01,11

Магнитообъемные эффекты и тепловое расширение в киральных геликоидальных ферромагнетиках $Fe_{1-x}Co_xSi$

© 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 магнитобъемных эффектов в киральных геликоидальных ферромагнетиках. На примере $Fe_{1-x}Co_xSi$ 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 $Fe_{1-x}Co_xSi$ [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 кирального 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 $Fe_{1-x}Co_xSi$, возникающие при постоянном давлении.

2. Модель

Рассмотрим сильно коррелированную электронную систему киральных ферромагнетиков $Fe_{1-x}Co_xSi$ с гамильтонианом, 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 $\varepsilon_{\mathbf{k}}(V{=}\theta^{-1}\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}$, где $\theta = (V/V_0)^{5/3}$.

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

$$H = H_0 + \delta H_{\text{int}}, \tag{1}$$

здесь $H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}(V) a^+_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}$ — гамильтониан зонного движения со спектром $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, 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.

$$\delta H_{\text{int}} = (U_{\text{Fe}} - U_{\text{Co}})\langle n\rangle_0 \sum_\nu \delta p_\nu \delta n_\nu/2$$

$$- \sum_\nu \big(U_{\text{Fe}}(1-p_\nu) - U_{\text{Co}} p_\nu\big)\big((S_\nu^{(z)})^2 - (\delta n_\nu)^2/4\big) \tag{2}$$

— 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

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

Здесь $\mathbf{h}_{\mathbf{q}}^{(D)} = [\mathbf{M}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{d}_{-\mathbf{q}}]$ — среднее поле Дзялошинского; $\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = i d\mathbf{q}$, 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):

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

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

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])

$$Z = \int (d\xi d\eta)(d\Omega)$$

$$\times \exp\left\{ -\sum_q |\xi_q - \delta_{q,\mathbf{q}} \mathbf{h}_{\mathbf{q}}/c|^2 - \sum_q |\eta_q|^2 \right\} Z(\xi_q, \eta_q), \tag{4}$$

где

$$Z(x, \xi, \rho) = SpT_\tau \exp(-T^{-1}H_0(x) - T^{-1}\tilde{\mathscr{H}}_{\text{eff}}),$$

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

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

$$\tilde{\mathscr{H}}_{\text{eff}} = 2\sum_q \mathbf{S}_q \xi_{-q} + i2^{-1} \sum_q n_q \eta_q^{(j)},$$

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

$$\zeta_q = (\xi_q)^* = c\Big(\xi_q e_q + (2U)^{-1}(U_{\text{Co}} - U_{\text{Fe}}) \sum_{q'} \delta p_{q+q'} \xi_{q'}\Big).$$

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

$$\xi_0^{(\gamma)} \equiv \operatorname{Re}\xi_0^{(\gamma)} (\operatorname{Im}\xi_0^{(\gamma)} = 0),\ \operatorname{Re}\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} \text{ и } \operatorname{Im}\xi_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} \text{ с } \mathbf{q} \neq 0,$$

$$|\xi_q^{(\gamma)}| \text{ с } q = (\mathbf{q}, \omega_{2n}) \text{ при } \omega_{2n} \neq 0, \eta_0 \tag{5}$$

и связаны с намагниченностью соотношениями

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

и

$$|\xi_q^{(\gamma)}|^2 = 2^{-1}\Big(\langle T_\tau |S_q^{(\gamma)}|^2\rangle + 1\Big), \ \gamma = (x, y, z).$$

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

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

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

$$F_{el}/U = \sum_{\alpha(=\pm1)} \int \theta g^{(0)}(\varepsilon + \alpha\theta\langle m\rangle_T) \times \ln\big(1 + \exp T^{-1}(\mu - \varepsilon)\big)d\varepsilon, \qquad (6a)$$

магнитный вклад включает слагаемые межмодового взаимодействия

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

а магнитофлуктуационный вклад описывается выражением

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

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

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

$$\chi^{(\parallel)}(V) = \lim_{q\to 0}\sum_{\alpha}\Big(f\big(\varepsilon_{k,\alpha}(V) - \mu\big) - f\big(\varepsilon_{k+q;\alpha}(V) - \mu\big)/\big(\varepsilon_{k\alpha}(V) - \varepsilon_{k+q-\alpha}(V)\big)\Big)$$

— поперечная и продольная восприимчивости как функции мацубаровской частоты, $\varepsilon_{k\alpha}(V) = \varepsilon_k - \alpha\Theta U\langle m\rangle_T$, $\alpha = \pm1, \mu$ — химический потенциал, амплитуда тепловых флуктуаций

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

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

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

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

$$\Delta V(T)/V_0 = K^{-1}U^{-1}\Big(\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}^2 + (2U)^{-2}(U_{\mathrm{Co}} - U_{\mathrm{Fe}})^2 \times \sum_{q'}\langle\delta p_{q_0+q'}^2\rangle|M_{q'}|^2 + \langle m^2\rangle_T\Big). \qquad (9)$$

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

$$M_\nu^{(\pm)} = \pm M_S\exp(\mathbf{q}_0\boldsymbol{\nu}), \qquad (10a)$$

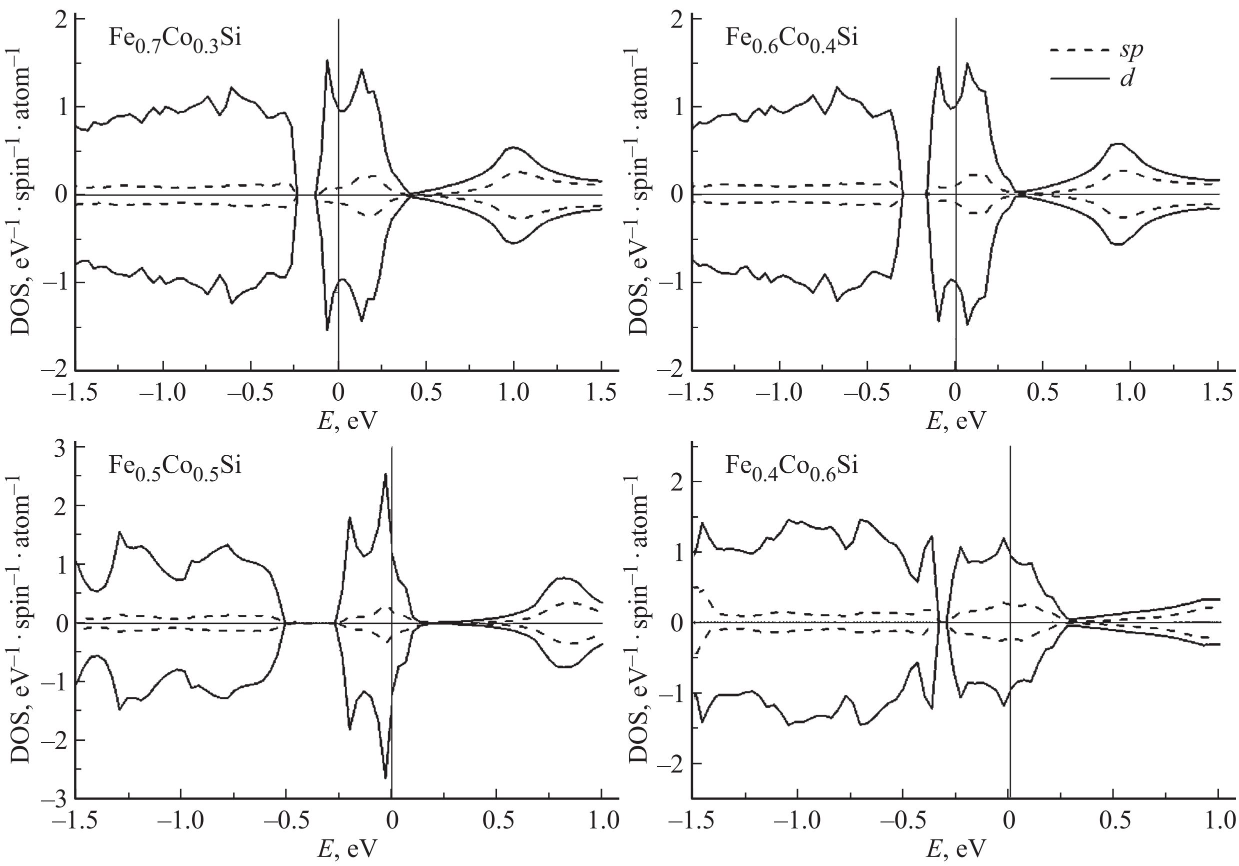

Рис. 1. Плотности электронных состояний сплавов $Fe_{1-x}Co_xSi$, рассчитанные в методе LDA + U + SO. Положение химического потенциала совпадает с началом отсчета энергии. Плотность состояний *sp*-электронов увеличена в три раза. Параметры хаббардовского взаимодействия вычислялись в приближении виртуального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

причем

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

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

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

$$M_\nu^{(\pm)} = \pm M_S \exp(\mathbf{q}_0\boldsymbol{\nu} + \varphi), \qquad (12a)$$

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

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

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

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

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

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 $\mathrm{Fe}_{1-x}\mathrm{Co}_x\mathrm{Si}$, и определяют температурное изменение нерешеточного ОКТР на фоне плавного (примерно по закону T^3) температур-

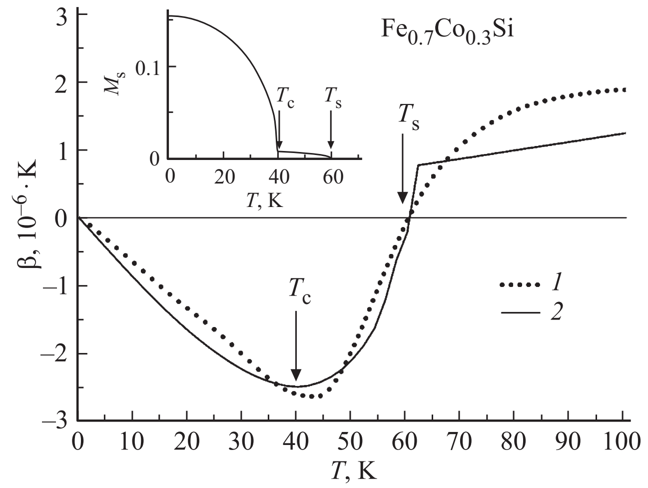

Рис. 2. Температурная зависимость ОКТР сплава $\mathrm{Fe}_{0.7}\mathrm{Co}_{0.3}\mathrm{Si}$: *1* — нерешеточный вклад в ОКТР, полученный в [11] после обработки экспериментальных данных, *2* — расчет в настоящей работе. На вставке: температурная зависимость намагниченности.

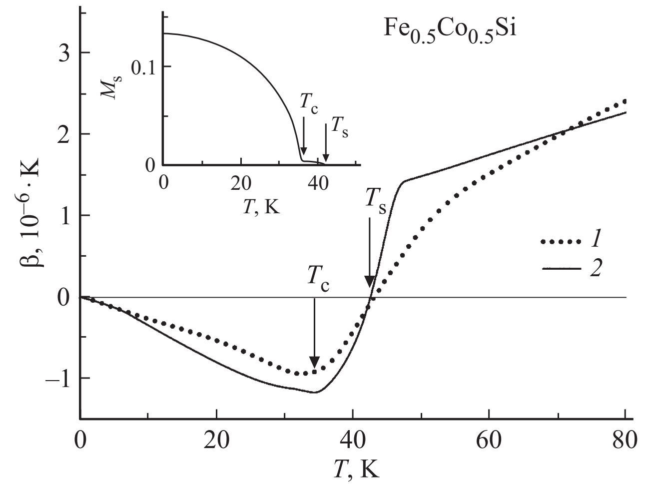

Рис. 3. Температурная зависимость ОКТР сплава $\mathrm{Fe}_{0.5}\mathrm{Co}_{0.5}\mathrm{Si}$: *1* — нерешеточный вклад в ОКТР, полученный в [11] после обработки экспериментальных данных, *2* — расчет в настоящей работе. На вставке: *n* — температурная зависимость намагниченности.

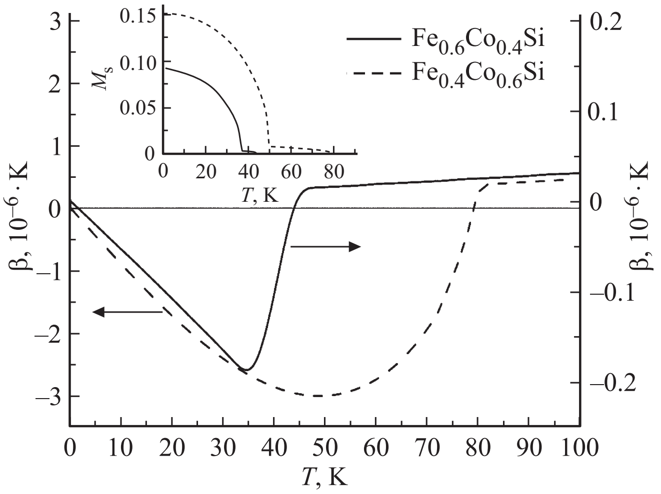

Рис. 4. Результаты моделирования температурной зависимости ОКТР сплавов $\mathrm{Fe}_{1-x}\mathrm{Co}_x\mathrm{Si}$ $x = 0.4$ (ось слева), 0.6 (ось справа). На вставке: температурная зависимость намагниченности.

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

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

В области дальнего порядка $(T < T_c)$

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

а в интервале температур фазового перехода определяется выражением

$$\beta_m = 10(3K)^{-1} U x(1-x) \times \left((\partial M_S^2/\partial T)\langle M^2 \rangle + A R_C^{-1} (\partial M_S^2/\partial T) \right), \qquad (14b)$$

электронный вклад в ОКТР, связанный с фермиевскими возбуждениями

$$\beta_{el} = -\frac{5}{3K} T^{-2} \sum_{\alpha=\pm1} \int g_0(\varepsilon)(\varepsilon - \mu - \alpha U m)^2 \times f'(\varepsilon - \mu - \alpha U m) d\varepsilon \approx \frac{5}{3K} T g_0(\mu),$$

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 моносилицидов 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] A.A. Povzner, A.N. Filanovich, T.A. Nogovitcyna. 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