитного упорядочения (в частности, гелимагнитное или ферромагнитное), а также парамагнитное состояние. Состояние спиновой системы в этой области фазовой  $h$ – $T$ -диаграммы иногда трактуется как „скирмионная“ фаза ( $A$ -фаза) [4], в которой реализуются локальные спиновые вихри при отсутствии дальнего магнитного порядка.

Сравнительно низкие значения температур магнитного фазового перехода, а также температурные зависимости амплитуды волны спиновой плотности и  $h_C(T)$  описываются в рамках спин-флуктуационной теории слабого зонного магнетизма [5]. Однако при расчетах электронной структуры основного ферромагнитного состояния в приближении метода локальной электронной плотности, учитывающем кулоновские корреляции (LDA + U), получаются оценочные значения величины магнитного момента, приходящегося на атом марганца, составляющие  $1 \mu_B$  [5] ( $\mu_B$  — магнетон Бора). Это в 2.5 раза превышает значение магнитного момента, приходящегося на атом марганца ( $0.4 \mu_B$  [1,6]), наблюдаемое в поле  $h > 6.2 \text{ kOe}$  при  $T = 1.4 \text{ K}$ . В свою очередь эффективный магнитный момент, найденный из константы Кюри, определяемой путем аппроксимации парамагнитной восприимчивости законом Кюри–Вейсса, составляет  $(1.4–2.2) \mu_B$  [7–9]), что соответствует оценкам, полученным методом LDA + U.

Результаты *ab initio* расчетов ставят под сомнение интерпретацию магнитных свойств MnSi в рамках теории слабого зонного магнетизма. В свою очередь сами эти результаты противоречат ряду экспериментальных данных. При этом весьма существенные трудности возникают при анализе температурно-полевого фазового диаграммы этого магнетика, в частности вблизи точки Кюри–Нееля.

В настоящей работе развивается интерполяционная спин-флуктуационная теория геликоидального зонного ферромагнетизма, в которой рассматриваются неодно-

родные изотропные обменное и антисимметричное релятивистское взаимодействия и учитываются особенно в электронной структуре. При этом исследуются не только тепловые, но и нулевые спиновые флуктуации, возникающие в основном состоянии. Флуктуационные эффекты рассмотрены с использованием „затравочного“ энергетического спектра  $d$ -электронов, рассчитанного в настоящей работе для парамагнитного основного состояния в рамках приближения метода локальной электронной плотности с учетом кулоновских корреляций, а также спин орбитального взаимодействия (LDA + U + SO).

Для модельного описания геликоидального и индуцированных полем ферро- и парамагнитного состояний рассмотрим систему  $d$ -электронов, описываемую гамильтонианом, включающим внутриузельное взаимодействие Хаббарда  $H_U$ , энергию зонного движения  $d$ -электронов  $H_0$ , релятивистски малое антисимметричное взаимодействие Дзялошинского–Мория  $H_{MD}$  [10] и зеемановское взаимодействие спиновых магнитных моментов с внешним однородным магнитным полем  $H_h$ :

$$H = H_U + H_0 + H_{MD} + H_h. \quad (1)$$

Принимая во внимание малость ДМ-взаимодействия по сравнению с другими обменными взаимодействиями, ограничимся далее его учетом в приближении среднего поля

$$H_{MD} \approx 2 \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{d}_{\mathbf{q}} [\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{M}_{-\mathbf{q}}], \quad (2)$$

где  $\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = id\mathbf{q}$ ,  $d$  — константа Дзялошинского [10],  $\mathbf{q}$  — вектор квазиимпульса,  $\mathbf{M}_{\mathbf{q}}$  — вектор неоднородной намагниченности,  $\mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)} = [\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{d}_{-\mathbf{q}}]$  — среднее поле Дзялошинского,  $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$  — Фурье-образ оператора спиновой плотности в узле.

Для вычисления статистической суммы  $Z$  используем метод, развитый в рамках спин-флуктуационной теории [11] сильно коррелированных ферромагнитных металлов. Для этого воспользуемся преобразованием Стратоновича–Хаббарда, которое сводит проблему одновременного учета кулоновских корреляций и межузельных перескоков  $d$ -электронов к описанию их зонного движения во флуктуирующих обменном ( $\xi$ ) и зарядовом ( $\eta$ ) полях:

$$Z = \text{Sp} \int (d\xi, d\eta) \exp \left\{ -(\xi_0 + \mathbf{h}/c) - \sum_{\mathbf{q}(\neq 0)} |\xi_{\mathbf{q}} + \mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)}/c|^2 - \sum_{\mathbf{q}} |\eta_{\mathbf{q}}|^2 + H_{\text{eff}}(\xi, \eta)/T \right\}. \quad (3)$$

Здесь

$$H_{\text{eff}} = \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + (ic/2) \sum_{\mathbf{q}} \eta_{-\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} c \xi_{-\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{d}_{\mathbf{q}} [\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{M}_{-\mathbf{q}}] \quad (4)$$

— эффективный гамильтониан, в котором  $a_{k\sigma}^+$  ( $a_{k\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) электрона с 4-квазиимпульсом  $k$  и спином  $\sigma$ ,  $\varepsilon_k$  — энергия зонно-

го движения  $d$ -электронов, рассчитываемая методом LDA + U + SO,  $N_{\mathbf{q}}$  и  $\mathbf{s}_{\mathbf{q}}$  — Фурье-образы операторов зарядовой и вектора спиновой плотности, записанных в мацубаровском представлении взаимодействия,  $\mathbf{q}$  — 4-вектор квазиимпульса, включающий в себя как сам квазиимпульс  $\mathbf{q}$ , так и бозевскую мацубаровскую частоту,  $\eta_{\mathbf{q}} = \eta_{\mathbf{q}}^{(1)} + i\eta_{\mathbf{q}}^{(2)}$ ,  $\xi_{\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{q}}^{(1)} \mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(1)} + i\xi_{\mathbf{q}}^{(2)} \mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(2)}$  ( $\xi_{\mathbf{q}=0}^{(2)} = 0$ ),  $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(i)}$  — единичный случайный вектор, направленный вдоль оси квантования действительной ( $j = 1$ ) и мнимой ( $j = 2$ ) частей оператора  $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ ,

$$(d\xi, d\eta) = (4\pi)^{-1} \pi^{1/2} d\xi_0^{(1)} d\Omega_0^{(1)} \times \prod_{j=1,2} \left[ \left( \prod_{\mathbf{q}>0} (4\pi)^{-1} d\Omega_{\mathbf{q}}^{(j)} \right) \left( \prod_{\mathbf{q}\neq 0} \pi^{-1} d\xi_{\mathbf{q}}^{(j)} d\eta_{\mathbf{q}}^{(j)} \right) \right],$$

$d\Omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$  — телесный угол направлений вектора  $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(j)}$ ,  $c = (UT)^{1/2}$ ,  $T$  — температура в энергетических единицах,  $U$  — параметр внутриатомного кулоновского взаимодействия, величина  $\mathbf{h}$  определена в единицах  $2\mu_B$ .

Далее выполним процедуру вычислений квантово-статистических средних, получаемых в результате разложения (3) по операторам  $H_{\text{eff}}$ . Полученный в результате этого усреднения ряд просуммируем по степеням стохастических обменных и зарядовых полей в приближении однородных локальных полей [12]. При этом эффекты пространственно-временной нелокальности стохастических полей и среднего поля, связанного с геликоидальной намагниченностью, будем описывать через зависимость от квазиимпульса и частоты вершинных частей второго порядка, соответствующих функции Линдхарда. Это приближение позволяет учесть динамику спиновых флуктуаций и смоделировать неоднородность обменного взаимодействия, конкуренция которого с ДМ-взаимодействием приводит к длиннопериодическому гелимагнетизму (см., например, [2]). Вблизи точки Кюри–Нееля такое приближение согласуется с теорией фазовых переходов и экспериментальными данными [13], согласно которым в MnSi преобладают длинноволновые флуктуации (локализованные вблизи вектора  $\mathbf{q}_0$ ), описываемые флуктуационно-диссипативной теоремой

$$\langle m^2 \rangle = \langle m^2 \rangle_0 + \langle m^2 \rangle_T = 3U^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \int (1 + 2f_B(\omega/T)) \text{Im}(D(\mathbf{q}, \omega)) d\omega, \quad (5)$$

где  $f_B(\omega/T)$  — функция Бозе,  $\langle m^2 \rangle_0$  и  $\langle m^2 \rangle_T$  — квадраты амплитуд нулевых и тепловых флуктуаций спиновой плотности. При этом величина фактора обменного усиления неоднородной динамической восприимчивости  $D(\mathbf{q}, \omega) = (D^{-1}(0, 0) + X(\mathbf{q}, \omega))^{-1}$  резко изменяется с изменением функции Линдхарда  $X(\mathbf{q}, \omega)$  (см., например, [14]) в узком интервале квазиимпульсов и частот.

Уравнения для однородной  $\mathbf{M}_0$  и неоднородной  $\mathbf{M}_{\pm\mathbf{q}_0}$  намагниченностей, так же как флуктуационно-диссипативная теорема для неприводимых парных спиновых корреляторов, автоматически получаются при вычислении статистической суммы (3) методом седловой

точки (см., например, [11]) по переменным  $\xi_0, \xi_{q_0}, \xi_{-q_0}$ ,  $r_{q,\gamma} = |\xi_{q,\gamma}|$ ,  $\vartheta_{q,\gamma} = \arg(\xi_{q,\gamma})$ . Здесь и далее индекс  $\gamma$  нумерует проекции векторов на оси декартовой системы координат. Согласно методу производящих множителей, имеем

$$\xi_{q_0} = (c/2T)\mathbf{M}_{q_0} + 2\mathbf{h}_{q_0}^{(D)}/c, \quad \xi_0 = (c/2T)\mathbf{M}_0 + \mathbf{h}/c,$$

$$2r_{q,\gamma}^2 = \langle |S_{q,\gamma} - \langle S_{q,\gamma} \rangle|^2 \rangle + 1.$$

Тогда в соответствии с условиями перевала находим

$$M_{q_0,\gamma}(D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0)) + \kappa M_{-q_0,\gamma} \mathbf{M}_{q_0}^2 + 2\kappa M_{0,\gamma} \mathbf{M}_0 \mathbf{M}_{-q_0} = 2h_{q_0,\gamma}^{(D)}/U, \quad (6)$$

$$M_{0,\gamma} D^{-1} + 2\kappa(M_{q_0,\gamma} \mathbf{M}_0 \mathbf{M}_{-q_0} + M_{-q_0,\gamma} \mathbf{M}_0 \mathbf{M}_{q_0}) = 2(1 - D^{-1})h_\gamma/U, \quad (7)$$

$$2r_{q,\gamma}^2(D^{-1} + \kappa M_{0,\gamma}^2 + 2\kappa|M_{q_0,\gamma}|^2 + X_q) = 1. \quad (8)$$

Здесь  $M_{q,\gamma}$ ,  $S_{q,\gamma}$ ,  $h_\gamma$  и  $h_{q_0,\gamma}^{(D)}$  — проекции на декартовы оси координат векторов  $\mathbf{M}_q$ ,  $\mathbf{S}_q$ ,  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{h}_{q_0}^{(D)}$  соответственно;  $D^{-1} = 1 - \chi_\perp^{(0)} + \kappa\langle m^2 \rangle/3$ ,  $\kappa = (U/m^2)[\chi_\perp^{(0)} - \chi_\parallel^{(0)}]$  — коэффициент межмодовой связи, совпадающий в теории слабого зонного ферромагнетизма [14] с четвертой производной свободной энергии по случайному обменному полю на узле,  $\chi_\perp^{(0)}$  и  $\chi_\parallel^{(0)}$  — однородные поперечная и продольная паулиевские восприимчивости с учетом спин-флуктуационной перенормировки электронного спектра:  $\chi_\perp = n_{\text{eff}}/Um$  и  $\chi_\parallel = \tilde{g}(\mu)$ ,  $m^2 = \mathbf{M}_0^2 + 2\mathbf{M}_{q_0}^2 + \langle m^2 \rangle$  — среднеквадратический магнитный момент, приходящийся на узел;  $X_q$  — функция Лидхарда на 4-векторе, получаемая путем аналитического продолжения ее частотной зависимости на комплексную плоскость;

$$2n_{\text{eff}} = \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha \int g_0(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu - \alpha Um + Un/2) d\varepsilon;$$

$$\tilde{g}(\mu) =$$

$$= 2 \prod_{\alpha=\pm 1} g_0(\mu + \alpha Um - Un/2) / \sum_{\alpha=\pm 1} g_0(\mu + Um - Un/2);$$

$f(\varepsilon - \mu)$  — функция Ферми–Дирака;  $g_0(\varepsilon)$  — одноэлектронная плотность состояний  $d$ -электронов,  $\mu$  — химический потенциал,  $\alpha = \pm 1$  — квазиспиновое число,  $n$  — среднее число  $d$ -электронов на узел,  $m$  — полный магнитный момент на узел.

Из формул (6), (7) видно, что заметный вклад в уравнения магнитного состояния вносят слагаемые с коэффициентом межмодовой связи, в зависимости от знака которого можно выделить область устойчивости ферромагнитных решений:  $D < 0$  при условии, что  $\kappa > 0$ . При этом парамагнитное решение реализуется при  $D > 0$  независимо от знака коэффициента межмодовой связи ( $\kappa < 0$  или  $\kappa > 0$ ). При условиях  $D < 0$

и  $\kappa < 0$  как ферро-, так и парамагнитное состояние являются неустойчивыми!

Далее исследуем такую же модель, как и в работе [2], в которой ось  $Oz$  совпадает по направлению с векторами  $\mathbf{q}_0$ ,  $\mathbf{h}$  и вектором намагниченности  $\mathbf{M}_0$ , а вектор  $\mathbf{M}_{\pm q_0} = 2^{-1/2}(M_{q_0}, \pm M_{q_0}, 0)$  лежит в плоскости, перпендикулярной вектору  $\mathbf{q}_0$  ( $|\mathbf{q}_0| = q_0$ ). Тогда модуль волнового вектора гелимагнитного упорядочения  $q_0$ , определяемый исходя из условия максимума неоднородной намагниченности (что отвечает минимуму электронной энергии как функции намагниченности), записывается в виде

$$q_0 = 2d(1 - D^{-1})/UA \approx 2d/UA \quad (9)$$

и зависит от параметров спиновой неоднородности, определяемых функцией Линдхарда  $X(\mathbf{q}, 0) = Aq^2$ .

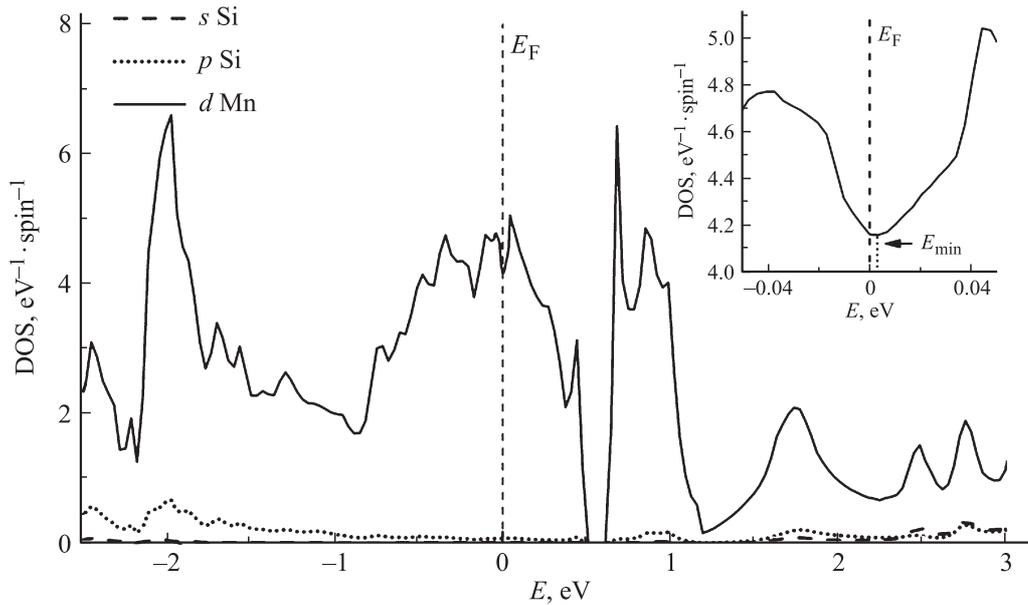
Для конкретного анализа уравнений магнитного состояния и, в частности, параметров  $\kappa$  и  $D$  применительно к MnSi необходима модель его электронной структуры, следующая из *ab initio* вычислений и согласованная с наблюдаемыми температурами Кюри–Нееля и температурными зависимостями спиновой магнитной восприимчивости. Такая модель должна быть построена на основе вычислений электронной структуры немагнитного основного состояния методом LDA + U + SO и дополнена учетом хаббардовских корреляций и антисимметричного релятивистского взаимодействия, приводящих к геликоидальному ферромагнетизму с тепловыми и нулевыми спиновыми флуктуациями. В настоящей работе такой расчет был проведен с использованием пакета Elk методом LDA + U + SO на базе линейаризованных присоединенных плоских волн (LAPW). Результаты расчета плотности электронных состояний (DOS) представлены на рис. 1. Хотя оценки параметров межэлектронных взаимодействий и общий вид DOS в основном согласуются с полученными ранее [15,16] (см. рис. 1), более подробные вычисления тонкой структуры плотности состояний вблизи уровня Ферми дают новый результат — локальный минимум в области максимума плотности электронных состояний как функции энергии (рис. 1). Получаемые в рамках такой плотности состояний температурные зависимости однородной парамагнитной восприимчивости, рассчитанной по формуле, следующей из уравнения (7),

$$\chi(T) = 2U^{-1}(1 - D^{-1} - \kappa(\mathbf{M}_0 + 2\mathbf{h}/U)^2) \times (D^{-1} + \kappa(\mathbf{M}_0 + 2\mathbf{h}/U)^2)^{-1}, \quad (10)$$

хорошо согласуются с экспериментом при  $U = 0.866$  eV (рис. 2). При этом в парамагнитной фазе, так же как в работе [5], получается картина тепловых длинноволновых спиновых флуктуаций с температурным изменением квадрата амплитуды спиновых флуктуаций по закону

$$\langle m^2 \rangle_T \approx (T/T_0)^{4/3}, \quad (11)$$

где  $T_0 = \Gamma^{-1}(4/3)\xi^{-1}(4/3)3^{-2/3}2^2 B^2 A q_B^2 U$  ( $T_0 = 15000$  K),  $q_B$  — модуль вектора Бриллюэна,  $\Gamma(x)$  и  $\xi(x)$  —  $\Gamma$ - и  $\xi$ -функции Римана.



**Рис. 1.** Плотность электронных состояний MnSi при атмосферном давлении. На вставке — плотность состояний вблизи уровня Ферми.

В силу того что в интеграле, определяющем амплитуду нулевых спиновых флуктуаций (см. (5)) фигурирует зависимость фактора обменного усиления обобщенной динамической восприимчивости во всем интервале частот (которая неизвестна) и в отличие от выражения для амплитуды тепловых флуктуаций отсутствует функция Бозе (ограничивающая область интегрирования по частоте и квазиимпульсам), прямое вычисление этого интеграла не представляется возможным. Поэтому оценим величину нулевых флуктуаций исходя из условия максимального значения неоднородной намагниченности, определяемой уравнениями магнитного состояния (6)–(8). Это условие отвечает максимальной устойчивости магнитоупорядоченного состояния, поскольку

соответствует минимуму энергии хаббардовского обменного взаимодействия.

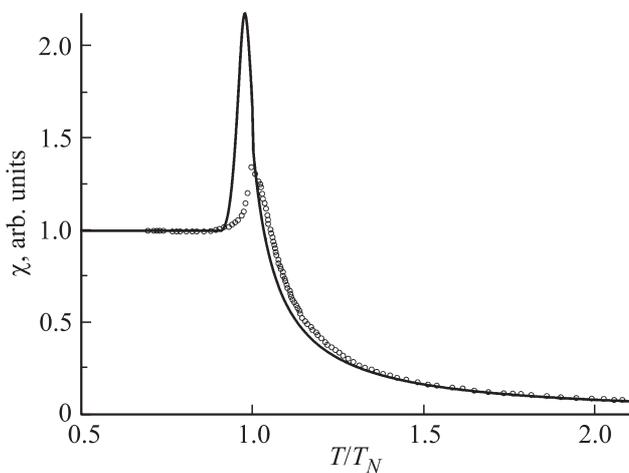
Из решения уравнения, получаемого путем приравнивания к нулю выражения для производной  $dM_{q_0}^2/d\langle m^2 \rangle_0$ , найденного в результате дифференцирования (5) по амплитуде нулевых флуктуаций спиновой плотности  $\langle m^2 \rangle_0^{1/2}$ , следует, что в модели Янсена–Бака [2] величина амплитуды нулевых флуктуаций, соответствующая максимально возможному значению  $M_{q_0}$ , определяется выражением

$$\langle m^2 \rangle_0 \approx n_{ef}^2 \left[ \left( \sum_{\alpha=\pm 1} g_0(\mu + \alpha Um) \right)^2 / \left( U^2 \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha g_0^2(\mu + \alpha Um) g'_0(\mu - \alpha Um) \right) \right]. \quad (12)$$

Такая оценка амплитуды нулевых флуктуаций с использованием найденной функции плотности состояний (рис. 1) дает значение среднеквадратического магнитного момента на атом марганца в основном состоянии MnSi, равное  $m(0) = 1.032 \mu_B$  на атом марганца (что близко к результату расчета методом LDA + U —  $1 \mu_B$  [16]). При этом, согласно (6), отвечающий этому значению модуль неоднородной намагниченности существенно меньше  $m(0)$  и пропорционален константе Дзялошинского

$$M_{q_0}^2(0) \approx 4d^2 n_1 / (3U^2 A), \quad (13)$$

что составляет примерно  $0.024 \mu_B$  на атом марганца при значении  $d/a_0 \sim 1$  meV ( $a_0$  — постоянная решетки) [17] и значении  $U = 0.866$  eV, получаемом при согласовании



**Рис. 2.** Температурная зависимость магнитной восприимчивости. Сплошная линия — расчет, точки — эксперимент [5]).

результатов расчета методом LDA + U + SO с экспериментальными данными по парамагнитной восприимчивости (рис. 2). Здесь  $n_1$  — число незаполненных состояний  $d$ -зоны, приходящихся на атом марганца.

Также отметим, что значение однородной намагниченности в поле  $h > h_c = 6.2 \text{ кОе}$  совпадает с экспериментальным значением, равным  $0.4 \mu_B$  [1,6] на атом марганца. В то же время для получения данного значения в рамках метода LDA + U приходится использовать величину  $U = 7.5 \text{ eV}$  [16], что приводит к оценочным значениям температур магнитного фазового перехода, которые на порядок больше экспериментально наблюдаемых.

Рост амплитуды тепловых флуктуаций ведет к уменьшению амплитуды нулевых флуктуаций (см. (12)) с увеличением температуры. При  $U(\langle m^2 \rangle_T^{1/2}) > 0.055 \text{ eV}$  ( $\langle m^2 \rangle_T^{1/2}$  — амплитуда тепловых спиновых флуктуаций) нулевые флуктуации исчезают, но, поскольку величина  $\langle m^2 \rangle_T^{1/2}$  становится больше полуширины локального минимума функции плотности состояний, а коэффициент межмодовой связи остается положительным, устойчивость магнитных решений сохраняется.

В соответствии с выражением (12) и значением намагниченности, найденным в этих условиях из уравнения (6), нулевые спиновые флуктуации исчезают при  $T = 0.9T_N$ . При этом температура Нееля удовлетворяет условию

$$T_N^{4/3} = T_C^{4/3} (1 + |D|d^2/(AU^2)), \quad (14)$$

где  $T_C = T_0|D|^{-4/3}/\kappa$  совпадает с температурой Кюри ферромагнетика. При получаемых в рассматриваемой модели значениях  $|D| = 10^2$  и  $\kappa = 5$  имеем  $T_N \approx 30 \text{ К}$ , что согласуется с экспериментом [1].

Величина и температурная зависимость амплитуды нулевых и тепловых флуктуаций приводят к температурной зависимости ферромагнитной восприимчивости (экстраполированной к нулевому значению внешнего магнитного поля), следующей из уравнения состояния (6),

$$\chi(T) \approx 2U^{-1}(\kappa M_{q_0}^2(T) + 2d^2/(U^2A))^{-1}, \quad (15)$$

которая согласуется с экспериментальными данными (рис. 2). Результаты расчетов среднеквадратического магнитного момента  $m$ , амплитуды тепловых спиновых флуктуаций  $\langle m^2 \rangle_T^{1/2}$  и амплитуды геликоидальной намагниченности  $M_{q_0}$  представлены на рис. 3. Согласно (15), изменение знака коэффициента межмодовой связи не нарушает устойчивость ферромагнитного решения при наличии гелимагнитного упорядочения  $|\kappa|M_{q_0}^2 < 2d^2/(U^2A)$  в отсутствие внешнего однородного поля (однородной намагниченности).

Во внешнем магнитном поле в соответствии с уравнением (7) возникает намагниченность вдоль оси  $Oz$ , а при  $h = h_c$ , где

$$h_c = 2Aq_0^2UM_{q_0}^2(T) = 2Aq_0^2(T_N^{4/3} - T^{4/3})^{1/2}, \quad (16)$$

происходит „схлопывание“ гелимагнитного конуса, что в условиях  $h > h_c$  и  $\kappa > 0$  ведет к возникновению индуцированного полем ферромагнитного упорядочения.

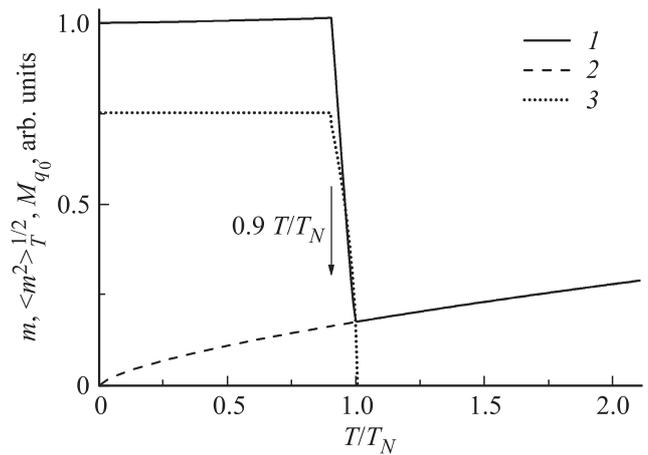


Рис. 3. Среднеквадратический момент (в масштабе 1:1) (1), амплитуда тепловых флуктуаций (в масштабе 4:1) (2) и намагниченность (в масштабе 10:1) (3) как функции температуры.

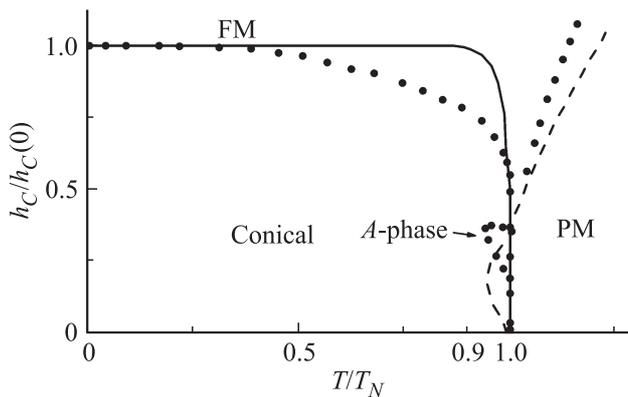
Однако коэффициент межмодовой связи может резко изменяться с изменением температуры и магнитного поля вплоть до смены знака, что в свою очередь приведет к потере термодинамической устойчивости ферромагнитного решения с ростом однородной намагниченности. Такое необычное неферромагнитное геликоидальное состояние реализуется при условии  $\kappa < 0$ . Температурно-полевая граница такой области определяется условием  $\kappa = 0$ .

Если  $0 < |M_{q_0}| \ll \chi^h$ , значения  $T$  и  $h$ , отвечающие обращению в нуль коэффициента межмодовой связи, задаются уравнением

$$2h(1 - 4d^2/(U^2A)) = 4|M_0(T, h)|d^2/(U^2A). \quad (17)$$

При этом в области значений температуры и однородного поля, ограниченной с одной стороны уравнением (17), а с другой — зависимостью критического поля от температуры (16), модель Янсена–Бака [2] неприменима. В этой области значений  $T$  и  $h$  в соответствии с (6) геликоидальная спираль сохраняется, однако решение для вектора имеет составляющую вдоль оси  $Oz$  (внешнего однородного магнитного поля).

При  $M_{q_0} = 0$  коэффициент межмодовой связи изменяет знак и становится отрицательным с изменением  $T$  и  $h$ . По этой причине возникновение ферромагнитных решений за пределами гелимагнитного упорядочения оказывается невозможным при значениях напряженности магнитного поля, удовлетворяющих неравенству  $h < (U/2)(B(T/U m_0)^2 - (1 - \tilde{g}(\mu))^2)^{1/2}$ , где  $B$  — коэффициент, определяющий частотную зависимость функции Линдхарда (см. [14]),  $m_0$  — значение полного магнитного момента, приходящегося на узел, определяемое условием  $\kappa(m_0) = 0$ . Согласно уравнениям (6), (7), оценки значений температур и внешних магнитных полей, приводящих к реализации условия  $\kappa(m_0) = 0$ , коррелируют с границей области существования ферромагнитного упорядочения на  $h$ - $T$ -диаграмме MnSi (см. рис. 4 и [1]).



**Рис. 4.** Магнитная фазовая диаграмма MnSi. Точки — экспериментальные данные, заимствованные из обзора [1]. Сплошная линия — результаты расчета  $h_C(T)$  в настоящей работе. Штриховой линией показана зависимость внешнего однородного поля от температуры, отвечающая условию  $\kappa(m_0) = 0$ . FM — ферромагнитная фаза, PM — парамагнитная фаза.

Таким образом, в рамках развитых представлений об электронной структуре MnSi уровень Ферми в его основном состоянии находится в энергетической близости к краю области запрещенных энергий (рис. 1). При этом плотность состояний на уровне Ферми  $g_F$  и величина фактора Стонера  $(1 - U g_F)^{-1} \sim 10^2$  достаточно велики, что соответствует приближениям теории слабого зонного ферромагнетизма и гелимагнетизма [5]. Однако основное состояние характеризуется среднеквадратическими магнитными моментами, величина которых значительно больше амплитуды намагниченности, что может быть связано с большими нулевыми спиновыми флуктуациями. При этом нулевые спиновые флуктуации сохраняются в широком интервале температур (вплоть до  $0.9 T_N$ ) и затем резко убывают вследствие особенностей электронной структуры вблизи нижнего края энергетической щели (рис. 1). Это ведет к возникновению области, в которой преобладают тепловые спиновые флуктуации (см. также [5,14]), приводящие к температурно-зависимым эффектам расщепления электронных термов и резкому спаду намагниченности. Возникает наблюдаемый экспериментально температурный максимум магнитной восприимчивости (рис. 2). При этом во внешнем поле происходит смена знака коэффициента межмодовой связи, что коррелирует с возникновением индуцированного парамагнетизма на  $h-T$ -диаграмме (рис. 4). Причиной этой особенности является локальный минимум DOS на кривой плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми.

## Список литературы

- [1] С.М. Стишов, А.Е. Перова. УФН **181**, 1157 (2011).
- [2] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L881 (1980).
- [3] S.V. Grigoriev, S.V. Maleyev, A.I. Okorokov, Yu.O. Chetverikov, P. Böni, R. Georgii, D. Lamago, H. Eckerlebe, K. Pranzas. Phys. Rev. B **74**, 214414 (2006).
- [4] U.K. Röbler, A.N. Bogdanov, C. Pfleiderer. Nature **442**, 797 (2006).
- [5] А.А. Повзнер, О.Г. Страшников, А.Г. Волков. ФНТ **10**, 738 (1984).
- [6] J.H. Wernick, G.K. Wertheim, R.C. Sherwood. Mater. Res. Bull. **7**, 1431 (1972).
- [7] T. Sakakibara, H. Mollymoto, M. Date. J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 2439 (1982).
- [8] Y. Ishikawa, Y. Noda, Y. J. Uemura, C.F. Majkrzak, G. Shirane. Phys. Rev. B **31**, 5884 (1985).
- [9] C. Thessieu, C. Pfleiderer, F.N. Stepanov, J. Flouquet. J. Phys.: Condens. Matter **9**, 6677 (1997).
- [10] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **46**, 1420 (1964).
- [11] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, П.В. Баянkin. ФТТ **40**, 1437 (1998).
- [12] J. Hertz, M. Klenin. Phys. Rev. B **10**, 1084 (1974).
- [13] C. Pfleiderer, G.J. McMullan, S.R. Julian, G.G. Lonzarich. Phys. Rev. B **55**, 8330 (1997).
- [14] T. Moriya, A. Kawabata. J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 639 (1973); T. Moriya, A. Kawabata. J. Phys. Soc. Jpn. **35**, 669 (1973).
- [15] S.J. Hashemifar, P. Kratzer, M. Scheffler. Phys. Rev. Lett. **94**, 096402 (2005).
- [16] R. Collyer, D.A. Browne. Physica B **403**, 1420 (2008).
- [17] С.В. Григорьев, В.А. Дядькин, С.В. Малеев, D. Menzel, J. Schoenes, D. Lamago, Е.В. Москвин, H. Eckerlebe. ФТТ **52**, 852 (2010).