01,05

Исследование квантовых флуктуаций в $Fe_xMn_{1-x}Si$ с учетом LDA + U + SO-расчетов электронной структуры

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

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

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

(Поступила в Редакцию 29 ноября 2018 г.
В окончательной редакции 29 ноября 2018 г.
Принята к публикации 5 декабря 2018 г.)

На основе прямых расчетов электронной структуры исследуются квантовые спиновые флуктуации в киральных геликоидальных ферромагнетиках $Fe_xMn_{1-x}Si$. Показано, что исчезновение геликоидального дальнего порядка, сопровождается возникновением кроссовера термодинамического и квантового переходов с резким уменьшением локальной намагниченности и амплитуды нулевых флуктуаций. Подавление локальной намагниченности квантовыми спиновыми флуктуациями приводит к концентрационно-температурному магнитному переходу с исчезновением геликоидального ближнего порядка. Результаты расчетов локальной намагниченности составов $Fe_xMn_{1-x}Si$ показывают, что при $0.12 < x < 0.20$ магнитное состояние в термодинамическом пределе характеризуется ближним (а не дальним) геликоидальным порядком.

Результаты были получены в рамках задания министерства образования и науки Российской Федерации (контракт 3.9521.2017/8.9).

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47404.307

1. Введение

Киральные ферромагнитные геликоиды MnSi и $Fe_xMn_{1-x}Si$ относятся к структурному типу B20 с пространственной группой $P2_13$, 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 приводят к возникновению спиновой спирали с большим (порядка 100–1000 ангстрем) магнитным периодом [5]. Согласно экспериментальным исследованиям [6], при магнитных фазовых переходах в этих магнетиках, сначала исчезает дальний геликоидальный ферромагнитный порядок (в точке T_C), при этом возникает ближний геликоидальный порядок с флуктуациями спиновой спирали [6], и только затем, при температуре T_S $(> T_C)$ реализуется парамагнитное состояние. При экспериментальных исследованиях концентрационно-температурных диаграмм $Fe_xMn_{1-x}Si$ обнаружены концентрационные магнитные переходы с исчезновением дальнего, а затем ближнего порядка [7].

В работе Янсена и Бака [8] на основе ренормгруппового анализа магнитного перехода в MnSi был сделан вывод о невозможности в нем магнитного фазового перехода второго рода.

Согласно [9] одной из причин невозможности термодинамического фазового перехода второго рода является наличие в функционале Гинзбурга–Ландау (F) неаналитической поправки, которую можно интерпретировать в духе межмодового взаимодействия, связанного с взаимодействием спиновых флуктуаций. При этом, поскольку параметры межмодового взаимодействия зависят от электронной структуры и межчастичных взаимодействий в системе магнитоактивных электронов, теория фазовых переходов должна строиться с учетом конкретной структуры исследуемых магнетиков, например, на основе *ab initio* расчетов энергетического электронного спектра MnSi [10].

Однако спиновые флуктуации и их связь с эволюцией электронной структуры при концентрационных магнитных переходах в $Fe_xMn_{1-x}Si$ не изучены.

2. Модель

Будем рассматривать модель, в которой основное состояние описывается в приближениях метода LSDA + U + SO, а в возбужденном нулевыми и тепловыми спиновыми флуктуациями состоянии следует рассматривать поправки, связанные с хаббардовскими и гундовскими межчастичными корреляциями. Гамильтониан такой модели сильно коррелированной электронной системы записывается в виде

$$H = H_0 + \delta H_U. \qquad (1)$$

Здесь

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},m,\sigma} \varepsilon^{(\mathrm{LSDA})}_{\mathbf{k},m,\sigma} a^{+}_{\mathbf{k},m,\sigma} a_{\mathbf{k},m,\sigma}$$

— диагонализованный в LSDA + U + SO-приближении гамильтониан d-электронов. Наряду с гамильтонианом H_0, используемым в методе LSDA + U + SO, рассматривается

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

Здесь, U и J — параметры хаббардовского и хундовского взаимодействий соответственно,

$$\delta n_{\mathbf{q}} = \sum_m \delta n_{\mathbf{q},m}, \quad \delta S = \sum_m \delta S_{\mathbf{q},m}^{(z)},$$

$$\delta n_{\mathbf{q},m} = \sum_\sigma n_{\mathbf{q},m,\sigma} - \delta_{q,0}\, N_m^{(\mathrm{LDA})},$$

$$n_{\mathbf{q},m,\sigma} = a^+_{\mathbf{k},m,\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},m,\sigma}, \quad a^+_{\mathbf{k},m,\sigma}(a_{\mathbf{k},m,\sigma})$$

— операторы рождения (уничтожения) в состоянии с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и магнитным и спиновым квантовыми числами m и σ,

$$\delta S_{\mathbf{q},m}^{(z)} = S_{\mathbf{q},m}^{(z)} - \delta_{q,0} M_m^{(\mathrm{LDA})}, \quad S_{\mathbf{q},m}^{(z)} = \sum_\sigma \sigma n_{\mathbf{q},m,\sigma}/2,$$

а $M_m^{(\mathrm{LDA})}$ и $N_m^{(\mathrm{LDA})}$ — средние значения операторов спиновой и зарядовой плотностей в приближении среднего поля (LSDA + U + SO-метод).

Зарядовыми флуктуациями чисел заполнения будем пренебрегать, поскольку они ведут к большим флуктуациям энергии электронной системы, а потому маловероятны. Для определения амплитуды спиновых флуктуаций воспользуемся флуктуационно-диссипативной теоремой, в которой вклады, связанные с нулевыми и тепловыми флуктуациями, определяются через интеграл от мнимой части неоднородной динамической восприимчивости, который можно разбить на слагаемые с фактором „1/2“ и с функцией Бозе–Эйнштейна $(f_B(\omega/T))$ соответственно

$$\langle m^2\rangle = N_0^{-1}\sum_{\mathbf{q}}\int_0^\infty \left(\frac{1}{2} + f_B(\omega/T)\right)\mathrm{Im}\,\chi(\gamma,\gamma)d\omega. \qquad (3)$$

Для вычисления квантово-статистических средних будем использовать технику мацубаровского представления взаимодействия, в которой

$$\langle(\ldots)\rangle = Z^{-1}(0) Sp T_\tau(\ldots)\exp\left(-\int_0^{1/T} d\tau H(\tau)\right),$$

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. Тогда вводя производящий функционал

$$Z(\mathbf{h}) = Sp\, T_\tau \exp\left(-\int_0^{1/T} d\tau H(\tau) + T^{-1}\sum_q \mathbf{h}_q \mathbf{S}_q\right), \qquad (4)$$

имеем

$$\chi_q^{(\gamma,\gamma')} = T^{-1}\lim_{\mathbf{h}_q\to 0}\partial^2 \ln Z(\mathbf{h})/\partial h_q^{(\gamma)}\partial h_{-q}^{(\gamma')} = T^{-1}\left\langle\left(S_q^{(\gamma)} - \langle S_q^{(\gamma)}\rangle\right)\left(S_{-q}^{(\gamma')} - \langle S_{-q}^{(\gamma')}\rangle\right)\right\rangle, \qquad (5)$$

Отметим, что выражение (4) с учетом записи гамильтониана (1), (2) может быть представлено в виде [10], в котором кулоновские корреляции описываются через взаимодействие электронов с флуктуирующими в пространстве и времени обменными полями

$$Z(\mathbf{h}) = \int_{-\infty}^{\infty}(d\xi, d\eta)\exp\left(-\Phi(\xi,\eta)/T\right) \times \exp\left\{-\sum_{q,m}|\eta_{q,m}|^2 - b\left|\sum_{q,m}\eta_{q,l,m}\right|^2 - (ic/T)\sum_m \eta_{0,m}N_m^{(\mathrm{LDA})}\right\} \times \exp\left\{-a\left|\sum_{q,m}(\xi_{q,m} - c^{-1}\mathbf{h}_{q,m})\right|^2 - \sum_{q,m}|\xi_{q,m} - c^{-1}\mathbf{h}_{q,m}|^2 + 2(c/T)\sum_m (M_m^{(\mathrm{LDA})} - \Delta/U)(\xi_{0,m,z} - c^{-1}h_{0,m}^{(z)})\right\}. \qquad (6)$$

Здесь T — температура в энергетических единицах,

$$a = JU(U-J)^{-1}(U+5J)^{-1}, \quad b = 4U(U-5J)^{-1},$$

$$c = U^{1/2}T^{1/2}, \quad \Phi(\xi,\eta) = -T\ln Sp\, T_\tau \exp\left(-H_{\mathrm{eff}}(\xi,\eta)/T\right)$$

— 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),

$$H_{\mathrm{eff}} = \sum_{k,m,\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k},m,\sigma} a^+_{k,m,\sigma} a_{k,m,\sigma} + c\sum_{\nu,m}\left(\xi_{\nu,m}\mathbf{S}_{\nu,m} + (i/2)\eta_{\nu,m}n_{\nu,m}\right) \qquad (7)$$

— эффективный гамильтониан, в котором $\varepsilon_{\mathbf{k},m,\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k},m,\sigma}^{(\mathrm{LDA})} - \sigma\Delta$, $\varepsilon_{\mathbf{k},m,\sigma}^{(\mathrm{LDA})}$ — электронный спектр, рассчитанный в LDA + U + SO-приближении, Δ — величина спинового расщепления энергий LDA + U + SO-состояний, которая принимается не зависящей от квазиимпульса.

Переменные интегрирования $\left((d\xi) = \prod_{m,\gamma}\left[d\xi_{m,0}^{(\gamma)}\prod_{j,q,0} d\xi_{m,q,\gamma}^{(\gamma)}\right]\right)$ $\xi_{m,q}^{(\gamma)} = \xi_{m,q,1}^{(\gamma)} + i\xi_{m,q,2}^{(\gamma)}$ $(\xi_{m,0,2}^{(\gamma)} = 0)$ возникают из слагаемых (2) ответственных за спин-спиновое взаимодействие и связаны со спиновыми корреляторами (определяющими спиновые флуктуации и параметры порядка)

$$Tc^{-1}(1+a)\left(\xi_{m,q}^{(\gamma)} + c^{-1}h_q^{(\gamma)}\right) = \langle S_{m,q}^{(\gamma)}\rangle$$

$$UTc^{-2}(1+a)2|\xi_{m,q}^{(\gamma)} + c^{-1}h_q^{(\gamma)}|^2 - 1 = \left\langle\left(|S_{m,q}^{(\gamma)}|^2 - |\langle T_\tau S_{m,q}^{(\gamma)}\rangle|^2\right)\right\rangle.$$

Для того чтобы описать возникновение в ферромагнитном состоянии геликоидальной спиновой спирали, выражение (7), полученное выше должно быть скорректировано учетом взаимодействия Дзялошинского–Мории, которое вследствие его релятивистской малости опишем в приближении среднего поля. Для этого выполним следующую замену

$$H_{\text{eff}} \to H_{\text{eff}} - \sum_m [\mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q},m}\mathbf{S}_{-\mathbf{q},m}] \text{ и } \xi_{q,m} = \xi_{q,m} - \delta_{\omega_n,0}\mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q},m}/c. \tag{8}$$

Здесь $\mathbf{h}^{(D)}_{\mathbf{q},m} = [\langle\mathbf{S}_{\mathbf{q},m}\rangle\mathbf{d}_\mathbf{q}]$ — вектор поля Дзялошинского, $\mathbf{d}_\mathbf{q} = id\mathbf{q}$, d — константа взаимодействия Дзялошинского, $\langle\mathbf{S}_{\mathbf{q},m}\rangle$ — вектор фурье-образа среднего от оператора неоднородной спиновой плотности на векторе $\mathbf{q}$.

3. Уравнения магнитного состояния с учетом ДМ-взаимодействия

При квантово-статистическом усреднении (шпурировании) в (4) будем рассматривать крупномасштабные и медленные (в сравнении со временем межузельных электронных перескоков) спиновые флуктуации путем учета пространственно-временных неоднородностей только в слагаемых $\Phi(\xi,\eta)$, соответствующих обратному фактору обменного усиления магнитной восприимчивости $(1 - U\chi^{(0)}(\mathbf{q},\omega))$, который аномально сильно зависит от квазиимпульса и частоты [10]. Тогда проводя суммирование по мацубаровским частотам с помощью теоремы „о вычетах“

$$T\sum_{\omega_{2n=1}}(\ldots) = (2\pi i)^{-1}\oint d\omega\,\mathrm{cth}(\omega/2T)(\ldots),$$

$$T\sum_{\omega_{2n}}(\ldots) = (2\pi i)^{-1}\oint d\omega\,\mathrm{cth}(\omega/2T)(\ldots),$$

и, суммируя ряды по степеням обменных полей, можно получить выражение для свободной энергии $F\ (= T\ln Z(0))$.

Уравнения магнитного состояния, получаемые из условий седловой точки свободной энергии по переменным ξ_{0m}, $\mathrm{Re}\,\xi_{\mathbf{q},m,\gamma}$ и $\mathrm{Im}\,\xi_{\mathbf{q},m,\gamma}$, указывают на возможность существования не только геликоидальной ферромагнитной фазы и фазы геликоидального ближнего порядка [11], но и скрытой ферромагнитной фазы, описываемых уравнениями

$$\langle\mathbf{S}_\mathbf{q}\rangle\big(D^{-1} + X_\mathbf{q}(0) + a\big) + 2^{-1}\kappa\langle\mathbf{S}_{-\mathbf{q}}\rangle\big(\langle\mathbf{S}_\mathbf{q}\rangle\big)^2 = \mathbf{h}^{(D)}_\mathbf{q}, \tag{9a}$$

$$\langle S^{(Z)}_{0,}\rangle\big(D^{-1} + \kappa|\langle\mathbf{S}_0\rangle|^2 + a\big) = -\Delta\big(D^{-1} + a - \kappa\langle\mathbf{m}^2\rangle/3\big). \tag{9b}$$

При этом амплитуды спиновых флуктуаций определяются из условий перевала для ξ [12] и описываются выражениями соответствующими флуктуационно-диссипативной теореме

$$\langle m^2_\gamma\rangle = 2(UN_0)^{-1}\sum_\mathbf{q}\int_0^\infty\left(\frac{1}{2} + f_B(\omega/T)\right)$$
$$\times\,\mathrm{Im}\Big(D^{-1} + 2\kappa|\langle S^{(\gamma)}_{\mathbf{q}_0}\rangle|^2 + a + X_\mathbf{q}(\omega)\Big)^{-1}d\omega, \tag{10}$$

где

$$X_\mathbf{q}(\varpi) = U\big(\chi^{(0)}(0,0) - \chi^{(0)}(\mathbf{q},\omega)\big),$$
$$\chi^{(0)}(\mathbf{q},\omega) = \sum_k\frac{f_F(\varepsilon_\mathbf{k} - \mu) - f_F(\varpi + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mu)}{\varpi + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_\mathbf{k} - i\delta}$$

функция Линдхарда (парамагнитная паулиевская запаздывающая динамическая восприимчивость), $\delta \to 0$, $\kappa = (U/m^2)|\chi_\perp - \chi_\parallel|$ — параметр межмодового взаимодействия, перенормированный взаимодействием электронов с флуктуирующими обменными полями и совпадает с использованной в работе [10] для нулевого приближения относительно этих перенормировок. Поперечные и продольные восприимчивости определяются выражениями

$$\chi_\perp = (2Um)^{-1}\Delta n \quad \text{и} \quad \chi_\parallel = 2\left(\sum_{\alpha=\pm1} g_\alpha(\mu)\right)$$

где

$$\Delta n = \sum_{\alpha=\pm1}\alpha\int_{-\infty}^{\infty} g_\alpha(\varepsilon)f(\varepsilon-\mu)d\varepsilon$$

— разность чисел заполнения спин-симметризированных и спин-антисимметризированных электронных состояний, $D^{-1} = 1 - U\chi_\perp + \kappa\langle\mathbf{m}^2\rangle/3$ — коэффициент обменного усиления однородной магнитной восприимчивости. Подчеркнем, что учет ДМ-взаимодействия в уравнениях магнитного состояния приводит к среднеквадратическому магнитному моменту

$$m^2 = \sum_\gamma\left(\sum_{\mathbf{q}(\omega_n=0)}|\langle S^{(\gamma)}_\mathbf{q}\rangle|^2 + (c/U)^2\sum_{\mathbf{q},\omega_n(\neq 0)}|\xi^{(\gamma)}_{\mathbf{q},\omega_n}|^2\right), \tag{11}$$

содержащему вклад статических (классических) флуктуаций локальной намагниченности, связанной с геликоидальной ВСП (первое слагаемое (11)) и квантовых флуктуаций (второе слагаемое (11)).

Требование электронейтральности для числа электронов имеет вид

$$N = \partial F/\partial\mu = \sum_\alpha\int d\varepsilon g_\alpha(\varepsilon)f_F(\varepsilon-\mu), \tag{12}$$

где $f_F(\varepsilon-\mu)$ — функция Ферми–Дирака.

В случае близости химического потенциала к области запрещенных энергий (как это имеет место в электронной структуре геликоидальных ферромагнетиков со структурой B20) требование (12) приводит к дополнительным ограничениям на условия устойчивости спиновых состояний.

При этом, объединяя уравнения магнитного состояния (9, a,b) с условием (12), получаем, что в геликоидальном ферромагнетике ($\langle S_{0,}^{(Z)}\rangle = 0$) при наличии и неравенстве нулю Δ имеем

$$\langle \mathbf{m}^2\rangle + M_S^2 = \frac{1}{2}(1+a)^{-1}\sum_{\alpha=\pm1}\alpha\int_{-\infty}^{\infty} g_\alpha(\varepsilon) f(\varepsilon-\mu)d\varepsilon, \tag{13}$$

M_S^2 — квадрат локальной намагниченности.

4. Численная модель магнитных переходов в $Fe_xMn_{1-x}Si$

Для численного анализа электронной структуры и уравнения магнитного состояния геликоидальных ферромагнетиков $Fe_xMn_{1-x}Si$ могут быть использованы методы прямых зонных расчетов в приближении среднего поля. В настоящей работе расчеты затравочных электронных спектров $\varepsilon^{(0)}_{\mathbf{k},m,\sigma} = \varepsilon^{(0)}_{\mathbf{k},m} - \sigma\Delta$ выполнены с использованием метода LSDA + U + SO в пакете Elk с учетом кристаллической структуры B20 (пространственная группа $P2_13$) и частных позиций атомов $Fe_xMn_{1-x}Si$ [13]. Значения параметра хаббардовского взаимодействия определялись из условий согласия результатов численных расчетов с экспериментальными данными (см. ниже). Параметр гундовского взаимодействия рассчитывался с помощью процедуры, реализуемой в пакете Elk [14]. При этом найденные значения параметров взаимодействий соответствовали условиям минимума полной энергии в приближении среднего поля.

Амплитуда спиновых флуктуаций вычисляется в изотропном приближении по флуктуационно-диссипативной теореме (3, 10) с использованием известной аппроксимацией функции Линдхарда

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q},\omega) = \chi^{(0)}(0,0) + \chi^{(0)}(0,0)\bigg(A(\mathbf{q}/k_F)^2 - iBU^{-1} \times \frac{\omega}{|\mathbf{q}/k_F|}\theta(T_0|\mathbf{q}/k_F| - \omega)\bigg)\theta(2k_F - |\mathbf{q}|), \tag{14}$$

где коэффициенты A и B пропорциональны плотности электронных состояний на уровне Ферми. Параметр A в соответствии с приближением эффективной массы также как и в модели свободных электронов равен 1/12, B выражается через значение приведенной эффективной массы ($B = (\pi/3)M_{\text{eff}}/M_e$), которое в наших расчетах было равным $M_{\text{eff}} = 5M_e$ (M_e — масса свободных электронов).

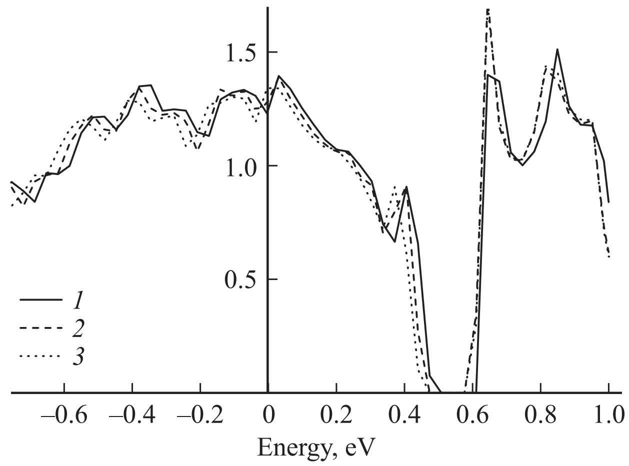

Рис. 1. Плотность электронных состояний, рассчитанная в рамках LDA + U + SO-расчетов при значении хаббардовского взаимодействия $U = 1$ eV: *1* — $x = 0.04$, *2* — $x = 0.08$, *3* — $x = 0.12$.

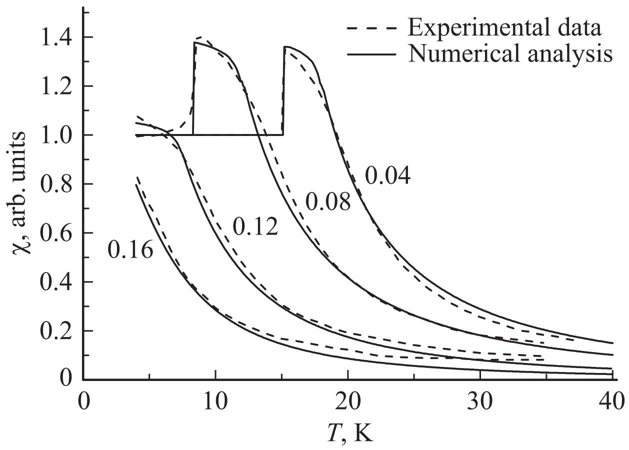

Рис. 2. Температурные зависимости магнитной восприимчивости для различных составов $Fe_xMn_{1-x}Si$.

При этом согласно (14), получаем, что амплитуда нулевых спиновых флуктуаций

$$\langle \mathbf{m}^2\rangle_0 = (4\pi^2A^2B)^{-1}N_f\sum_\gamma\big[(D^{-1} + 2\kappa M_s^2 + a)^2 - A^2\big] \times \big[1 + \ln\big(1 + B^{-1}(D^{-1} + 2\kappa M_s^2 + a)^2\big)\big], \tag{15}$$

а амплитуда тепловых спиновых флуктуаций в аппроксимации (14) монотонно возрастает по квадратичному закону

$$\langle \mathbf{m}^2\rangle_T = N_f(3/4)B(T/U)^2\big(D^{-1} + a + 2\kappa M_s^2\big)^{-1} \times (D^{-1} + a + 2\kappa M_s^2 + A)^{-1}. \tag{16}$$

Результаты расчета плотности электронных состояний приводятся на рис. 1. На рис. 2 приведены полученные в такой картине результаты расчетов температурных зависимостей однородной магнитной восприимчивости (9b).

Как было показано ранее [10], при $\kappa > 0$ решение уравнения (9a) соответствует ферромагнитному геликоидальному порядку с фиксированным волновым вектором $|\mathbf{q}_0| \approx d/2UA$, причем

$$\langle S_{\boldsymbol{\nu}}^{(x)} \rangle = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi_0), \quad \langle S_{\boldsymbol{\nu}}^{(y)} \rangle = -M_S \sin(\mathbf{q}_0 \boldsymbol{\nu} + \phi_0).$$

Модуль локальной намагниченности определяется уравнением

$$M_S = (2\kappa)^{-1/2} \big((D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0) + a)^2 - (d|\mathbf{q}_0|)^2 \big)^{1/2}. \quad (17)$$

и убывает с ростом температуры. При этом сравнивая (12) и (17) вблизи и выше T_C можно получить, что локальная намагниченность не исчезает выше T_C из-за ДМ-взаимодействия (рис. 3).

Геликоидальная ферромагнитная фаза теряет термодинамическую устойчивость при температуре смены знака параметра мода-мода κ, соответствующей максимуму однородной магнитной восприимчивости. Вблизи и выше температуры T_C или в основном состоянии вблизи и выше концентрации x_C имеет вид

$$\langle \mathbf{m}^2 \rangle_0 = (4\pi^2 A^2 B)^{-1} N_f \sum_{\gamma} [(\kappa M_S^2)^2 - A^2]. \quad (18)$$

При магнитном переходе с потерей дальнего порядка ($x = x_C$ или $T = T_C$) нулевые флуктуации определяются изменением параметра мода-мода и локальной намагниченности (17). При $d = 0$ локальная намагниченность и амплитуда нулевых флуктуаций исчезали бы в точке T_C.

Численный анализ показывает, что этот эффект имеет место для составов с $x < x_C$ (≈ 0.12) (см. рис. 2 и 3). При $x > x_C$ в согласии с экспериментом [6] геликоидальный ферромагнетизм исчезает в основном состоянии (рис. 1). Согласно рис. 2, 3 при концентрации x_C также имеет место резкое ослабление нулевых спиновых

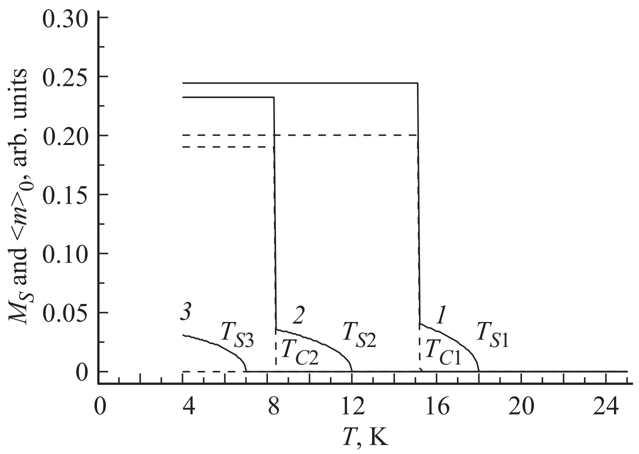

Рис. 3. Локальная намагниченность (сплошные линии) и амплитуды нулевых спиновых флуктуаций (пунктирные линии): *1* — $x = 0.04$, *2* — $x = 0.08$, *3* — $x = 0.12$.

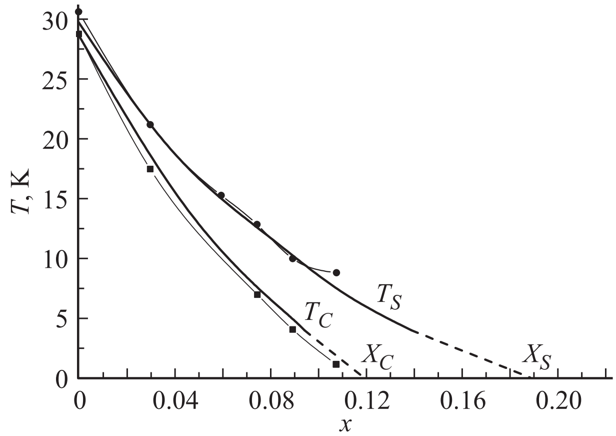

Рис. 4. Зависимость температур перехода от концентрации. Точками обозначены результаты экспериментальных исследований [5].

флуктуаций (18), а магнитная восприимчивость (14) становится отрицательной (потеря устойчивости скрытой ферромагнитной фазы). На рис. 4 приводятся результаты вычислений зависимости температуры T_C от x. При этом возникает максимум однородной магнитной восприимчивости (14).

Для $\kappa \le 0$ и $0 > D^{-1} + a \ge -3d|\mathbf{q}_0|/2$ (т.е. $\big(D^{-1} + X(\mathbf{q}_0, 0) + a + d\mathbf{q}_0\big) > 0$), как отмечалось ранее [10] возникает геликоидальный ближний порядок с флуктуациями начальной фазы ϕ спиновой спирали. Концентрационная зависимость температуры T_S, при которой локальная намагниченность (17) исчезает, приведена и сопоставлена с экспериментальными данными [5] на рис. 4.

5. Заключение

Согласно построенной модели DOS наблюдаемые на эксперименте концентрационные магнитные переходы в $Fe_xMn_{1-x}Si$ обусловлены близостью химического потенциала к нижнему краю области запрещенных энергий в электронной структуре основного состояния. Вырождение 5/2 d-состояний обуславливает достаточно большое гундовское взаимодействие, что согласно (15) ведет к большим амплитудам нулевых спиновых флуктуаций.

Это приводит к нарушению условия электронейтральности (12) вблизи x_C и к возникновению кроссовера квантового и термодинамического переходов. В результате имеет место скачкообразное исчезновение нулевых флуктуаций, сопровождаемое уменьшением плотности состояний вблизи энергии Ферми, что ведет к исчезновению скрытой ферромагнитной фазы (дальнего порядка).

Второй концентрационный переход, как видим связан с исчезновением локальной намагниченности, что ведет к подавлению эффектов спиновой киральности и, в согласии с экспериментом [11], имеет место при температурах и концентрациях T_S и x_S более высоких чем T_C и x_C. При исчезновении ближнего порядка в основном состоянии с увеличением x имеет место сдвиг химического потенциала вверх по шкале энергий. При этом согласно (17) получаем, что должна существовать концентрация x_S (≈ 0.2), при которой геликоидальный ближний порядок и флуктуации спиновой спирали должны исчезать уже в основном состоянии.

Список литературы

[1] S.V. Grigoriev, D. Chernyshov, V.A. Dyadkin, V. Dmitriev, E.V. Moskvin, 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] S.V. Grigoriev, E.V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, K.A. Pschenichnyi, D. Menzel, A. Heinemann, G. Chaboussant. Phys. Rev. B **97**, 024409 (2017).
[6] S.V. Grigoriev, V.A. Dyadkin, E.V. Moskvin, D. Lamago, Th. Wolf, H. Eckerlebe, S.V. Maleyev Phys. Rev. B **79**, 144417 (2009).
[7] S.V. Grigoriev, E.V. Moskvin, V.A. Dyadkin, D. Lamago, T. Wolf, H. Eckerlebe, S.V. Maleyev. Phys. Rev. B **83**, 224411 (2011).
[8] P. Bak, M.H. Jensen. J. Phys. C **13**, L881 (1980).
[9] С.А. Бразовский, И.Е. Дзялошинский, Б.Г. Кухаренко. ЖЭТФ **70**, 2257 (1976).
[10] A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.A Nogovitsyna. Physica B **536**, 408 (2018).
[11] S.V. Demishev, I.I. Lobanova, V.V. Glushkov, T.V. Ischenko, N.E. Sluchanko, V.A. Dyadkin, N.M. Potapova, S.V. Grigoriev. Pis'ma v ZhETF **98**, *12*, 933 (2013).
[12] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
[13] http://elk.sourceforge.net.
[14] F. Bultmark, F. Cricchio, O. Grånäs, L. Nordström. Phys. Rev. B **80**, 035121 (2009).

Редактор Т.Н. Василевская