

01,05

Магнитный фазовый переход в MnSi на основе LSDA + U + SO-расчетов электронной структуры и спин-флуктуационной теории

© А.А. Повзнер, А.Г. Волков, Т.М. Нуретдинов, Т.А. Ноговицына

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

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

(Поступила в Редакцию 12 апреля 2018 г.)

На основе спин-флуктуационной теории и LSDA + U + SO-расчетов электронной структуры исследуются спиновые состояния, возникающие в области магнитного фазового перехода в геликоидальном ферромагнетике MnSi. Получена температурная зависимость однородной магнитной восприимчивости вблизи температуры магнитного фазового перехода, которая находится в хорошем согласии с экспериментом. Определены спиновые корреляторы, соответствующие различным решениям уравнения магнитного состояния в области затагнутого по температуре магнитного фазового перехода. Показано, что в этой области возникает геликоидальный ближний порядок в виде суперпозиции левых и правых спиновых спиралей со стохастическими весовыми коэффициентами. Получено, что при температуре исчезновения локальной намагниченности и переходе в парамагнитное состояние возникает расхожимость магнитной восприимчивости на волновом векторе геликоида.

Результаты были получены в рамках задания Министерства образования и науки Российской Федерации, контракт 3.9521.2017/8.9.

DOI: 10.21883/FTT.2018.10.46512.105

1. Введение

Киральный ферромагнитный геликоид MnSi имеет структурный тип B20 и относится к пространственной группе $P2_13$, для которой характерно отсутствие центра инверсии [1,2]. Вследствие такой симметрии возникает антисимметричный релятивистский обмен Дзялошинского–Мории (ДМ) [3,4], который совместно с неоднородным обменным взаимодействием приводит к возникновению спиновой спирали с периодом 180 \AA [5], описываемой моделью Янсена–Бака [5].

При нейтронографических исследованиях [6] получены указания на то что, при магнитном фазовом переходе в MnSi возникают киральные флуктуации осей квантования, что не согласуется с моделью Янсена–Бака [5]. В работе [2] делается вывод о том, что в MnSi происходит фазовый переход первого рода, индуцированный флуктуациями. Интерпретация такого сценария фазового перехода строится по аналогии с теорией Бразовского [7,8] для немагнитных фазовых переходов. Считается, что фазовый переход первого рода, вызванный флуктуациями, является следствием неаналитического слагаемого в функционале свободной энергии Гинзбурга–Ландау, которое образуется поправками, вызванными взаимодействием различных мод флуктуаций. Такая, обусловленная межмодовым взаимодействием спиновых флуктуаций, поправка приводит вместо фазового перехода второго рода к фазовому переходу первого рода [7]. Однако величина зависящего от температуры параметра межмодового взаимодействия, определяется

электронной структурой, параметрами межэлектронного взаимодействия и магнитными моментами основного состояния, которые окончательно не определены. Спиновые корреляции в окрестности T_C , которые приводят к возникновению области киральных флуктуаций [6,9] и к их кроссоверу с ферромагнитными флуктуациями, исследованы недостаточно. Не рассмотрен вопрос о возможной аномалии температурной зависимости неоднородной магнитной восприимчивости при переходе в парамагнитное состояние.

В работе [10] было указано на значительные нулевые спиновые флуктуации, которые возникают в основном состоянии MnSi, и резко, почти „скачкообразно“ исчезают вблизи (чуть ниже) температуры максимума магнитной восприимчивости, при которой параметр межмодового взаимодействия меняет знак. Однако при этом развивалась численная модель, основанная на описании основного состояния в методе LDA + U + SO, т.е. без учета возникновения энергетической раздвижки между подзонами с разными спинами. Полученная в рамках развитого в [10] на основе LDA + U + SO феноменологического подхода величина максимума однородной магнитной восприимчивости вблизи температуры магнитного фазового перехода значительно превышала экспериментально наблюдаемое значение. Кроме того, не был решен вопрос о величине магнитных моментов основного состояния, которые трактовались как среднеквадратические, что ставит под вопрос и корректность численной оценки амплитуды нулевых спиновых флуктуаций. К тому же, в рамках первопринципных

GGA + U-расчетов [11] был получен ряд возможных электронных структур, отличающихся параметрами хаббардовского взаимодействия и магнитных моментов. При этом не ясно как эти результаты согласуются с экспериментальными данными о фазовом переходе, в частности об аномалии магнитной восприимчивости.

В настоящей работе значения параметра хаббардовского взаимодействия [11], соответствующие возможным моделям электронной структуры, воспроизведены с помощью LDA + U + SO-расчетов электронной структуры основного ферромагнитного состояния. При этом определены соответствующие им значения параметров хундовского взаимодействия, оцениваются значения амплитуды нулевых и тепловых спиновых флуктуаций. Уточнение (по сравнению с [11]) значений параметров модели электронной структуры на основе использования LSDA + U + SO-расчетов позволяет получить количественное согласие с наблюдаемой аномалией магнитной восприимчивости. Описаны парные межузельные спиновые корреляции, при которой возникают киральные флуктуации, наблюдаемые при магнитном фазовом переходе в MnSi.

2. Производящий функционал

Гамильтониан сильно коррелированной электронной системы с учетом хаббардовского и хундовского взаимодействий можно записать в виде

$$H = H_0 + \delta H_U, \quad (1)$$

где наряду с гамильтонианом H_0 , используемым в методе LSDA + U + SO, рассматривается поправка, учитывающая электронные флуктуации

$$\delta H_U = \frac{1}{4} \sum_q \left[(U - J/2) |\delta n_q|^2 - (U + J) \sum_m |\delta n_{q,m}|^2 \right] - \sum_q \left[J \left| \delta S_q^{(z)} \right|^2 + (U - J) \sum_m \left| \delta S_{q,m}^{(z)} \right|^2 \right], \quad (2)$$

где U и J — параметры хаббардовского и хундовского взаимодействий соответственно, $\delta n_{\mathbf{q}} = \sum_m \delta n_{\mathbf{q}m}$, $\Delta S = \sum_m \delta S_{\mathbf{q}m}^{(z)}$, $\delta n_{\mathbf{q},m} = \sum_{\sigma} n_{\mathbf{q},m,\sigma} - \delta_{q,0} N_m^{(LDA)}$, $n_{\mathbf{q},m,\sigma} = a_{\mathbf{k},m,\sigma}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},m,\sigma}$, $a_{\mathbf{k},m,\sigma}^+ (a_{\mathbf{k},m,\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) в состоянии с квазиимпульсом \mathbf{k} и магнитным и спиновым квантовыми числами m и σ , $\delta S_{\mathbf{q},m}^{(z)} = S_{\mathbf{q},m}^{(z)} - \delta_{q,0} M_m^{(LDA)}$, $S_{\mathbf{q},m}^{(z)} = \sum_{\sigma} \sigma n_{\mathbf{q},m,\sigma} / 2$, а $M_m^{(LDA)}$ и $N_m^{(LDA)}$ — средние значения операторов спиновой и зарядовой плотностей в приближении среднего поля.

Переходя к учету спиновых флуктуаций в выражении статистической суммы, воспользуемся мацубаровским представлением взаимодействия (см., например, [11]): $Z = \text{Sp} T_{\tau} \exp \left(- \int_0^{\beta} H(\tau) d\tau \right)$, где $\beta = 1/T$, T_{τ} — оператор упорядочения по мацубаровскому времени τ , $H(\tau) = e^{H_0 \tau} H e^{-H_0 \tau}$ — гамильтониан (1) в

мацубаровском представлении взаимодействия. В соответствии с [10,12], учет многочастичных кулоновских взаимодействий (δH_U) можно свести к рассмотрению движения свободных электронов во флуктуирующих обменных и зарядовых полях (преобразования Стратоновича–Хаббарда).

Если в выражении для Z [10] произвести замену H на $H(\mathbf{h}) = H - \sum_{\mathbf{q},m} S_{\mathbf{q},m} \mathbf{h}_{\mathbf{q},m}$, то можно получить производящий функционал $Z(\mathbf{h})$, производные которого по $\mathbf{h}_{\mathbf{q},m}$ дают выражения для статических и динамических спиновых корреляторов

$$Z(\mathbf{h}) = \int_{-\infty}^{\infty} (d\xi, d\eta) \exp(-\Phi(\xi, \eta)/T) \times \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{q},m} |\eta_{\mathbf{q},m}|^2 - b \left| \sum_{\mathbf{q},m} \eta_{\mathbf{q},l,m} \right|^2 - (ic/T) \sum_m \eta_{0,m} N_m^{(0)} \right\} \times \exp \left\{ - a \left| \sum_{\mathbf{q},m} (\xi_{\mathbf{q},m} - c^{-1} \mathbf{h}_{\mathbf{q},m}) \right|^2 - \sum_{\mathbf{q},m} |\xi_{\mathbf{q},m} - c^{-1} \mathbf{h}_{\mathbf{q},m}|^2 \right. \\ \left. + 2(c/T) \sum_m \left(M_m^{(0)} - \Delta/U \right) \left(\xi_{0,m,z} - c^{-1} h_{0,m}^{(z)} \right) \right\}. \quad (3)$$

Здесь T — температура в энергетических единицах, $a = JU(U - J)^{-1}(U + 5J)^{-1}$, $b = 4U(U - 5J)^{-1}$, $c = U^{1/2} T^{1/2}$, $\Phi(\xi, \eta) = -T \ln \{ \text{Sp} T_{\tau} \exp(-H_{\text{eff}}(\xi, \eta)/T) \}$ — функционал свободной энергии электронов, движущихся в одной из конфигураций стохастических обменных (ξ) и зарядовых (η) полей, $q = (\mathbf{q}, \omega_n)$ — 4-вектор, включающий в себя мацубаровскую бозевскую частоту (ω_n),

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k,m,\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k},m}^{(0)} a_{k,m,\sigma} + c \sum_{v,m} \mathbf{S}_{v,m} + (i/2) \eta_{v,m} m_{v,m} \quad (4)$$

— эффективный гамильтониан.

Для того чтобы описать ферромагнитное геликоидальное упорядочение, выражение (4), полученное выше, должно быть скорректировано учетом взаимодействия Дзялошинского–Мории, которое вследствие его релятивистской малости опишем в приближении среднего поля. Для этого выполним следующую замену

$$H_{\text{eff}} \rightarrow H_{\text{eff}} - \sum_m \left[\mathbf{h}_{\mathbf{q},m}^{(D)} \times \mathbf{S}_{-\mathbf{q},m} \right]$$

и

$$\xi_{\mathbf{q},m} = \xi_{\mathbf{q},m} - \delta_{\omega_n,0} \mathbf{h}_{\mathbf{q},m}^{(D)} / c. \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{h}_{\mathbf{q},m}^{(D)} = [\mathbf{M}_{\mathbf{q},m} \times \mathbf{d}_{\mathbf{q}}]$ — вектор поля Дзялошинского, $\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = i d \mathbf{q}$, d — константа взаимодействия Дзялошинского, $\mathbf{M}_{\mathbf{q},m}$ — вектор фурье-образа неоднородной намагнитченности на векторе \mathbf{q} .

При вычислении функциональных интегралов в (3) воспользуемся методом перевала по статическим ($\omega_n = 0$) $\xi_{0,m}$, $\text{Re} \xi_{\mathbf{q},m,\gamma}$, $\text{Im} \xi_{\mathbf{q},m,\gamma}$, $\eta_{0,m}$ и динамическим ($\omega_n \neq 0$) $\eta_{\mathbf{q}m}$, $|\xi_{\mathbf{q},m,\gamma}|$, $\varphi_{\mathbf{q},m,\gamma}^{(y)} (= \arg \xi_{\mathbf{q},m,\gamma})$ переменным, значения

которых определяются условиями максимума подынтегральной функции. При этом перевальное значение модуля случайного поля $r_{q,m,\gamma} (= |\xi_{q,m,\gamma}|)$, определяется уравнением

$$2r_{q,n,\gamma}^2 (D_\gamma^{-1} + a + 2\kappa|M_{q_0,m,\gamma}|^2 + X_q) = 1, \quad (6)$$

а $D_\gamma^{-1} = 1 - \chi_\perp + \kappa\langle M_\gamma^2 \rangle$ — фактор обменного усиления, $\kappa = (U^3/M^2)[\chi_\perp - \chi_\parallel]$ — параметр межмодового взаимодействия, причем поперечная и продольная восприимчивости определяются выражениями

$$\chi_\perp = (2UM)^{-1}\Delta n \quad \text{и} \quad \chi_\parallel = 2 \left(\sum_{\alpha=\pm 1} g_\alpha(\mu) \right)^{-1} \prod_{\alpha=\pm 1} g_\alpha(\mu),$$

$$\Delta n = \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha \int_{-\infty}^{\infty} g_\alpha(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon, \quad g_\alpha(\varepsilon) = g_\alpha(\varepsilon + \alpha UM),$$

$$M = U^{-1} \left(\sum_{q(\omega=0)} c^2 |\xi_{q,m}|^2 + c^2 \sum_{\omega_n(\neq 0), q, \gamma} r_{q,m,\gamma}^2 \right)^{1/2}. \quad (7)$$

Отметим, что функция X_q возникает как поправка к приближению однородных локальных полей в записи функционала свободной энергии [10,12] и позволяет учесть экстремальную зависимость неоднородной магнитной восприимчивости вблизи точки магнитного фазового перехода: $X_q = U(\chi_q^{(0)} - \chi_0^{(0)})$, $\chi_q^{(0)}$ — паулиевская неоднородная динамическая восприимчивость на 4-векторе, которая после аналитического продолжения на действительную ось частоты совпадает с функцией Линдхарда [12] $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$.

3. Спиновые корреляции

Записанные выше соотношения необходимо дополнить уравнением для намагниченности геликоидального ферромагнетика $\mathbf{M}_q = \sum_m \mathbf{M}_{q,m}$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{q,m} &= \langle \mathbf{S}_{q,m} \rangle = (T\partial Z(\mathbf{h})/\partial \mathbf{h}_{q,m})_{\mathbf{h}_{q,m} \rightarrow 0} \\ &= U^{-1} (c\xi_{q,m} - \mathbf{h}_{q,m} - \mathbf{h}_{q,m}^{(C)})_{\mathbf{h}_{q,m} \rightarrow 0}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\xi_{q_0,m}$ определяется условиями перевала

$$\begin{aligned} \xi_{q,m} (D^{-1} + X(\mathbf{q}, 0)) + a \sum_m (\xi_{q,m} - \mathbf{h}_{q,m}/c) \\ + \kappa \xi_{-q,m} (\xi_{q,m})^2 = \mathbf{h}_{q,m}/c + \mathbf{h}_{q,m}^{(D)}/c, \end{aligned} \quad (9)$$

а значение волнового вектора гелимагнитного упорядочения \mathbf{q}_0 определяется условием максимума намагниченности (то есть минимума свободной энергии). Принимая во внимание известную аппроксимацию функции Линдхарда [12,13]

$$X(\mathbf{q}, \omega) \approx A(\mathbf{q}/k_F)^2 - \theta(\omega < 2V_F|\mathbf{q}|)B \left(i\pi \frac{\omega}{V_F|\mathbf{q}|} - \frac{\omega}{\varepsilon_F} \right), \quad (10)$$

при

$$|\mathbf{q}| < 2k_F,$$

имеем $|\mathbf{q}_0| \approx d/2UA$.

Решения уравнений (8), (9) различаются в зависимости от знака параметра межмодового взаимодействия. Случай $\kappa > 0$ и $D^{-1} < 0$ соответствует ферромагнитному основному состоянию, а при $\kappa < 0$ ферромагнитное основное состояние становится неустойчивым. В первом случае, решения уравнений (8), (9) соответствуют ферромагнитному геликоиду левой киральности с фиксированным вектором геликоидальной структуры

$$M_{\mathbf{v},m}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \mathbf{v}) \quad \text{и} \quad M_{\mathbf{v},m}^{(y)} = -M_S \sin(\mathbf{q}_0 \mathbf{v}). \quad (11)$$

Здесь, модуль намагниченности геликоида $|\mathbf{M}|_{\mathbf{q}_0} (= M_S)$, совпадает с модулем локальной намагниченности $(N_S \cdot M_S)$

$$M_S^2 = \pm (2\kappa)^{-1} \left((D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0) + a)^2 - (dq_0/U^2) \right)^{1/2}. \quad (12)$$

В рассматриваемом случае выбираем решение (12) со знаком плюс.

Согласно стандартному определению и уравнениям (8), (9) статическая неоднородная магнитная восприимчивость, имеет вид

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}, T) &= 2N_S U^{-1} (D^{-1} + 2\kappa M_S^2 + a + X_q) \\ &\times \left((D^{-1} + 2\kappa M_S^2 + a + X_q)^2 - (dq/U^2) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Из формул (12), (13) следует, что статическая неоднородная магнитная восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, T)$ расходится на векторе \mathbf{q}_0 при $M_S = 0$.

Используя связь неоднородной магнитной восприимчивости (13) с неприводимым спин-спиновым коррелятором, имеем

$$\begin{aligned} K(|\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}|) &\equiv \langle (S_{\mathbf{v}} - \langle S_{\mathbf{v}} \rangle)(S_{\boldsymbol{\mu}} - \langle S_{\boldsymbol{\mu}} \rangle) \rangle \\ &= N_0^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \gamma} U \chi(\mathbf{q}, T) \exp i\mathbf{q}(\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}). \end{aligned}$$

В соответствии с (10) и результатами [14], неприводимый спин-спиновый коррелятор в прямом пространстве содержит как ферромагнитную, так и киральную составляющие

$$\begin{aligned} K(r) &= N_S (6k_F^2 T/nUA) (\exp(-r/R_C)/r) \\ &\times (1 + |\mathbf{q}_0|R_C \sin(|\mathbf{q}_0|r) - 2\sin^2(|\mathbf{q}_0|r/2)), \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$R_C = k_F^{-1} A^{1/2} (D^{-1} + 2\kappa|M_{q_0,m}|^2 + a)^{-1/2} \quad (15)$$

— эффективный радиус спиновых корреляций, который при $d = 0$ расходится в точке Кюри (определяемой из

условия $D^{-1} + a = 0$), A — коэффициент при второй степени волнового вектора в аппроксимации функции Линдхарда, n — концентрация атомов Mn, k_F — модуль вектора Ферми (в параболической аппроксимации электронного спектра). Этот результат соответствует [14] в изотропном случае. При этом в отличие от [14], где использовались экспериментальные значения R_C , здесь радиус корреляций вычисляется в рамках развитаемой модели, основанной на использовании прямых расчетов электронной структуры.

В случае $\kappa < 0$ имеет место неустойчивость ферромагнитного геликоидального состояния. При этом вследствие ДМ-взаимодействия, решения уравнения (9), описывает киральные флуктуации — возможность существования пространственных областей со стохастическими значениями начальной фазы спиновой спирали ϕ :

$$\langle S_{v,m}^{(x)} \rangle = M_S (\cos \phi \cos(|\mathbf{q}_0|r) + \sin \phi \sin(|\mathbf{q}_0|r)),$$

$$\langle S_{v,m}^{(y)} \rangle = -M_S (\cos \phi \sin(|\mathbf{q}_0|r) - \sin \phi \cos(|\mathbf{q}_0|r)). \quad (16)$$

Согласно (16) в зависимости от начальной фазы внутри каждой области возможны как левая или правая спиновая спираль, так и их суперпозиции, причем значения ϕ в разных пространственных областях не скоррелированы. Локальная намагниченность определяется формулой (12) со знаком минус.

4. Численный анализ фазового магнитного перехода

Полученные выше выражения численно определяются через плотность электронных состояний и параметры межэлектронных взаимодействий. Численный анализ электронной структуры основного ферромагнитного состояния производился с помощью программного пакета ELK в методе LSDA + U + SO с использованием данных о частных позициях атомов Mn и Si, приведенных

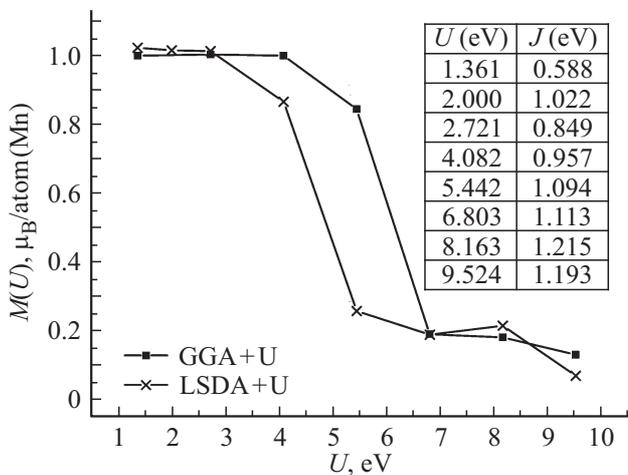


Рис. 1. Магнитные моменты в GGA [11] и LSDA + U + SO — приближениях. Точки по оси абсцисс взяты с шагом 0.05 На.

в [2]. При расчетах задавались значения параметров U , полученные в [11] и рассчитывались значения параметров хундовского обменного взаимодействия, соответствующие рассматриваемым значениям U . Результаты вычислений параметров взаимодействия и магнитных моментов представлены в таблице и на рис. 1, где проведено сравнение решений на основе GGA + U и LSDA + U + SO методов.

Для амплитуды спиновых флуктуаций, при этом имеем выражение, которое соответствует флуктуационно-диссипативной теореме

$$\langle \mathbf{M}^2 \rangle = (c/U)^2 \sum_{q(\omega \neq 0), \gamma} r_{q,m,\gamma}^2 = \langle \mathbf{M}^2 \rangle_0 + \langle \mathbf{M}^2 \rangle_T$$

$$= (2/U\pi) \sum_{q(\neq \mathbf{q}_0), \gamma} \int_0^\infty (1 + 2f_B(\omega/T)) \times \text{Im} \left[(D^{-1} + 2\kappa |\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2 + a + X_{\mathbf{q}}(\omega))^{-1} \right] d\omega. \quad (17)$$

С учетом аппроксимации (10) имеем

$$\langle \mathbf{M}^2 \rangle_0 = (4\pi A^2 B)^{-1} \sum_{\gamma} [A^2 (k_F^{-4} R_C^{-4} - 1)] \times \left[1 + \ln \left(1 + B^{-1} \frac{A^2}{k_F^4 R_C^4} \right) \right] \quad (17.1)$$

$$\langle \mathbf{M}^2 \rangle_T = (3/4)B(T/U)^2 k_F^2 R_C^2 [A^2 (k_F^2 R_C^2 + 1)]^{-1}. \quad (17.2)$$

Сопоставление формулы (13) с экспериментальными данными об однородной магнитной восприимчивости с использованием возможных моделей электронной структуры, вытекающих из LSDA + U + SO расчетов, показало, что количественное согласие получается для электронной структуры с плотностью электронных состояний приведенной на рис. 2 с параметрами: $U = 2$ eV и $J = 1.02$ eV (см. рис. 3).

Максимум однородной восприимчивости возникает при температуре T_C (рис. 3), соответствующей смене знака, рассчитанного в этой же модели параметра межмодового взаимодействия. При этом амплитуда нулевых флуктуаций почти „скачкообразно“ исчезает, а спиновая система описывается решением (16).

При $T = T_C$ параметр межмодового взаимодействия меняет знак, геликоидальное ферромагнитное упорядочение становится неустойчивым, левая киральность исчезает, и спиновая система соответствует совокупности левых и правых спиновых спиралей (16). Возникают спиновые корреляции с радиусом $R_C = \Lambda = 2\pi/|\mathbf{q}_0| = 180$ Å, который убывает с температурой (рис. 4). Согласно (17.1) при $T > T_C$ нулевые спиновые флуктуации пренебрежимо малы и локальная намагниченность подавляется (вставка к рис. 4) вследствие роста динамических спиновых флуктуаций (17.2)

$$M_S^2 = |\kappa|^{-1} \langle M_S^2 \rangle (1 - T^2/T_S^2), \quad (18)$$

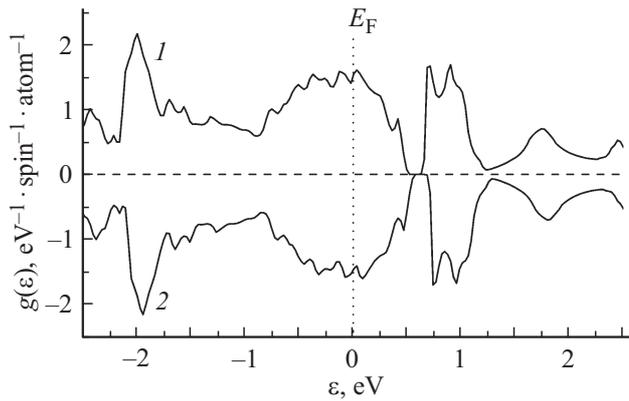


Рис. 2. Плотность состояний d — электронов в LSDA + U + SO — расчетах при значении хаббардовского взаимодействия $U = 2\text{ eV}$: 1 — с положительным значением проекции спина, 2 — с отрицательным значением проекции спина. Начало отсчета энергии соответствует значению энергии Ферми.

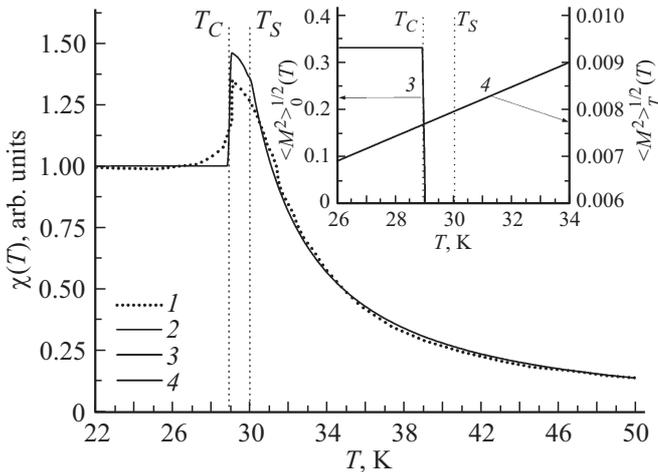


Рис. 3. Магнитная восприимчивость MnSi. 1 — экспериментальные данные [15], 2 — результаты расчетов однородной магнитной восприимчивости с использованием модели плотности состояний с $U = 2\text{ eV}$ (см. рис. 2). На вставке графики температурных зависимостей амплитуд 3 — нулевых (17.1) и 4 — тепловых (17.2) спиновых флуктуаций.

где значение температуры T_S , определяется из решения уравнения

$$T_S = |\kappa|^{-1} B^{-1} U \left(D^{-1} \left(\langle M^2 \rangle_{T_S}^{1/2} \right) + a - d|\mathbf{q}|_0/U \right)^{1/2}. \quad (19)$$

При этом исчезновение локальной намагниченности в точке T_S сопровождается расходимостью магнитной восприимчивости на векторе геликоидальной спирали ($\chi(\mathbf{q}_0, T)$), что соответствует исчезновению эффектов ДМ-взаимодействия.

Пространственное изменение неприводимых спиновых корреляторов определяется наложением друг на друга геликоидального и ферромагнитного ближнего

порядков (см. (15)) и представлено на рис. 5 для трех значений температур: T_C , T_S и $T(>T_S)$. В интервале температур от T_C до T_S , при расстояниях между узлами примерно 40 \AA , возникает кроссовер ферромагнитных и геликоидальных статических пространственных флуктуаций спиновой плотности. На меньших расстояниях пре-

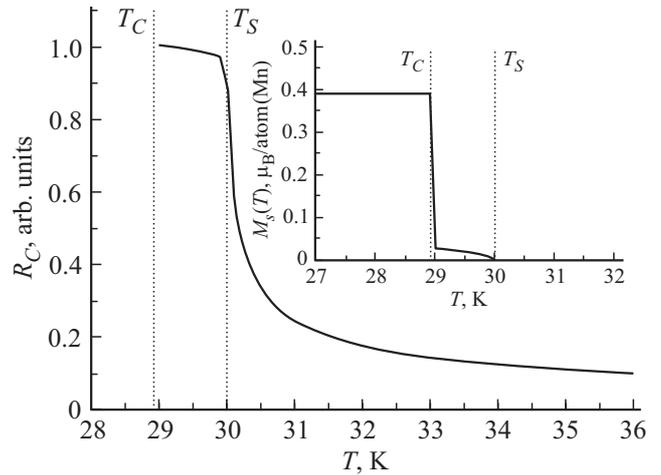


Рис. 4. Радиус корреляции R_C . На вставке температурная зависимость локальной намагниченности в модели плотности состояний с $U = 2\text{ eV}$.

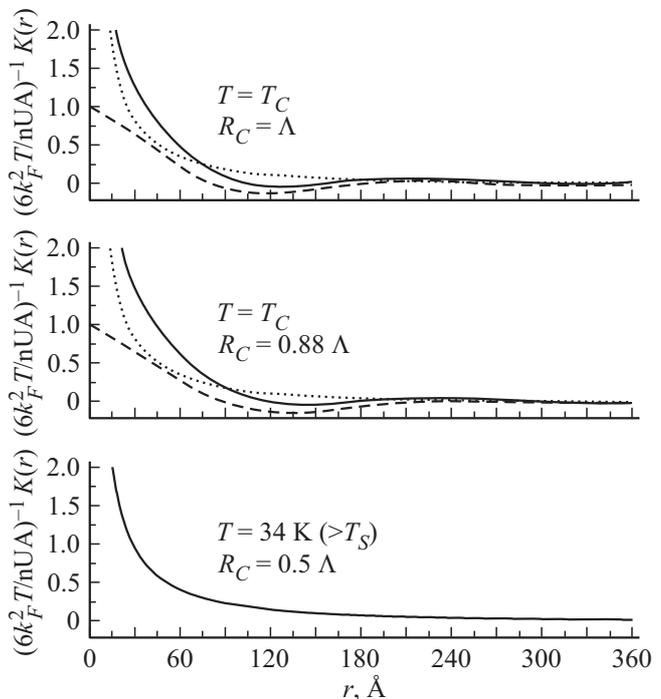


Рис. 5. Зависимости неприводимого спинового коррелятора $K(r)$ от расстояния (сплошная линия) в области киральных флуктуаций и в парамагнитной области. При граничных значениях температур: T_C и T_S показаны ферромагнитная и геликоидальная составляющие спинового коррелятора (штриховая линия соответствует слагаемому с I , а пунктирная — слагаемым с синусами в (15)).

обладает ферромагнитных ближний порядок. Выше температуры T_S геликоидальные корреляции отсутствуют.

Отметим, что при значениях $U = 1 \text{ eV}$ и 1.36 eV не только не достигается количественное согласие с экспериментальными данными по магнитной восприимчивости, но также получается слишком быстрое убыванию радиуса корреляций, что не соответствует факту наблюдений киральных флуктуаций во всей области магнитного фазового перехода [14]. Для $U > 2 \text{ eV}$, решения, согласующиеся со спин-флуктуационной теорией зонного магнетизма и описывающие наблюдаемый фазовый переход, отсутствуют.

5. Заключение

Таким образом, на основе результатов LSDA + U + SO развита новая численная модель фазового перехода в MnSi. Получено, что LSDA + U + SO-расчеты (как и GGA + U) не дают однозначного решения для выбора параметров взаимодействия и плотности электронных состояний MnSi. В настоящей работе окончательный выбор решений описывающих электронную структуру осуществлен на основе достигнутого количественного согласования результатов расчетов однородной магнитной восприимчивости с экспериментальными данными.

В полученной на основе LSDA + U + SO расчетов модели описаны спиновые корреляции, возникающие в области затянутого по температуре (от T_C до T_S) магнитного фазового перехода. Получено, что при T_C имеет место скачкообразное исчезновение нулевых спиновых флуктуаций, причём спиновая система теряет киральность, обусловленную ДМ-взаимодействием. При этом эффект ДМ-взаимодействия проявляется через суперпозицию левых и правых спиновых спиралей, приводящих к геликоидальному ближнему порядку. Наряду с этим имеют место эффекты ферромагнитного ближнего порядка, которые преобладают на малых расстояниях между узлами (меньше 40 \AA).

На расстоянии, соответствующем радиусу спиновых корреляций, по-видимому, имеет место случайное изменение фазы спиновой спирали (16). При этом возникают сдвинутые по фазе области ферромагнитного геликоидального ближнего порядка различной киральности. Последнее указывает на возможность возникновения топологических дырок.

Корректное описание пространственно-временной неоднородности в сильно взаимодействующих между собой спиновой и электронной подсистемах требует развития теории, описывающей перенормировки вершинных частей производящего функционала и обобщенной магнитной восприимчивости во всех порядках (см., например, [15]). Исследование этих перенормировок необходимо и для решения вопроса о возможности спин-волновых возбуждений за пределами геликоидального ферромагнитного упорядочения [16]. Поскольку в температурном интервале геликоидального ферромагнит-

ного упорядочения (ниже T_C) сохраняются достаточно большие и слабо зависящие от температуры нулевые спиновые флуктуации, спиновое магнитное состояние практически не меняется. Поэтому можно ожидать, что спин-волновые возбуждения сохраняются вплоть до T_C .

Список литературы

- [1] S.V. Grigoriev, D. Chernyshov, V.A. Dyadkin, V. Dmitriev, E.V. Moskvina, D. Lamago, Th. Wolf, D. Menzel, J. Schoenes, S.V. Maleyev, H. Eckerlebe. *Phys. Rev. B* **81**, 012408 (2010).
- [2] С.М. Стишов, А.Е. Петрова. *УФН* **181**, 1157 (2011).
- [3] И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **32**, 1548 (1957).
- [4] T. Moriya. *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
- [5] P. Bak, M.H. Jensen, *J. Phys. C* **13**, L881 (1980).
- [6] 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).
- [7] С.А. Бразовский, И.Е. Дзялошинский, Б.Г. Кухаренко. *ЖЭТФ* **70**, 2257 (1976).
- [8] M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Böni, C. Pfleiderer. *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
- [9] S.-A. Siegfried, A.S. Sukhanov, E.V. Altyntbaev, D. Honecker, A. Heinemann, A.V. Tsvyashchenko, S.V. Grigoriev. *Phys. Rev. B* **95**, 134415 (2017).
- [10] A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.A. Nogovitsyna. *Physica B* **536**, 408 (2017).
- [11] K.V. Shanavas, S. Satpathy. *Phys. Rev. B* **93**, 195101 (2016).
- [12] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [13] И.Е. Дзялошинский, П.С. Кондратенко. *ЖЭТФ* **70**, 2360 (1976).
- [14] S.V. Grigoriev, S.V. Maleyev, E.V. Moskvina, V.A. Dyadkin, P. Fouquet, H. Eckerlebe. *Phys. Rev. B* **81**, 144413 (2010).
- [15] А.А. Повзнер. *ФНТ* **12**, 971 (1986).
- [16] M. Corti, F. Carbone, M. Filibian, Th. Jarlborg, A.A. Nugroho, P. Carretta. *Phys. Rev. B* **75**, 115111 (2007).

Редактор Ю.Э. Кутаев