

01,11

Магнитообъемные эффекты и тепловое расширение в киральных геликоидальных ферромагнетиках $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, Т.А. Ноговицына, С.А. Бессонов

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

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

Поступила в Редакцию 7 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 12 апреля 2022 г.

Принята к публикации 12 апреля 2022 г.

В рамках теории зонного магнетизма и модели Хейне для объемной зависимости электронного спектра, развивается подход к исследованию магнитообъемных эффектов в киральных геликоидальных ферромагнетиках. На примере $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ получено, что в области дальнего порядка (при температуре $T < T_c$) магнитообъемный эффект определяется амплитудой геликоидальных спиновых спиралей и приводит к наблюдаемому на эксперименте отрицательному объемному коэффициенту теплового расширения. В области затянутых по температуре фазовых переходов первого рода, установлен новый механизм магнитообъемного эффекта, обусловленный возникающими вследствие различия хаббардовских потенциалов железа и кобальта пространственными флуктуациями спиновых спиралей. Показано, что рассмотренные объемные эффекты приводят не только к наблюдаемому на эксперименте отрицательному объемному коэффициенту теплового расширения (ОКТР) в фазе кирального спинового ближнего порядка, но и к заметному увеличению температуры перехода в парамагнитное состояние ($T > T_s$).

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

DOI: 10.21883/FTT.2022.08.52681.336

1. Введение

Киральные зонные ферромагнетики со структурным типом B20, характеризуются нарушением кубической симметрии (искаженная структура типа NaCl), которое приводит к исчезновению центра инверсии. Вследствие этого в системе сильно коррелированных электронов имеет место несимметричное релятивистское взаимодействие Дзялошинского–Мория (ДМ), и формируются ферромагнитные геликоидальные спиновые спирали [1]. При изменении знака параметра мода-мода согласно теории Гинзбурга–Ландау возможен затянутый по температуре магнитный фазовый переход первого рода, при котором возникает наблюдаемый на эксперименте киральный спиновый ближний порядок с флуктуациями спиновых спиралей [2,3]. В частности, такой переход в узком интервале температур ($T_s - T_c$) $\ll T_c$ имеет место в MnSi, где он сопровождается резким изменением объема и возникновением лямбда — подобной аномалии ОКТР [4]. Затянутый по температуре переход, связанный со сменой знака параметра мода-мода в $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [5], вследствие флуктуаций внутриатомных потенциалов электрон-электронного отталкивания на узлах занятых атомами железа и кобальта [5], реализуется в более широком диапазоне температур ($T_s - T_c$) $\sim T_c$, а на эксперименте вместо лямбда-аномалии отрицательных ОКТР возникает широкий температурный минимум [6].

При этом согласно [3] в составах с $0.2 < x < 0.65$ при температурах $T_c < T < T_s$ реализуются скирмионные микроструктуры, связанные с возникновением кираль-

ного ближнего порядка в области температур затянутого фазового перехода первого рода. Однако развитый термодинамический подход не объясняет наблюдаемые на эксперименте в области $T_c < T < T_s$ значительный магнитный вклад в ОКТР, поскольку был получен в рамках предположения о постоянстве объема. Поэтому не выяснено, с какими магнитообъемными эффектами связаны отрицательные магнитные вклады в ОКТР, и какое влияние объемные эффекты оказывают на возникновение в киральных ферромагнетиках дальнего и ближнего порядка.

В настоящей работе в модели киральной сильно коррелированной электронной системы с пространственными флуктуациями хаббардовских потенциалов на узлах, занятых железом и кобальтом, рассматриваются магнитообъемные эффекты и температурные зависимости ОКТР в вихревых спиновых структурах и микроструктурах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, возникающие при постоянном давлении.

2. Модель

Рассмотрим сильно коррелированную электронную систему киральных ферромагнетиков $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с гамилтонианом, учитывающим энергию зонного движения, внутриатомные кулоновские спиновые и зарядовые корреляции, различающиеся на узлах, занятых атомами Fe на Co. При этом будем иметь в виду, что использование спин-зависящего энергетического спектра из первопринципных LSDA + U + SO, приводит к

концентрационным зависимостям и значениям локальных намагниченностей $Fe_{1-x}Co_xSi$, не согласующимся с экспериментальными данными [7]. Удовлетворительное согласие с экспериментом получается при самосогласованном расчете локальной намагниченности в рамках флуктуационной теории зонного магнетизма, в которой результаты первопринципного LDA + U + SO используются только для моделирования электронной структуры [5].

Важной особенностью рассматриваемой модификации модели Хаббарда, наряду с различием потенциалов внутриатомного электрон-электронного отталкивания на узлах занятых железом и кобальтом, является зависимость спектра сильно коррелированных d -электронов от объема, которая в соответствии с формулой V. Heine [8], описывается соотношением $\epsilon_k(V = \theta^{-1}\epsilon_k^{(0)})$, где $\theta = (V/V_0)^{5/3}$.

Таким образом, гамильтониан рассматриваемой системы сильно коррелированных электронов нужно представить в виде

$$H = H_0 + \delta H_{int}, \quad (1)$$

здесь $H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}(V) a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma}$ — гамильтониан зонного движения со спектром $\epsilon_{\mathbf{k}}$, рассчитанный в приближении LDA + U + SO, $a_{\mathbf{k}, \sigma}^+(a_{\mathbf{k}, \sigma})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона с квазиимпульсом \mathbf{k} , σ — спиновый индекс.

$$\delta H_{int} = (U_{Fe} - U_{Co}) \langle n \rangle_0 \sum_{\nu} \delta p_{\nu} \delta n_{\nu} / 2 - \sum_{\nu} (U_{Fe}(1 - p_{\nu}) - U_{Co} p_{\nu}) ((S_{\nu}^{(z)})^2 - (\delta n_{\nu})^2 / 4) \quad (2)$$

— гамильтониан внутриатомных корреляций на узле, в котором выделены слагаемые флуктуации электронной плотности, и учтено различие параметров хаббардовского взаимодействия на узлах, оккупированных атомами кобальта или железа (U_{Co} и U_{Fe} — соответственно), $\delta p_{\nu} = p_{\nu} - p$, p — концентрация атомов кобальта, p_{ν} — проекционный оператор, который может принимать значения 0 на узле занятом железом и 1, если узел занят кобальтом ($p_{\nu}^2 = p_{\nu}$),

$$n_{\nu} = \sum_{\sigma} n_{\nu, \sigma}, \quad n_{\nu, \sigma} = a_{\nu, \sigma}^+ a_{\nu, \sigma},$$

$$S_{\nu}^{(z)} = 2^{-1} \sum_{\sigma} \sigma n_{\nu, \sigma}, \quad \delta n_{\nu} = n_{\nu} - \sum_{\sigma} \langle n_{\sigma} \rangle_0.$$

Кроме того, в рассматриваемых киральных ферромагнетиках со структурой B20 гамильтониан (1) следует дополнить слагаемым ДМ-взаимодействия, которое в силу релятивистской малости рассмотрим в приближении среднего поля

$$H \rightarrow H - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)} = [\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{d}_{-\mathbf{q}}]$ — среднее поле Дзялошинского; $\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = id_{\mathbf{q}}$, соответственно; $\mathbf{M}_{\mathbf{q}} (= \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \rangle)$ — вектор неоднородной намагниченности на волновом векторе \mathbf{q} .

Статистическую сумму системы с гамильтонианом (3):

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

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

целесообразно исследовать на основе процедуры, использующей преобразования Стратоновича–Хаббарда [9], которые сводят многочастичные взаимодействия (2) к картине движения коррелированных d -электронов во флуктуирующих в пространстве и времени обменных (ξ) и зарядовых (η) полях. В рассматриваемой задаче „картина“ флуктуирующих обменных полей дополняется статическим полем Дзялошинского и концентрационными флуктуациями обменных полей. При этом для определения статистической суммы электронной системы целесообразно применить мацубаровскую технику для комплексных переменных (см. [10])

$$Z = \int (d\xi d\eta) (d\Omega) \times \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{q}} |\xi_{\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}} \mathbf{h}_{\mathbf{q}} / c|^2 - \sum_{\mathbf{q}} |\eta_{\mathbf{q}}|^2 \right\} Z(\xi_{\mathbf{q}}, \eta_{\mathbf{q}}), \quad (4)$$

где

$$Z(x, \xi, \rho) = Sp T_{\tau} \exp(-T^{-1} H_0(x) - T^{-1} \tilde{\mathcal{H}}_{eff}),$$

$$(d\xi d\eta) = d\xi_0 d\eta_0 \prod_{q \neq 0, j=1, 2} d\xi_q^{(j)} d\eta_q^{(j)}$$

(индекс j нумерует реальную и мнимую части стохастических ξ - и η -полей), T — температура T_{τ} — оператор упорядочения по „мнимому“ мацубаровскому времени τ

$$\tilde{\mathcal{H}}_{eff} = 2 \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + i 2^{-1} \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \eta_{\mathbf{q}}^{(j)},$$

$S_{\mathbf{q}}$ — фурье-образ оператора спиновой плотности на узле, записанного в представлении взаимодействия, $\mathbf{q} = (\mathbf{q}, \omega_{2m})$ — четырех-вектор, включающий ω_{2m} (мацубаровскую Бозе-частоту, m — целое число),

$$\xi_{\mathbf{q}} = (\xi_{\mathbf{q}})^* = c \left(\xi_{\mathbf{q}} e_{\mathbf{q}} + (2U)^{-1} (U_{Co} - U_{Fe}) \sum_{\mathbf{q}'} \delta p_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \xi_{\mathbf{q}'} \right).$$

Вычисление (4) сводится к процедуре квантово-статистического усреднения операторов спиновой и зарядовой плотности при суммировании ряда по степеням обменных и зарядовых полей. При этом, учитывая аномально большие периоды спиновых сверхструктур $Fe_{1-x}Co_xSi$ и аномально сильную зависимость факторов Стонера от квазиимпульсов и частоты, можно ограничиться длинноволновым приближением.

Методы оценок функциональных интегралов для статистической суммы (4) могут быть основаны на использовании приближения седловой точки. В рассматриваемой модели

$$\xi_0^{(y)} \equiv \text{Re } \xi_0^{(y)} (\text{Im } \xi_0^{(y)} = 0), \quad \text{Re } \xi_{\mathbf{q}}^{(y)} \text{ и } \text{Im } \xi_{\mathbf{q}}^{(y)} \text{ с } \mathbf{q} \neq 0, \\ |\xi_{\mathbf{q}}^{(y)}| \text{ с } \mathbf{q} = (\mathbf{q}, \omega_{2n}) \text{ при } \omega_{2n} \neq 0, \eta_0 \quad (5)$$

и связаны с намагниченностью соотношениями

$$M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} = (c/U)\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} - h_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}$$

и

$$|\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}|^2 = 2^{-1} \left(\langle T_{\tau} | S_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}|^2 \rangle + 1 \right), \quad \gamma = (x, y, z).$$

3. Свободная энергия при постоянном давлении

Переходя к термодинамическим потенциалам, учтем известное соотношение между статистической суммой и свободной энергией ($F = T \ln Z - \mu N$), будем принимать во внимание условия перевала для функциональных интегралов (4) по переменным (5). При этом свободную энергию системы коррелированных электронов с зависящим от объема энергетическим спектром $\varepsilon_k(V)$, дополним слагаемым, связанным с упругой деформацией $P = -K\Delta V$ (K — изотермическая сжимаемость).

В итоге для свободной энергии при постоянном давлении имеем выражение

$$F = F_{mag} + F_{el} + F_{fl} - K\Delta V^2/2, \quad (6)$$

где одноэлектронный вклад оказывается перенормированным вследствие расщепления электронных термов флуктуирующими обменными полями

$$F_{el}/U = \sum_{\alpha=(\pm 1)} \int \theta g^{(0)}(\varepsilon + \alpha\theta\langle m \rangle_T) \times \ln(1 + \exp T^{-1}(\mu - \varepsilon)) d\varepsilon, \quad (6a)$$

магнитный вклад включает слагаемые межмодового взаимодействия

$$F_{mag}/U = \sum_{\mathbf{q}} (1 - U\chi^{\pm}(V/V_0)) |\mathbf{M}_{\mathbf{q}}|^2 + \sum_{\mathbf{q}} X(\mathbf{q}, 0) |\mathbf{M}_{\mathbf{q}}|^2 - U^{-1} \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}} \mathbf{M}_{\mathbf{q}} + \kappa \sum_{\mathbf{q}_1 \neq \mathbf{q}_2, \mathbf{q} \neq \mathbf{q}_4} (\mathbf{M}_{\mathbf{q}_1} \mathbf{M}_{\mathbf{q}_2}) (\mathbf{M}_{\mathbf{q}_3} \mathbf{M}_{\mathbf{q}_4}) \times \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4; 0}(V/V_0) + F_{mf1}, \quad (6b)$$

а магнитофлуктуационный вклад описывается выражением

$$F_{fl} = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^{\infty} \text{cth}(\omega/2T) \text{Im} \ln \left(D^{-1} + 2\kappa |M_{\mathbf{q},\gamma}|^2 + X(\mathbf{q}, \omega) \right) d\omega.$$

При этом $g^{(0)}(\varepsilon)$ — рассчитанная в методе LDA + U + SO — плотность электронных d -состояний, $D(V) = (1 - U\theta\chi^{\pm} + 3^{-1}\theta\kappa\langle m \rangle_T^2)^{-1}$ — фактор обменного усиления магнитной восприимчивости, в приближении среднего поля совпадающий с фактором Стонера, $\kappa = U\langle m \rangle_T^{-2}(\chi^{\pm} - \chi^{(ll)})$ — коэффициент межмодовой связи, который в приближении среднего поля сводится к

коэффициенту при четвертой степени параметра порядка в разложении Гинзбурга–Ландау, зависимость которого от намагниченности определяется магнитообъемным эффектом

$$\chi^{(\perp)}(V) = \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\alpha} \left(f(\varepsilon_{k,\alpha}(V) - \mu) - f(\varepsilon_{k+q,-\alpha}(V) - \mu) / (\varepsilon_{k\alpha}(V) - \varepsilon_{k+q-\alpha}(V)) \right),$$

$$\chi^{(ll)}(V) = \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\alpha} \left(f(\varepsilon_{k,\alpha}(V) - \mu) - f(\varepsilon_{k+q;\alpha}(V) - \mu) / (\varepsilon_{k\alpha}(V) - \varepsilon_{k+q-\alpha}(V)) \right)$$

— поперечная и продольная восприимчивости как функции мацубаровской частоты, $\varepsilon_{k\alpha}(V) = \varepsilon_k - \alpha\Theta U\langle m \rangle_T$, $\alpha = \pm 1$, μ — химический потенциал, амплитуда тепловых флуктуаций

$$\langle m^2 \rangle_T = (3T^2/4U^2)\Theta C \left\{ (D^{-1} + 2\kappa(V)M_S^2)^2 + \Theta^2 A^2/2 \right\}^{-1}, \quad (7)$$

A и C — значения коэффициентов при второй степени волнового вектора и первой степени частоты в разложении функции Линдхарда (см. например, [9]) соответственно.

4. Уравнения состояния

Возможные спиновые конфигурации и связанные с ними объемные эффекты можно получить, минимизируя (9) одновременно по локальной намагниченности и объему. При этом получаем, что уравнение магнитного состояния

$$M_{\mathbf{q}_0}^{(\gamma)} \left(D^{-1}(V) + \kappa(V/V_0)(1 + x(1-x)(2U)^{-1} \times (U_{Co} - U_{Fe})) \sum_{\mathbf{q}=\pm\mathbf{q}_0} |M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)}|^2 + X(\mathbf{q}_0, 0) \right) = 2h_{\mathbf{q}_0,\gamma}/U \quad (8)$$

следует дополнить соотношением для равновесного объема ($V = V_0 + \Delta V$), связанного с магнитообъемным эффектом

$$\Delta V(T)/V_0 = K^{-1}U^{-1} \left(\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}^2 + (2U)^{-2}(U_{Co} - U_{Fe})^2 \times \sum_{\mathbf{q}'} \langle \delta p_{\mathbf{q}_0+\mathbf{q}'}^2 \rangle |M_{\mathbf{q}'}|^2 + \langle m^2 \rangle_T \right). \quad (9)$$

Решения уравнений (8), (9) учитывают взаимозависимости объема и намагниченности. В области значений температур $T < T_c$ и объемов $V < V_c$, для которых выполняется условие $D^{-1} < -5d\Theta/(4AU^2)$, возможны как лево-, так и правокиральные спиновые спирали

$$M_{\mathbf{v}}^{(\pm)} = \pm M_S \exp(\mathbf{q}_0 \mathbf{v}), \quad (10a)$$

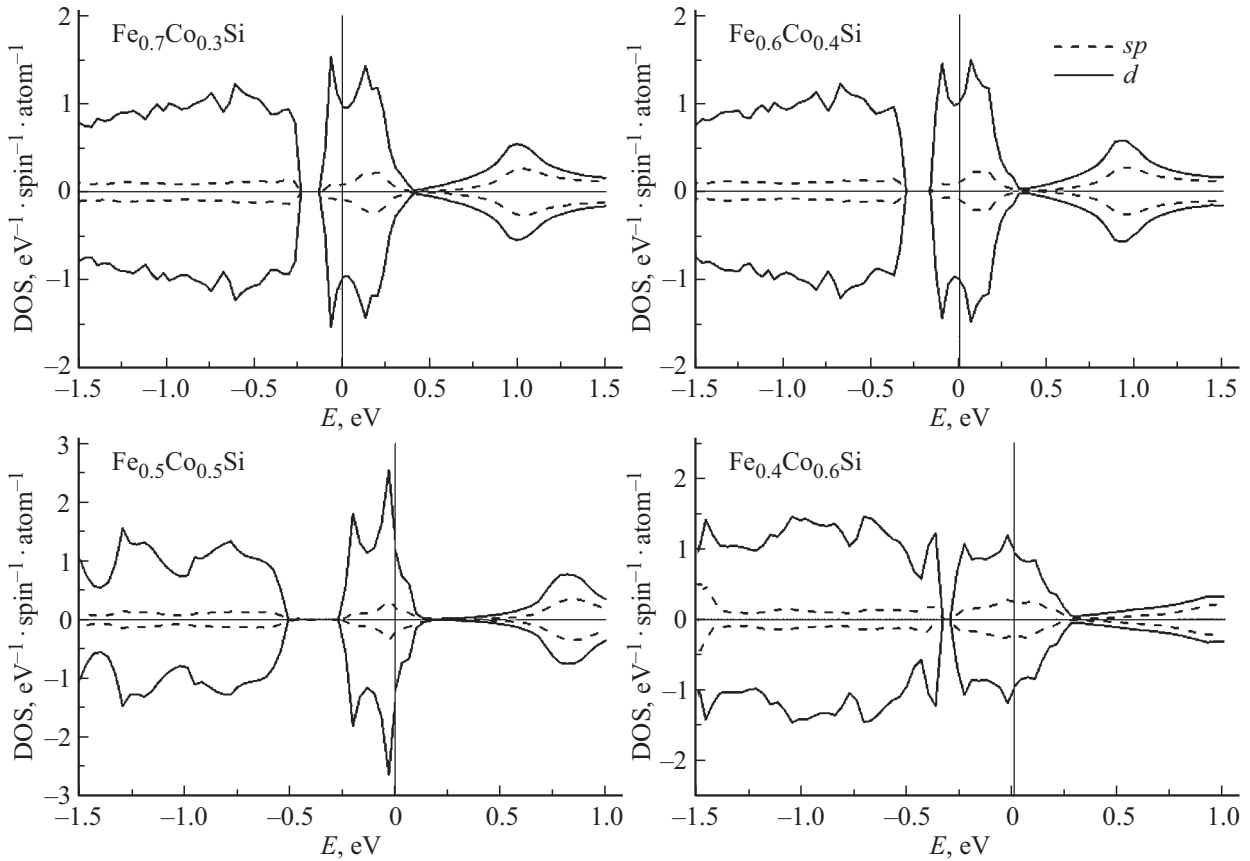


Рис. 1. Плотности электронных состояний сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$, рассчитанные в методе LDA + U + SO. Положение химического потенциала совпадает с началом отсчета энергии. Плотность состояний sp -электронов увеличена в три раза. Параметры хаббардовского взаимодействия вычислялись в приближении виртуального кристалла: $U = (1 - x)U_{Fe} + xU_{Co}$, $U_{Co} = 2.4$ eV, $U_{Fe} = 1.2$ eV, x — концентрация кобальта.

причем

$$\Delta V(T)/V_0 = K^{-1}U^{-1}(M_S^2(T, V) + \langle m^2 \rangle_T), \quad (10b)$$

$$M_S(T, V)^2 = (2\kappa(T, V))^{-1}((D^{-1}(T, V) + X_q)^2 - (d|\mathbf{q}_0|/U)^2). \quad (11)$$

При $0 > D^{-1} > -5d\Theta/(4AU^2)$, в случае отрицательных значений параметра мода-мода $R_C \sim \chi(U + x(1 - x) \times (2)^{-1}(U_{Co} - U_{Fe}))$ и возникают флуктуации спиновой спирали, начальные фазы которых определяются разностями фаз Берри:

$$M_v^{(\pm)} = \pm M_S \exp(\mathbf{q}_0 \mathbf{v} + \varphi), \quad (12a)$$

$$\Delta V/V_0 \approx (3KU/5)^{-1}(\langle m \rangle_T^2 - U^{-1}(U_{Co} - U_{Fe})x(1 - x)M_S^2). \quad (12b)$$

При этом волновой вектор спиновых спиралей и флуктуаций спиралей определяется единым выражением

$$|\mathbf{q}_0(V)| = d/(U^2\theta g_0(\theta\epsilon_F)),$$

и слабо зависит от объема и температуры.

5. Результаты численного анализа

Для численного анализа магнитных фазовых переходов на основе условий минимизации свободной энергии воспользуемся результатами первопринципных LDA + U + SO — расчетов DOS $Fe_{1-x}Co_xSi$. На рис. 1 эти результаты приводятся для $x = 0.3, 0.4, 0.5$ и 0.6 , рассчитанные при атмосферном давлении. Зависимости химического потенциала составов с различными x от температуры и объема определяются из условий электронейтральности (которое для d -электронов соответствует условию перевала по зарядовой переменной η_0) учетом расчетов DOS s -, p - и d -электронов

$$N = \int d\epsilon g^{(s,p)}(\epsilon) f_F(\epsilon - \mu) + \theta \sum_{\alpha} \int d\epsilon g^{(0)}(\epsilon + \alpha\theta \langle m \rangle_T) f_F(\epsilon - \mu). \quad (13)$$

Температурное изменение намагниченности при затянутых по температуре фазовых переходах в сплавах $Fe_{1-x}Co_xSi$ с $0.2 < x < 0.6$ вместе с результатами расчетов магнитного вклада в ОКТР приводится на вставках к рис. 2, 3 и 4. При этом показано что магнитообъемные

эффекты и тепловое расширение приводят к увеличению T_s и температурному интервалу ближнего порядка с ненулевой локальной намагниченностью. Влияние объемных эффектов здесь проявляется через зависимость от объема фактора обменного взаимодействия $D(T, V)$, которое вблизи точки исчезновения локальной намагниченности (T_s) должно быть аномально сильным, тогда как влиянием объема на T_c и R_c можно пренебречь.

Возникающие как в области дальнего так и ближнего порядков магнитообъемные эффекты приводят к магнитному вкладу в ОКТР сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$, и определяют температурное изменение нерешеточного ОКТР на фоне плавного (примерно по закону T^3) температур-

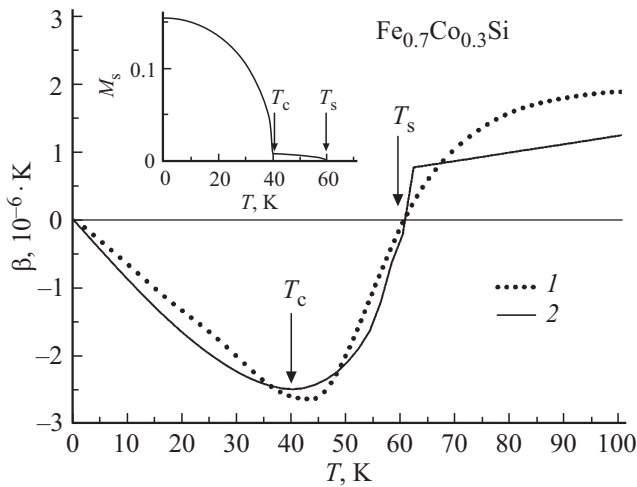


Рис. 2. Температурная зависимость ОКТР сплава $Fe_{0.7}Co_{0.3}Si$: 1 — нерешеточный вклад в ОКТР, полученный в [11] после обработки экспериментальных данных, 2 — расчет в настоящей работе. На вставке: температурная зависимость намагниченности.

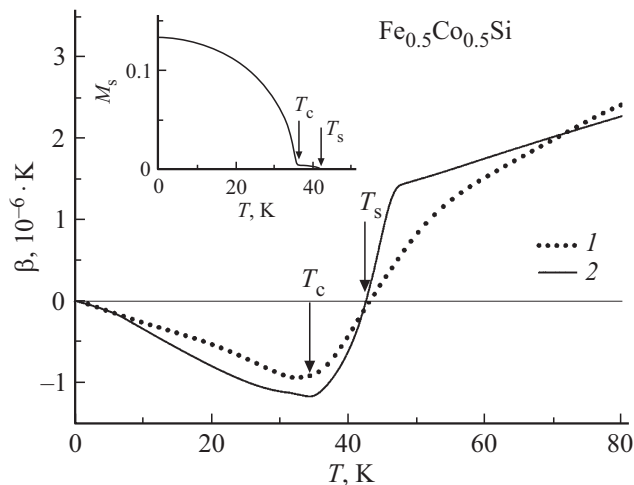


Рис. 3. Температурная зависимость ОКТР сплава $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$: 1 — нерешеточный вклад в ОКТР, полученный в [11] после обработки экспериментальных данных, 2 — расчет в настоящей работе. На вставке: n — температурная зависимость намагниченности.

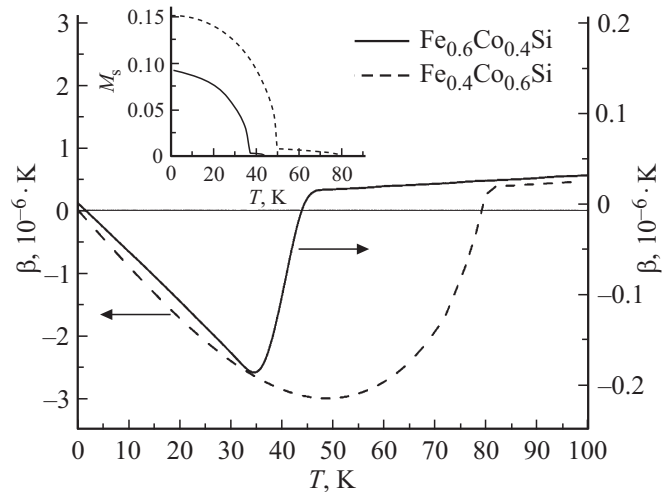


Рис. 4. Результаты моделирования температурной зависимости ОКТР сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$ $x = 0.4$ (ось слева), 0.6 (ось справа). На вставке: температурная зависимость намагниченности.

ного изменения решеточной составляющей. Магнитоэлектронный вклад в ОКТР: $\beta = \partial\omega/\partial T = \beta_{el} + \beta_{mag}$. При этом магнитный вклад определяется локальной намагниченностью M_s и среднеквадратическим магнитным моментом

$$\langle M^2 \rangle = \langle m^2 \rangle_T + \frac{U_{Co} - U_{Fe}}{U} x(1-x)M_s^2.$$

В области дальнего порядка ($T < T_c$)

$$\beta_m = 10(3K)^{-1}U(\partial M_s^2/\partial T)(2\langle m \rangle_T^2 + M_s^2), \quad (14a)$$

а в интервале температур фазового перехода определяется выражением

$$\beta_m = 10(3K)^{-1}Ux(1-x) \times ((\partial M_s^2/\partial T)\langle M^2 \rangle + AR_C^{-1}(\partial M_s^2/\partial T)), \quad (14b)$$

электронный вклад в ОКТР, связанный с фермиевскими возбуждениями

$$\beta_{el} = -\frac{5}{3K}T^{-2} \sum_{\alpha=\pm 1} \int g_0(\epsilon)(\epsilon - \mu - \alpha Um)^2 \times f'(\epsilon - \mu - \alpha Um)d\epsilon \approx \frac{5}{3K}Tg_0(\mu),$$

оказывается пренебрежимо малым. Результаты расчетов температурной зависимости ОКТР в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 2, 3 и 4. Там же приводятся рассчитанные значения температур T_c и T_s . Проведенный численный анализ показывает, что наблюдаемый на эксперименте отрицательный вклад в ОКТР увеличивается по модулю вплоть до температуры T_c (см. (14a)). Далее вследствие резкого (но непрерывного!) изменения температурной зависимости локальной

намагниченности (вставки к рис. 2, 3, 4) и знака параметра мода-мода, реализуется механизм температурной зависимости ОКТР, связанный с флуктуационным ближним порядком (14b) (рис. 2, 3, 4). Вследствие исчезновения локальной намагниченности в точке T_s , в парамагнитной фазе знак ОКТР оказывается положительным.

6. Заключение

Таким образом, изменение знака параметра межмодового взаимодействия и флуктуации хаббардовских потенциалов в киральных ферромагнитных квазибинарных сплавах со структурой B20, приводят к затянутым по температуре фазовым переходам, при которых имеет место самосогласованное изменение локальной намагниченности и объема (магнитообъемный эффект). При этом, если в области дальнего порядка магнитообъемный эффект определяется амплитудой геликоидальных спиновых спиралей, то в области ближнего порядка этот эффект связан с амплитудой флуктуаций спиновых спиралей (которые реализуются в пространственных областях радиуса спиновых корреляций R_c). Величина магнитообъемного эффекта является одним из факторов, определяющих верхнюю границу (T_s) температурного интервала кирального ближнего порядка.

Причиной отрицательных ОКТР являются магнитообъемные эффекты. Поэтому отрицательные ОКТР имеют место не только в области геликоидального ферромагнитного упорядочения, но и в условиях неустойчивого ферромагнетизма (отрицательный параметр мода-мода), при котором имеет место возникновение вихревых спиновых микроструктур. Также как и в инварных ферромагнетиках (таких, как например железоникелевые сплавы [12]) здесь возникает объемная неустойчивость микроструктур, а магнитообъемные эффекты оказываются обусловленными флуктуациями хаббардовских потенциалов внутриатомного электрон-электронного отталкивания. В то же время влияние объемных эффектов на магнитные характеристики, в отличие от инварных сплавов, в топологически защищенных микроструктурах является слабой, за исключением температур близких к T_s , при которых вклад в свободную энергию, связанный с ДМ-взаимодействием, и локальная намагниченность исчезают.

Особый интерес представляет изучение объемных эффектов и спиновых скирмионов при затянутых магнитных фазовых переходах в сплавах на основе моногерманидов переходных металлов (например, FeGe [13]), которые, как известно, могут обладать значительно более высокими (по сравнению с твердыми растворами моносиллицидов железа, кобальта и марганца) значениями температур Кюри–Нееля. Однако, для таких систем изучение природы дальнего порядка требует отдельного рассмотрения, поскольку возникает необходимость исследования картины закручивания спиновых спиралей [14], являющихся причиной повышенных значений T_c в геликоидальных ферромагнетиках.

Финансирование работы

Результаты были получены в рамках задания министерства образования и науки Российской Федерации FEUZ-2020-0020.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Beille, J. Voiron, F. Towfiq, M. Roth, Z.Y. Zhang. *J. Phys. F* **11**, 2153 (1981).
- [2] M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Boni, C. Pfleiderer. *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
- [3] A. Bauer, M. Garst, C. Pfleiderer. *Phys. Rev. B* **93**, 235144 (2016).
- [4] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. *УФН* **181**, 11, 1157 (2011).
- [5] А.А. Повзнер, А.Г. Волков, Т.А. Ноговицына, С.А. Бессонов. *ФТТ* **62**, 1, 71 (2020).
- [6] П.В. Гельд, А.А. Повзнер, С.В. Кортов, Р.П. Кренцис. *ДАН СССР* **297**, 1359 (1987).
- [7] V.V. Mazurenko, A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, K. Kharlov, E. Gorelov, A.I. Lichtenstein, V.I. Anisimov. *Phys. Rev. B* **81**, 125131 (2010).
- [8] V. Heine. *Phys. Rev.* **153**, 673 (1967).
- [9] T. Moriya. *Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*. Springer-Verlag, Berlin (1985). P. 242.
- [10] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Физматгиз, М. (1962) 444 с.
- [11] А.А. Povzner, A.N. Filanovich, T.A. Nogovitsyna. *Phys. Status Solidi B* **254**, 9, 1700034 (2017).
- [12] Mark van Schilfgaarde, I.A. Abrikosov, B. Johansson. *Nature* **400**, 46 (1999).
- [13] X.Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W.Z. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui, Y. Tokura. *Nature Mater.* **10**, 106 (2011).
- [14] S. Grytsiuk, S. Blügel. *Phys. Rev. B* **104**, 064420 (2021).

Редактор Т.Н. Василевская