

РОЛЬ МАГНИТОУПРУГИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СПЛАВЕ FeRh ПРИ АНТИФЕРРО-ФЕРРОМАГНИТНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

И. С. Козвонин^а, А. А. Терещенко^а, А. С. Овчинников^{а,б*}, Н. В. Баранов^б, Э. З. Валиев^б

^а Институт естественных наук и математики Уральского федерального университета
620083, Екатеринбург, Россия

^б Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620219, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2024 г.,
после переработки 16 августа 2024 г.
Принята к публикации 20 августа 2024 г.

Для объяснения особенностей магнитных фазовых переходов в сплаве FeRh предложена эффективная теория среднего поля, учитывающая взаимодействие упругих и магнитных степеней свободы. Параметром порядка теории наряду с намагниченностями подрешеток атомов железа и средних значений деформаций всестороннего сжатия и одноосного растяжения выступает также внутреннее магнитное поле, вызывающее появление ненулевой намагниченности атомов родия при антиферро-ферромагнитном фазовом переходе. В рамках этой теории удается рассчитать температурные зависимости полной намагниченности и относительного изменения объема, согласующиеся с экспериментальными данными, и показать, что антиферро-ферромагнитный переход является фазовым переходом первого рода. Выбор констант обменного взаимодействия, согласующийся с расчетами *ab initio* электронной структуры, позволяет выявить ведущий механизм этого перехода — перенормировку обменного взаимодействия между ближайшими соседями подсистемы атомов железа, возникающей при учете двухионного магнитоупругого взаимодействия. Показано, что тепловое возбуждение спиновых волн способствует усилению одноосных деформаций, понижающих кубическую симметрию решетки до тетрагональной.

DOI: 10.31857/S004445102412006X

1. ВВЕДЕНИЕ

Объяснение магнитных свойств сплава FeRh остается задачей-вызовом на протяжении многих десятков лет, несмотря на внешне простой характер магнитных переходов, наблюдаемых в этом соединении. Так, в упорядоченном сплаве FeRh при повышении температуры наблюдается фазовый переход первого рода от антиферромагнитной (АФМ) фазы к ферромагнитной (ФМ) фазе [1, 2]. Этот переход происходит при температуре T_0 , варьирующейся в диапазоне от комнатных температур примерно до 400 К. Температура перехода сильно зависит от состава и присутствия дефектов кристаллической структуры [3]. Фазовый переход сопровождается увеличением объема приблизительно на 1%,

а объемно-центрированная кристаллическая структура CsCl-типа не изменяется [4, 5]. Однако некоторые теоретические вычисления показывают, что орторомбические или тетрагональные искажения в АФМ-фазе вносят вклад в ее стабилизацию [6]. Что касается поведения намагниченности, то еще ранние нейтрон-дифракционные эксперименты установили, что в АФМ-фазе только атомы железа имеют магнитный момент $\mu_{\text{Fe}} \approx 3.2\mu_B$ ($\mu_{\text{Rh}} = 0$), тогда как при температурах выше T_0 появляется магнитный момент на атомах родия $\mu_{\text{Rh}} \sim 1\mu_B$, но при этом μ_{Fe} меняется слабо [7, 8]. Кроме того, при АФМ–ФМ-переходе наблюдаются аномально большие изменения магнитной энтропии [9, 10], электросопротивления [11] и вынужденной объемной магнитострикции [12]. Детальное изложение основных исследований магнитных и магнитокалорических свойств сплавов FeRh содержится в обзоре [13]. Все эти факты в совокупности делают FeRh

* E-mail: alexander.ovchinnikov@urfu.ru

перспективным материалом для использования в запоминающих устройствах будущего поколения, в системах магнитного охлаждения и в магнестрикционных устройствах, несмотря на малую распространенность и высокую стоимость родия.

Для объяснения природы АФМ–ФМ-перехода был предложен ряд механизмов, в частности, модель Киттеля с инверсией знака обменного взаимодействия между атомами железа [14] и обменно-стрикционная модель ферромагнетиков [15, 16]. В настоящее время имеется несколько теоретических работ, содержащих результаты *ab initio*-вычисления электронной структуры соединения FeRh [17, 18]. Однако следует признать, что до сих пор нет единого мнения о причине этого фазового перехода.

Одной из открытых проблем теории АФМ–ФМ-перехода является объяснение отсутствия магнитного момента на атомах родия при низких температурах. Расчеты *ab initio* дают достаточно большую величину для ферромагнитного Fe–Rh обмена [19], что должно было бы приводить к стабилизации ФМ-фазы при низких температурах. Для объяснения этой аномалии в работе [20] было высказано предположение о погружении *4d*-зоны электронов Rh, незначительно расщепленной обменным взаимодействием, под уровень Ферми на глубину, обеспечивающую ее полное заполнение при температуре $T = 0$ К, что объясняет компенсацию спинов *4d*-электронов в низкотемпературной АФМ-фазе. Возникновение ненулевого магнитного момента авторами работы связывалось с тепловым размытием уровня Ферми и появлением дырок в *4d*-зоне при отсутствии искажений атомной структуры. Последнее допущение обосновывалось экспериментальными данными по фемтосекундной оптике [21, 22], указывающими на то, что изменения в спиновой структуре опережают изменения в атомной структуре.

На наш взгляд, вне зависимости от того, что является триггером появления ненулевой намагниченности в подсистеме атомов родия, такое исключение из рассмотрения структурных переходов не позволяет получить согласованное описание АФМ–ФМ-перехода. Накопленные к настоящему времени данные по изучению магнитоупорядоченных ОЦК-сплавов с замещением Fe(RhM), где M=Fe, Co, Ni, Pd, Ir, Pt [23], Fe(RhPd) [24], FeRhCr (с замещениями хромом как железа, так и родия) [25] и (Fe,Ru)Rh [26] убедительно свидетельствуют о тесной корреляции между температурой АФМ–ФМ-перехода, величиной μ_{Ru} и параметрами кристаллической атомной решетки.

Целью данной работы является построение теории среднего поля, позволяющей эффективно учесть перестройку плотности спин-поляризованных состояний атомов Rh в точке АФМ–ФМ-перехода, связав ее с *изменением упругих деформаций*. В этом отношении наше рассмотрение представляет собой обобщение и развитие идей предыдущих исследований, использующих магнитоупругие взаимодействия для описания специфики АФМ–ФМ-перехода в сплаве FeRh [14–16]. Также в рамках нашего подхода приняты во внимание результаты расчетов *ab initio* электронной структуры FeRh, представленных в работе [19], согласно которым необходимо учитывать обменное взаимодействие между атомами железа вплоть до ближайших соседей из третьей координационной сферы. Упругие и магнитоупругие взаимодействия описываются в нашей модели, исходя из кубической симметрии кристалла FeRh, что позволяет определить структурные параметры порядка, связанные с деформацией всестороннего сжатия и одноосной деформацией, понижающей кубическую симметрию до тетрагональной. Главная особенность рассмотрения магнитных степеней свободы заключается в том, что температурное поведение намагниченности атомов родия считается известной заранее заданной функцией, а в рамках самосогласованной процедуры вычисляются сопряженное ей внутреннее поле и намагниченности двух подрешеток атомов железа. Такая формулировка соответствует статистической модели большого канонического ансамбля, в которой роль наблюдаемого среднего числа частиц играет намагниченность подсистемы атомов родия, а роль химического потенциала играет сопряженное ей внутреннее магнитное поле. Рост этого поля в точке T_0 эффективно будет соответствовать перестройке плотности спин-поляризованных электронных состояний Rh на уровне Ферми, обеспечивающей появление ненулевого μ_{Rh} .

В рамках этого описания удастся показать, что АФМ–ФМ-переход носит характер фазового перехода первого рода, при котором выше температуры T_0 наряду со стабильной ФМ-фазой будут наблюдаться остатки АФМ-фазы. Представленная теория позволяет получить согласующиеся с экспериментальными данными температурные зависимости полной намагниченности и относительного изменения объема FeRh во всем температурном диапазоне. Она также вскрывает ведущий механизм АФМ–ФМ-перехода, связанный с магнитоупругим взаимодействием, учет которого приводит к температурной перенормировке эффективного обменного взаимодей-

ствия между ближайшими атомами железа. В результате последнее вносит вклад в стабилизацию АФМ-фазы при низких температурах, а вблизи T_0 оно, резко уменьшаясь по величине и меняя свой знак, смещает баланс обменных взаимодействий в пользу ФМ-порядка. Наконец, наш анализ объясняет возникновение тетрагональных деформаций и, в частности, показывает, что тепловое возбуждение спиновых волн способствует их росту.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 дана модель обменных, упругих и магнитоупругих взаимодействий сплава FeRh. В разд. 3 формулируется теория среднего поля для описания магнитных и структурных переходов этого соединения. Выбор параметров модели и особенности решений уравнений теории обсуждаются в разд. 4. В разд. 5 с помощью техники двухвременных функций Грина анализируются изменения равновесных деформаций атомной решетки, возникающие при учете спин-волновых флуктуаций. Заключение содержится в разд. 6.

2. МОДЕЛЬ

Для описания магнитоупругого взаимодействия в FeRh используем модельный гамильтониан

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{me} + \mathcal{H}_T, \quad (1)$$

в котором магнитная часть

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_m = & -J_1 \sum_{\mathbf{n}, \delta_1} \mathbf{S}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta_1} - J_2 \sum_{\mathbf{n}, \delta_2} \mathbf{S}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta_2} - \\ & - J_3 \sum_{\mathbf{n}, \delta_3} \mathbf{S}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta_3} - J \sum_{\mathbf{n}, \delta} \mathbf{s}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta} \end{aligned} \quad (2)$$

описывает обменное магнитное взаимодействие между магнитными моментами атомов железа ($\mathbf{S}_{\mathbf{n}}$) в трех координационных сферах наименьшего радиуса (рис. 1) и между магнитными моментами атомов ближайших соседей Fe и Rh ($\mathbf{s}_{\mathbf{n}}$). Здесь δ_i — вектор позиций атомов железа из i -й координационной сферы ($i = 1, 2, 3$), а J_i — величина обменного взаимодействия между этими атомами и атомом железа, находящимся в центральном узле, J — константа обменного взаимодействия Fe–Rh.

Гамильтониан упругих деформаций кристалла кубической симметрии определяется выражением [27]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{el} = & \frac{1}{2} c_{11} (u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + u_{zz}^2) + \\ & + c_{12} (u_{xx} u_{yy} + u_{xx} u_{zz} + u_{yy} u_{zz}) + \\ & + 2c_{44} (u_{yz}^2 + u_{xz}^2 + u_{xy}^2), \end{aligned} \quad (3)$$

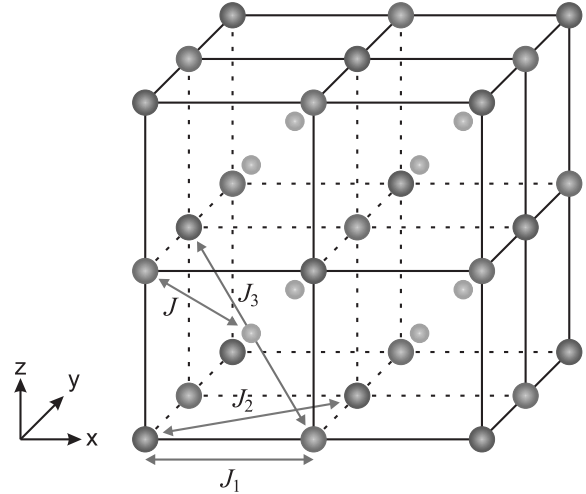


Рис. 1. Расширенная элементарная ячейка FeRh. Цветом показаны атомы железа первой подрешетки (красный), второй подрешетки (синий) и атомы родия (серый)

где u_{ij} — компоненты тензора деформаций, а c_{ij} — соответствующие коэффициенты упругости.

Магнитоупругое взаимодействие рассматривается в рамках двухионной модели, в которой его роль сводится к изменению обменного взаимодействия за счет появления упругих деформаций. Соответствующий вклад в гамильтониан для пары узлов ($\mathbf{m}, \mathbf{n}$) имеет вид [28]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{me}(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = & -D_1 (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) (\mathbf{S}_{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}}) - \\ & - \frac{1}{4} D_2 \left[(u_{xx} - u_{yy}) (\mathbf{S}_{\mathbf{m}}^x \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^x - \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^y \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^y) + \right. \\ & + \left. \frac{1}{3} (2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy}) (2\mathbf{S}_{\mathbf{m}}^z \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^z - \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^x \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^x - \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^y \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^y) \right] - \\ & - \frac{1}{2} D_3 [u_{xy} (\mathbf{S}_{\mathbf{m}}^x \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^y + \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^y \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^x) + u_{yz} (\mathbf{S}_{\mathbf{m}}^y \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^z + \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^z \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^y) + \\ & + u_{xz} (\mathbf{S}_{\mathbf{m}}^x \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^z + \mathbf{S}_{\mathbf{m}}^z \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^x)], \end{aligned} \quad (4)$$

где D_a ($a = 1, 2, 3$) — коэффициенты магнитоупругого взаимодействия, соответствующие определенным базисным комбинациям спиновых операторов, допускаемых кубической симметрией.

Как показывают расчеты *ab initio* электронной структуры FeRh [19], наиболее чувствительным к изменениям межатомного расстояния оказывается обменное взаимодействие ближайших соседей атомов железа. Поэтому в нашей модели мы учтем магнитоупругие взаимодействия только для таких

пар магнитных моментов. Соответствующий вклад в полный гамильтониан (1) может быть представлен в виде

$$\mathcal{H}_{me} = \sum_{\mathbf{n}, \delta_1} \mathcal{H}_{me}(\mathbf{n}, \mathbf{n} + \delta_1). \quad (5)$$

Слагаемое $\mathcal{H}_T$ учитывает деформацию кристалла, связанную с тепловым расширением, отличающуюся от деформации, вызванной магнитоупругим взаимодействием. Оно может быть выбрано в стандартной форме [29]

$$\mathcal{H}_T = -\alpha(T - T_0)(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}). \quad (6)$$

При этом предполагается, что тепловые деформации отсутствуют при температуре АФМ–ФМ-перехода T_0 , в которой наблюдается скачок относительного изменения объема [5]. Последний в рамках нашей модели связывается исключительно с ролью магнитоупругого взаимодействия, тогда как $\mathcal{H}_T$ явно зависит от коэффициента теплового расширения α , определяемого ангармоническими вкладами в потенциальную энергию кристалла как функцию атомных смещений [30]. Как будет показано в наших расчетах, учет ангармонических эффектов важен при высоких температурах.

3. ТЕОРИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Для описания магнитного АФМ–ФМ-перехода в FeRh рассмотрим вначале гамильтониан (1) в рамках приближения среднего поля, в котором роль параметров порядка играют намагниченности двух подрешеток атомов железа $\langle S_{1,2}^z \rangle$, намагниченность подрешетки атомов родия $\langle s^z \rangle$, а также равновесные деформации всестороннего сжатия $\langle u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} \rangle$ и одноосного растяжения $\langle 2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \rangle/3$.

Для дальнейших расчетов удобно выбрать расширенную элементарную ячейку, содержащую по 4 спина двух подрешеток атомов железа и 8 спинов родия (рис. 1).

Тогда магнитная часть гамильтониана может быть представлена в виде

$$\mathcal{H}_m = NE_0^{(m)} - \sum_{i=1}^{4N} H_1^{(m)} S_{1i}^z - \sum_{i=1}^{4N} H_2^{(m)} S_{2i}^z - \sum_{i=1}^{8N} H_3^{(m)} s_i^z, \quad (7)$$

в котором N — число расширенных элементарных ячеек, а энергия основного состояния определяется выражением

$$E_0^{(m)} = 24J_1 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle + 24J_2 (\langle S_1^z \rangle^2 + \langle S_2^z \rangle^2) +$$

$$+ 32J_3 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle + 32J \langle s^z \rangle (\langle S_1^z \rangle + \langle S_2^z \rangle).$$

Оставшиеся слагаемые в гамильтониане (7) описывают локальные взаимодействия спинов первой и второй подрешеток атомов Fe, S_{1i}^z и S_{2i}^z соответственно, а также спинов атомов Rh, s_i^z с молекулярными полями

$$H_1^{(m)} = z_1 J_1 \langle S_2^z \rangle + z_2 J_2 \langle S_1^z \rangle + z_3 J_3 \langle S_2^z \rangle + 2z_4 J \langle s^z \rangle, \quad (8)$$

$$H_2^{(m)} = z_1 J_1 \langle S_1^z \rangle + z_2 J_2 \langle S_2^z \rangle + z_3 J_3 \langle S_1^z \rangle + 2z_4 J \langle s^z \rangle, \quad (9)$$

$$H_3^{(m)} = z_4 J (\langle S_1^z \rangle + \langle S_2^z \rangle). \quad (10)$$

Здесь

$$z_1 = 6, \quad z_2 = 12, \quad z_3 = 8, \quad z_4 = 4$$

представляют собой числа ближайших соседей соответствующих координационных сфер.

Магнитоупругая часть гамильтониана (1) в приближении среднего поля приобретает вид

$$\mathcal{H}_{me} = NE_0^{(me)} - \sum_{i=1}^{4N} H_1^{(me)} S_{1i}^z - \sum_{i=1}^{4N} H_2^{(me)} S_{2i}^z, \quad (11)$$

где

$$E_0^{(me)} = [24D_1(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) + 4D_2(2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy})] \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle.$$

Поправки к молекулярным полям содержат вклады деформаций всестороннего сжатия и одноосного растяжения

$$H_{1,2}^{(me)} = z_1 D_1(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \langle S_{2,1}^z \rangle + \frac{1}{6} z_1 D_2(2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy}) \langle S_{2,1}^z \rangle. \quad (12)$$

С помощью стандартной процедуры можно получить выражение для свободной энергии решеточной и магнитной подсистем в расчете на объем расширенной элементарной ячейки $V_0 = 8a^3$ (a — постоянная кубической решетки FeRh)

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & \frac{1}{2} c_{11} V_0 (u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + u_{zz}^2) + \\ & + c_{12} V_0 (u_{xx} u_{yy} + u_{xx} u_{zz} + u_{yy} u_{zz}) + \\ & + 2c_{44} V_0 (u_{yz}^2 + u_{xz}^2 + u_{xy}^2) + \\ & + E_0^{(m)} + E_0^{(me)} - \alpha(T - T_0)(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) - \\ & - \frac{4}{\beta} \sum_{\alpha=1,2} \ln \left\{ \frac{\text{sh} \left[\beta (S + 1/2) (H_{\alpha}^{(m)} + H_{\alpha}^{(me)}) \right]}{\text{sh} \left[\beta (H_{\alpha}^{(m)} + H_{\alpha}^{(me)}) / 2 \right]} \right\} - \\ & - \frac{8}{\beta} \ln \left\{ \frac{\text{sh} \left[\beta (s + 1/2) H_3^{(m)} \right]}{\text{sh} \left[\beta H_3^{(m)} / 2 \right]} \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

в котором $\beta = 1/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана.

Минимизация $\mathcal{F}$ по спиновым параметрам порядка приводит к самосогласованным уравнениям

$$\langle S_{1,2}^z \rangle = S \mathcal{B}_S(x_{1,2}), \quad (14)$$

$$\langle s^z \rangle = s \mathcal{B}_s(x_3), \quad (15)$$

где аргументы функций Бриллюэна $\mathcal{B}_S(\dots)$ и $\mathcal{B}_s(\dots)$ определяются соответственно выражениями

$$x_{1,2} = \beta S \left(H_{1,2}^{(m)} + H_{1,2}^{(me)} \right), \quad (16)$$

$$x_3 = \beta S H_3^{(m)}. \quad (17)$$

Равновесные деформации всестороннего сжатия и одноосного растяжения определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \langle u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} \rangle = \\ = \frac{3[\alpha(T - T_0) + 24D_1 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle]}{V_0(c_{11} + 2c_{12})}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\langle 2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \rangle = \frac{24D_2 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{V_0(c_{11} - c_{12})}. \quad (19)$$

Для численного решения самосогласованных уравнений выбрано $S = 3/2$ для магнитных атомов Fe, и $s = 1/2$ для атомов Rh. Коэффициенты упругости $c_{11} = 218.7$ ГПа, $c_{12} = 188.5$ ГПа и объем расширенной элементарной ячейки $V_0 = 216 \text{ \AA}^3$ взяты из работы [31].

К сожалению, стандартное использование молекулярно-полевого подхода сталкивается с принципиальной трудностью. Если добиваться согласия с экспериментальными данными для температурных зависимостей полной намагниченности FeRh и относительного изменения объема, то оказывается, что решение для ферромагнитной фазы с ненулевой намагниченностью атомов Rh существует во всем температурном диапазоне ниже точки Кюри, и более того, оно является энергетически более выгодным, чем антиферромагнитная фаза, в которой атомы Rh находятся в немагнитном состоянии. Не исключено, что появление намагниченности в подсистеме атомов родия связано с возможной перестройкой спин-поляризованных состояний этих атомов, вызванное изменением упругих деформаций в точке АФМ–ФМ-перехода [20].

Чтобы учесть этот эффект в рамках феноменологического описания, можно перейти от свободной энергии (13), зависящей через молекулярные поля от намагниченностей атомов железа $\langle S_{1,2}^z \rangle$ и родия $\langle s^z \rangle$ к новому термодинамическому потенциалу $\Phi(\langle S_1^z \rangle, \langle S_2^z \rangle, \mu)$, в котором в качестве независимой переменной выступает параметр μ , внутреннее

магнитное поле, роль которого аналогична роли химического потенциала в большом каноническом ансамбле. Значения μ будут определяться заданным температурным поведением $\langle s^z \rangle$, согласующимся с экспериментом. Формально, указанный переход к Φ достигается стандартной заменой (см. Приложение)

$$H_3^{(m)} \rightarrow H_3^{(m)} - \mu \quad (20)$$

в гамильтониане (7) и сопутствующими изменениями в выражениях (13) и (17). При этом уравнение состояния (15) следует рассматривать как неявное уравнение для определения поля μ .

4. ВЫБОР ОБМЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ

Чтобы выполнить численный расчет, при котором температурное изменение намагниченности подрешетки родия считается известным, мы реализуем двухпроходную схему вычислений. На первом этапе мы определим температурную зависимость $\langle s^z \rangle$ при $\mu = 0$, используя уравнения среднего поля (14), (15) и (18), (19) и добиваясь хорошего согласия с экспериментально наблюдаемыми температурными поведением полной намагниченности и относительного изменения объема $\Delta V/V$ соединения FeRh. При этом оказывается, что при выборе обменных параметров, близких к расчетам *ab initio*, ферромагнитное решение существует во всем температурном диапазоне ниже точки Кюри T_c и всегда оказывается энергетически более выгодным в сравнении с антиферромагнитным решением. Поэтому для задания $\langle s^z \rangle$ на втором этапе мы будем полагать, что намагниченность родия равна нулю ниже температуры АФМ–ФМ-перехода T_0 , определяемой из эксперимента, и совпадает с расчетной намагниченностью $\langle s^z \rangle$ первого прохода выше T_0 .

Обсудим выбор модельных констант. Согласно расчетам *ab initio* [19], обменное взаимодействие каждого атома железа с его первым и третьим соседом в Fe-подсистеме оказывается отрицательным, что способствует установлению АФМ-порядка. При этом оказывается, что взаимодействие с третьим соседом слабо зависит от типа закладываемого в расчеты эталонного состояния (ФМ или АФМ), тогда как взаимодействие с первым соседом меняется от -8.0 мЭВ для АФМ-состояния до значений вблизи нуля для ФМ-состояния. В нашей модели мы можем связать такое резкое изменение с перенормировкой обменного взаимодействия между ближайшими соседями за счет вклада магнитоупругого взаимодействия. В этом случае эффективное обменное взаимо-

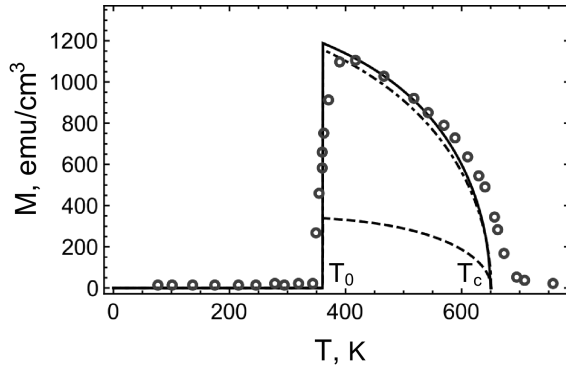


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности FeRh (штрихпунктирная линия — первый проход, сплошная линия — второй проход) и намагниченности атомов Rh в ФМ-фазе (штриховая линия). Для сравнения показаны экспериментальные данные (открытые синие кружки), взятые из работы [11]

действие между ближайшими соседями определяется выражением

$$\bar{J}_1 = J_1 + D_1 \langle u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} \rangle + \frac{1}{6} D_2 \langle 2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \rangle. \quad (21)$$

Тогда значение J_3 можно выбрать из требования, чтобы оно совпадало со значением $\bar{J}_1$ при $T = 0$, а соотношение между J_2 и J_3 было бы близко к значению, полученному в расчете *ab initio* ($J_2/J_3 \sim -0.2$).

Для расчета намагниченности родия в первом проходе был сделан следующий выбор соотношений для модельных обменных и магнитоупругих констант:

$$J_1/J_3 = 0.29, \quad J_2/J_3 = -0.18, \\ D_1/J_3 = -36.83, \quad D_2/D_1 = 0.1,$$

связывающий эти величины с константой обменного взаимодействия атома железа с третьим ближайшим соседом, для которого было принято значение $J_3 = -3.33 \cdot 10^{-22}$ Дж. Значение температуры АФМ–ФМ-перехода выбиралось равным $T_0 = 360$ К. При оценке обменного взаимодействия Fe–Rh следует учесть, что согласно расчетам *ab initio* за стабилизацию АФМ-состояния отвечает только обменное взаимодействие Fe–Fe, тогда как ФМ-порядок может быть стабилизирован за счет достаточно сильного обменного взаимодействия между соседними атомами железа и родия, поскольку в этой фазе магнитные моменты Rh отличны от нуля. В наших расчетах взято $J = -6.93 J_3$, что обеспечивает температуру перехода в парамагнитное состояние $T_c \approx 650$ К, близкую к наблюдаемой в экспериментах. Соответствующее поведение полной намагниченности

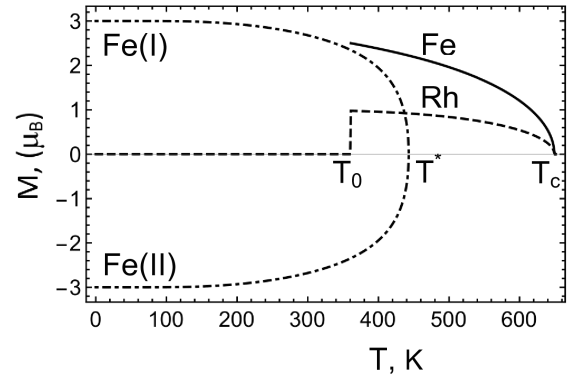


Рис. 3. Температурные зависимости намагниченностей атомов Fe(I) и Fe(II) в АФМ-фазе и атомов Fe и Rh в ФМ-фазе

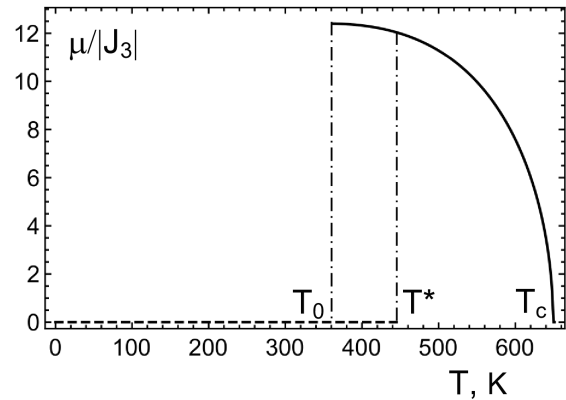


Рис. 4. Температурная зависимость поля μ в АФМ-фазе (штриховая линия) и в ФМ-фазе (сплошная линия). Область АФМ–ФМ-переходов первого рода отмечена штрихпунктирными линиями

FeRh (рис. 2) демонстрирует скачок при T_0 на величину, равную примерно 1200 ед. СГСМ/см³ близкую к экспериментально наблюдаемым значениям [11, 32–34]. На этом же рисунке представлена температурная зависимость намагниченности, связанной с атомами родия.

При втором проходе были немного изменены значения констант

$$J_1/J_3 = 0.31, \quad J/J_3 = -6.6, \quad D_1/J_3 = -31.93,$$

вместо 0.29, -6.93 и -36.83 первого этапа соответственно численное значение J_3 было взято $J_3 = -4.15 \cdot 10^{-22}$ Дж (вместо $-3.33 \cdot 10^{-22}$ Дж ранее), а остальные параметры не менялись.

Температурное поведение намагниченностей подрешеток железа и родия представлено на рис. 3. При температуре ниже T_0 единственным возможным является только АФМ-решение. В интервале тем-

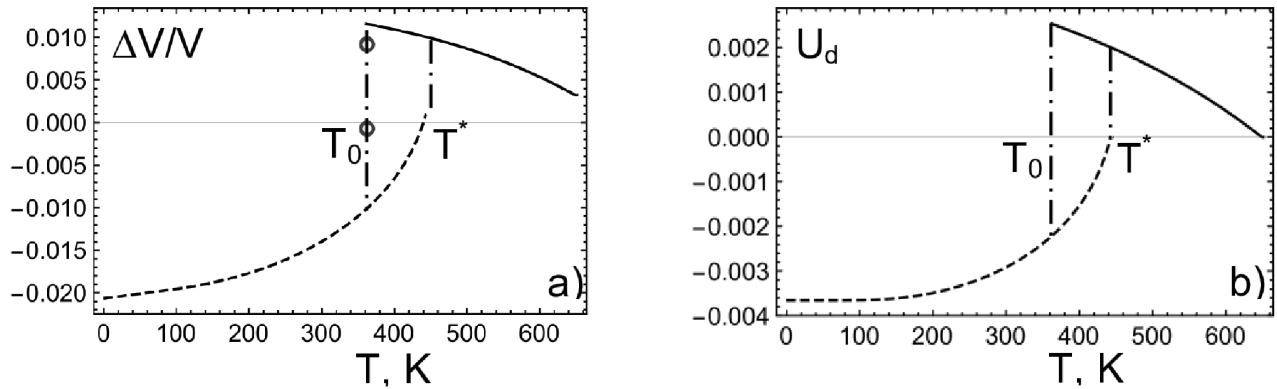


Рис. 5. Температурные зависимости относительного изменения объема (а) и деформации одноосного расширения (б). Область АФМ–ФМ-переходов первого рода отмечена штрихпунктирными линиями. Для сравнения показан скачок относительного изменения объема (открытые синие кружки), полученный из экспериментальных данных работы [5] для постоянной решетки при температурах 363 и 364.5 К

ператур от T_0 до $T^* \approx 440$ К возникает ФМ-фаза, свободная энергия которой всегда меньше свободной энергии метастабильного АФМ-состояния, которое также существует в данном диапазоне. Это означает, что АФМ–ФМ-переход является фазовым переходом первого рода, что согласуется с экспериментальными наблюдениями [5]. Самосоглазованное температурное поведение поля μ показано на рис. 4. На основе этого расчета разумно предположить, что скачок внутреннего поля μ в области АФМ–ФМ-перехода приводит к относительному сдвигу парциальных спин-поляризованных плотностей состояний атома родия на уровне Ферми, что вызывает появление ненулевого магнитного момента.

Относительное изменение объема, определяемое соотношением (18) и представленное на рис. 5 а, испытывает скачок в точке АФМ–ФМ-перехода на величину около 1%, что также неплохо согласуется с экспериментальными данными [5, 12]. Соответствующее поведение параметра порядка, связанного с одноосными деформациями,

$$U_d = \langle 2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \rangle / 3,$$

показано на рис. 5 б. Характер и диапазон изменения этой величины определяется знаком и величиной константы D_2 . Основное отличие между температурным поведением параметров $\Delta V/V$ и U_d возникает в парамагнитной области, где U_d обращается в нуль, а относительное изменение объема остается конечным из-за эффекта теплового расширения кристалла, контролируемого параметром α в выражении (6). В наших расчетах было выбрано значе-

ние $\alpha = D_1/28$. Отметим, что о наблюдении тетрагональных искажений в области сосуществования АФМ- и ФМ-фаз сообщалось в работе [35].

В рамках представленной модели удастся получить температурное изменение эффективного обменного взаимодействия $\tilde{J}_1$, качественно согласующееся с расчетами *ab initio* (рис. 6). Можно сделать вывод, что специфика АФМ–ФМ-перехода связана с температурным изменением эффективного обменного взаимодействия $\tilde{J}_1$ заданного атома железа с ближайшими соседями первой координационной сферы атомов Fe. Температурная перенормировка $\tilde{J}_1$ возникает за счет вкладов магнитоупругого взаимодействия (21), благодаря которым оно сравнимо по величине и знаку с J_3 при $T = 0$ и способствует стабилизации АФМ-фазы. Однако с приближением

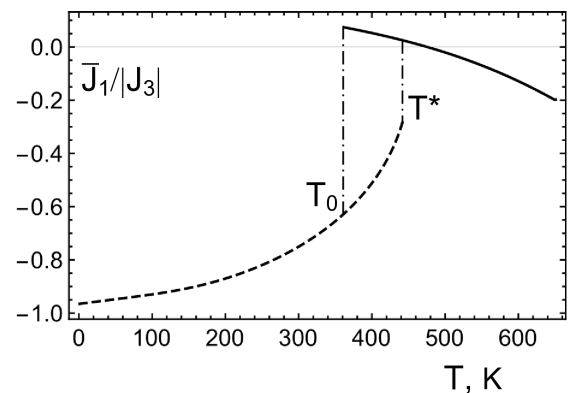


Рис. 6. Температурное изменение эффективного обменного взаимодействия $\tilde{J}_1$ (в единицах J_3) атома Fe а с первыми ближайшими соседями в подсистеме атомов железа

к температуре перехода T_0 величина $\bar{J}_1$ резко уменьшается и принимает малое положительное значение, способствующее установлению ФМ-порядка. Окончательная стабилизация ФМ-фазы происходит за счет спиновой поляризации Rh-атомов, с помощью которой сильное ферромагнитное взаимодействие атомов железа и родия вкуче с $\bar{J}_1$ и J_2 подавляют конкурирующее антиферромагнитное обменное взаимодействие J_3 .

5. УЧЕТ СПИН-ВОЛНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Ниже с помощью техники двухвременных функций Грина анализируются изменения равновесных деформаций, возникающих при учете спин-волновых флуктуаций. Как следует из гамильтониана магнитоупругого взаимодействия (4), эти поправки связаны с ненулевыми корреляционными функциями $\langle S_{\mathbf{m}}^{\alpha} S_{\mathbf{n}}^{\beta} \rangle$, в которых хотя бы одно α или β не совпадает с z . В приближении Боголюбова–Тябликова, в котором поперечные спиновые флуктуации не меняют z -составляющей намагниченности, оказываются отличными от нуля только корреляционные функции вида

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^x \rangle, \quad \langle S_{1\mathbf{m}}^y S_{2\mathbf{n}}^y \rangle, \quad \langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^y \rangle, \quad \langle S_{1\mathbf{m}}^y S_{2\mathbf{n}}^x \rangle.$$

Приведем детали расчета на примере первой из этих функций, которую с помощью циркулярных компонент $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ удобно представить в виде

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^x \rangle = \frac{1}{4} \langle S_{1\mathbf{m}}^{-} S_{2\mathbf{n}}^{+} \rangle + \frac{1}{4} \langle S_{1\mathbf{m}}^{+} S_{2\mathbf{n}}^{-} \rangle.$$

Для вычисления первой корреляционной функции в правой части, определим запаздывающие функции Грина

$$\langle \langle S_{2\mathbf{n}}^{+}(t) | S_{1\mathbf{m}}^{-}(0) \rangle \rangle = -i\theta(t) \langle [S_{2\mathbf{n}}^{+}(t), S_{1\mathbf{m}}^{-}] \rangle,$$

$$\langle \langle S_{1\mathbf{n}}^{+}(t) | S_{1\mathbf{m}}^{-}(0) \rangle \rangle = -i\theta(t) \langle [S_{1\mathbf{n}}^{+}(t), S_{1\mathbf{m}}^{-}] \rangle,$$

уравнения движения фурье-образов которых образуют замкнутую систему

$$\begin{aligned} & [\omega + E_{21}(\mathbf{k})] \langle \langle S_2^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega) - \\ & - \left(z_1 J_1(\mathbf{k}) + z_3 J_3(\mathbf{k}) \right) \langle S_2^z \rangle \langle \langle S_1^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega) = 0, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & [\omega + E_{11}(\mathbf{k})] \langle \langle S_1^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega) - \\ & - \left(z_1 J_1(\mathbf{k}) + z_3 J_3(\mathbf{k}) \right) \langle S_1^z \rangle \langle \langle S_2^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega) = 2 \langle S_1^z \rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь определены фурье-компоненты функций Грина

$$\begin{aligned} & \langle \langle S_{\mathbf{a}\mathbf{n}}^{\alpha}(t) | S_{\mathbf{b}\mathbf{m}}^{\beta}(0) \rangle \rangle = \\ & = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{n} - \mathbf{m}) - i\omega t) \langle \langle S_{\mathbf{a}}^{\alpha} | S_{\mathbf{b}}^{\beta} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega), \end{aligned}$$

зависящие от волнового вектора $\mathbf{k}$ и частоты ω , и обменных взаимодействий

$$\begin{aligned} J_1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{z_1} \sum_{\delta_1} J_1 \cos(\mathbf{k}\delta_1) = \\ &= \frac{J_1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)], \\ J_2(\mathbf{k}) &= \frac{1}{z_2} \sum_{\delta_2} J_2 \cos(\mathbf{k}\delta_2) = \\ &= \frac{J_2}{3} [\cos(k_x a) \cos(k_y a) + \cos(k_x a) \cos(k_z a) + \\ &+ \cos(k_y a) \cos(k_z a)], \\ J_3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{z_3} \sum_{\delta_3} J_3 \cos(\mathbf{k}\delta_3) = \cos(k_x a) \cos(k_y a) \cos(k_z a), \end{aligned}$$

а также введены сокращенные обозначения

$$\begin{aligned} E_{11}(\mathbf{k}) &= z_1 J_1 \langle S_2^z \rangle + z_2 [J_2 - J_2(\mathbf{k})] \langle S_1^z \rangle + \\ &+ z_3 J_3 \langle S_2^z \rangle + \frac{1}{2} z_4 J \langle s^z \rangle, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} E_{21}(\mathbf{k}) &= z_1 J_1 \langle S_1^z \rangle + z_2 [J_2 - J_2(\mathbf{k})] \langle S_2^z \rangle + \\ &+ z_3 J_3 \langle S_1^z \rangle + \frac{1}{2} z_4 J \langle s^z \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Из системы (22), (23) находим

$$\langle \langle S_2^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2B(\mathbf{k}) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{[\omega - \omega_1(\mathbf{k})] [\omega - \omega_2(\mathbf{k})]},$$

где

$$B(\mathbf{k}) = z_1 J_1(\mathbf{k}) + z_3 J_3(\mathbf{k}),$$

а собственные частоты определяются выражениями

$$\begin{aligned} \omega_{1,2}(\mathbf{k}) &= -\frac{E_{11}(\mathbf{k}) + E_{21}(\mathbf{k})}{2} \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_{11}(\mathbf{k}) - E_{21}(\mathbf{k}))^2 + 4B^2(\mathbf{k}) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}. \end{aligned} \quad (26)$$

Используем связь скачка функции Грина при переходе через вещественную ось со спектральной плотностью

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{S_2^{+} S_1^{-}}(\mathbf{k}, \omega) &= -in_B(\omega) [\langle \langle S_2^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega - i\epsilon) - \\ &- \langle \langle S_2^{+} | S_1^{-} \rangle \rangle(\mathbf{k}, \omega + i\epsilon)], \end{aligned} \quad (27)$$

что дает

$$\mathcal{J}_{S_2^+ S_1^-}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{4\pi n_B(\omega) B(\mathbf{k}) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{\omega_1(\mathbf{k}) - \omega_2(\mathbf{k})} \times \\ \times [\delta(\omega - \omega_1(\mathbf{k})) - \delta(\omega - \omega_2(\mathbf{k}))]. \quad (28)$$

Здесь

$$n_B(\omega) = [\exp(\beta\omega) - 1]^{-1}$$

— бозе-функция распределения.

Тогда искомая корреляционная функция

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^- S_{2\mathbf{n}}^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{J}_{S_2^+ S_1^-}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{n})} = \\ = \frac{2\langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{N} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}} B(\mathbf{k}) \frac{n_B(\omega_1(\mathbf{k})) - n_B(\omega_2(\mathbf{k}))}{\omega_1(\mathbf{k}) - \omega_2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{n})}. \quad (29)$$

Аналогичный расчет приводит к выражению

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^+ S_{2\mathbf{n}}^- \rangle = \frac{2\langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{N} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}} B(\mathbf{k}) \frac{n_B(\tilde{\omega}_1(\mathbf{k})) - n_B(\tilde{\omega}_2(\mathbf{k}))}{\tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\omega}_2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{n})}, \quad (30)$$

в котором

$$\tilde{\omega}_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{E_{11}(\mathbf{k}) + E_{21}(\mathbf{k})}{2} \pm \\ \pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_{11}(\mathbf{k}) - E_{21}(\mathbf{k}))^2 + 4B^2(\mathbf{k}) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}. \quad (31)$$

Тогда имеем

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^x \rangle = -\frac{\langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{2N} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}} B(\mathbf{k}) \frac{\text{sh} \left[\frac{\beta}{2} (\tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\omega}_2(\mathbf{k})) \right]}{\text{sh} \left[\frac{\beta}{2} \tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) \right] \text{sh} \left[\frac{\beta}{2} \tilde{\omega}_2(\mathbf{k}) \right] (\tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\omega}_2(\mathbf{k}))} \times \\ \times e^{i\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{n})}. \quad (32)$$

Очевидно,

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^y S_{2\mathbf{n}}^y \rangle = \langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^x \rangle. \quad (33)$$

Можно показать, не прибегая к явным вычислениям, что

$$\langle S_{1\mathbf{m}}^x S_{2\mathbf{n}}^y \rangle = -\langle S_{1\mathbf{m}}^y S_{2\mathbf{n}}^x \rangle, \quad (34)$$

а поскольку в (4) входит их сумма, то эти корреляционные функции не вносят дополнительного вклада в магнитоупругое взаимодействие.

Спин-волновые возбуждения вносят дополнительный вклад в свободную энергию расширенной элементарной ячейки, связанный с магнитоупругими взаимодействиями

$$\tilde{\mathcal{F}}_{me} = 48D_1 (\tilde{u}_{xx} + \tilde{u}_{yy} + \tilde{u}_{zz}) \gamma(T) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle - \\ - 4D_2 (2\tilde{u}_{zz} - \tilde{u}_{xx} - \tilde{u}_{yy}) \gamma(T) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle,$$

в котором результат (32) для ближайших соседей представлен в виде

$$\langle S_1^x S_2^x \rangle = \langle S_1^y S_2^y \rangle = -\gamma(T) \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle$$

и определен тензор упругих деформаций $\tilde{u}_{ij}$, вызванный спин-волновыми возбуждениями.

Это изменение свободной энергии компенсируется соответствующим вкладом, связанным с упругими взаимодействиями

$$\tilde{\mathcal{F}}_e = \frac{1}{2} c_{11} V_0 (\tilde{u}_{xx}^2 + \tilde{u}_{yy}^2 + \tilde{u}_{zz}^2) + \\ + c_{12} V_0 (\tilde{u}_{xx} \tilde{u}_{yy} + \tilde{u}_{xx} \tilde{u}_{zz} + \tilde{u}_{yy} \tilde{u}_{zz}) + \\ + 2c_{44} V_0 (\tilde{u}_{yz}^2 + \tilde{u}_{xz}^2 + \tilde{u}_{xy}^2),$$

что определяет соответствующие добавки к равновесным деформациям всестороннего сжатия

$$\langle \tilde{u}_{xx} + \tilde{u}_{yy} + \tilde{u}_{zz} \rangle = -\gamma(T) \frac{144D_1 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{V_0 (c_{11} + 2c_{12})}, \quad (35)$$

и одноосного растяжения

$$\langle 2\tilde{u}_{zz} - \tilde{u}_{xx} - \tilde{u}_{yy} \rangle = \gamma(T) \frac{24D_2 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{V_0 (c_{11} - c_{12})}. \quad (36)$$

С учетом кубической симметрии кристалла температурно-зависящий коэффициент γ может быть представлен в виде

$$\gamma(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} S(\mathbf{k}) B(\mathbf{k}) \times \\ \times \frac{\text{sh} \left[\frac{\beta}{2} (\tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\omega}_2(\mathbf{k})) \right]}{\text{sh} \left[\frac{\beta}{2} \tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) \right] \text{sh} \left[\frac{\beta}{2} \tilde{\omega}_2(\mathbf{k}) \right] (\tilde{\omega}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\omega}_2(\mathbf{k}))}, \quad (37)$$

где определен структурный формфактор

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)].$$

Объединяя выражения (35), (36) с соответствующими результатами для среднего поля (18), (19), получим окончательный результат:

$$\langle u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} \rangle = \\ = \frac{3 \left[\alpha(T - T_0) + 24\tilde{D}_1 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle \right]}{V_0 (c_{11} + 2c_{12})}, \quad (38)$$

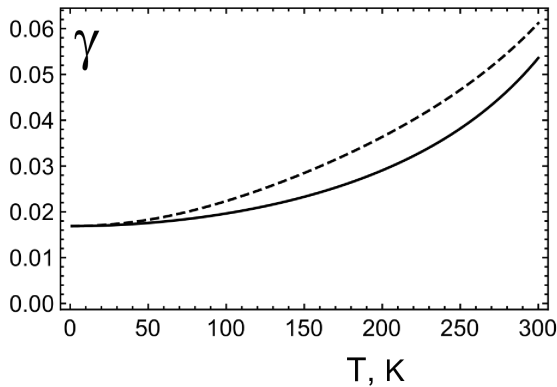


Рис. 7. Температурное изменение γ : штриховая кривая — численный расчет по формуле (37), сплошная кривая — аналитическая аппроксимация $\gamma_0 + \gamma_1$, определяемая уравнениями (41) и (43)

$$\langle 2u_{zz} - u_{xx} - u_{yy} \rangle = \frac{24\tilde{D}_2 \langle S_1^z \rangle \langle S_2^z \rangle}{V_0 (c_{11} - c_{12})}, \quad (39)$$

в котором роль спин-волновых флуктуаций сводится к температурной перенормировке констант магнитоупругой связи

$$\tilde{D}_1 = D_1 [1 - 2\gamma(T)],$$

$$\tilde{D}_2 = D_2 [1 + \gamma(T)].$$

Для оценки γ в области низких температур, $T \ll T_0$, удобно представить выражение (37) в виде

$$\gamma(T) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{S(\mathbf{k})B(\mathbf{k})}{\omega_1(\mathbf{k})} \left[n_B(\omega_1(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right], \quad (40)$$

в котором можно выделить часть, связанную с нулевыми колебаниями и слабо зависящую от температуры:

$$\gamma_0 = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{S(\mathbf{k})B(\mathbf{k})}{\omega_1(\mathbf{k})} \quad (41)$$

и вклад, связанный с тепловым возбуждением магнов:

$$\gamma_1(T) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{S(\mathbf{k})B(\mathbf{k})}{\omega_1(\mathbf{k})} n_B(\omega_1(\mathbf{k})). \quad (42)$$

Аналитическая оценка (42) приводит к выражению

$$\gamma_1(T) \approx \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{(k_B T)^2}{|\langle S_z^2 \rangle|^3} |z_1 J_1 - 2z_2 J_2 + 3z_3 J_3|^{-\frac{3}{2}} \times |z_1 J_1 + z_3 J_3|^{-\frac{1}{2}}. \quad (43)$$

График температурного поведения $\gamma(T)$ представлен на рис. 5. Очевидно, что величина температурной перенормировки констант магнитоупругой

связи составляет несколько процентов. В силу положительности γ рост температуры уменьшает $\tilde{D}_1$, что приводит к уменьшению деформации всестороннего сжатия за счет спиновых флуктуаций и, наоборот, температурное возбуждение спиновых волн способствует увеличению $\tilde{D}_2$, контролирующей величину деформации одноосного растяжения.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложена эффективная теория среднего поля для объяснения особенностей магнитных фазовых переходов в сплаве FeRh, которая учитывает упругие степени свободы и их взаимодействие с магнитной подсистемой. С учетом ключевой роли родия в магнитном поведении этого сплава особенностью нашего описания является то, что вместо средней намагниченности атомов родия, традиционного параметра порядка в статистической модели канонического ансамбля, нами в качестве параметра порядка рассматривается сопряженное намагниченности Rh «внутреннее» магнитное поле, температурная эволюция которого определяется самосогласованным образом наряду с намагниченностями атомов железа первой и второй подрешеток и параметрами порядка упругой подсистемы, описывающими деформацию всестороннего сжатия и одноосного растяжения. Если полагать, что температурное поведение намагниченности родия известно, то такое рассмотрение соответствует статистической модели большого канонического ансамбля. Введение внутреннего магнитного поля позволяет эффективно учесть расщепление спин-поляризованных плотностей электронных состояний Rh на уровне Ферми, которое ответственно за возникновение ненулевого магнитного момента.

В рамках представленного подхода удается рассчитать температурные зависимости полной намагниченности и относительного изменения объема, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем температурном диапазоне, и показать, что АФМ–ФМ-переход представляет собой фазовый переход первого рода. Объясняется возникновение упругих флуктуаций, понижающих симметрию решетки до тетрагональной, и показывается их усиление за счет теплового возбуждения спиновых волн. Выбор констант обменного взаимодействия, согласующийся с расчетами *ab initio* электронной структуры, позволил выявить ведущий механизм АФМ–ФМ-перехода — перенормировку обменного взаимодействия между магнитными

моментами ближайших соседей подсистемы атомов железа двухионным магнитоупругим взаимодействием.

Резкий рост внутреннего магнитного поля в области АФМ–ФМ-перехода, вызывающий появление магнитного момента у атомов Rh и сопровождающийся резким изменением решеточных деформаций, позволяет предположить, что именно упругие деформации, вызванные *изменением параметров решетки* при допировании FeRh магнитными ионами, ответственны за существенное изменение температуры АФМ–ФМ-перехода (как в сторону роста, так и в сторону понижения) [23], а не *стабилизация ФМ-фазы* магнитными моментами допируемых ионов. Искажения решетки могут заметным образом влиять на относительный сдвиг парциальных плотностей спин-поляризованных электронных состояний Rh на уровне Ферми. Для проверки этого предположения нужны дальнейшие целенаправленные экспериментальные исследования и проведение соответствующих расчетов *ab initio*.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект госзадания FEUZ-2023-0017 (А. С. О.), тема «Поток» № 122021000031-8 (Э. З. В.) и «Магнит» № 122021000034-9 (Н. В. Б.). Работа И. С. К. поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Программа развития Уральского федерального университета в рамках Программы «Приоритет-2030»). Работа А. А. Т. выполнена благодаря финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ПРИЛОЖЕНИЕ.

ПОЛЕ μ И ПРИНЦИП МАКСИМУМА ИНФОРМАЦИОННОЙ ЭНТРОПИИ

Предположим, что система может находиться в одном из N состояний и вероятность ее нахождения в k -м состоянии равна p_k ($k = 1, \dots, N$). Пусть энергия системы E и намагниченность атомов родия s^z (в расчете на элементарную ячейку) принимают значения E_k и s_k^z , когда система находится в состоянии k . Рассмотрим ситуацию, когда средние значения E и $\langle s^z \rangle$ для системы фиксированы, и определим с помощью метода неопределенных множителей Лагранжа [36] функцию распределения p_k , отвечающую максимуму информационной энтропии

$$S = -k_B \sum_k p_k \ln p_k$$

при дополнительных условиях

$$E = \sum_k p_k E_k, \quad \langle s^z \rangle = \sum_k p_k s_k^z.$$

Определяя экстремум выражения

$$f = -k_B \sum_k (p_k \ln p_k - \alpha p_k + \beta E_k + \beta \mu s_k^z), \quad (44)$$

в котором дополнительные условия учитываются с помощью неопределенных множителей α , β и μ , получаем искомое распределение

$$p_k = \frac{1}{\Xi} \exp(-\beta E_k - \beta \mu s_k^z), \quad (45)$$

где

$$\Xi = \sum_k \exp(-\beta E_k - \beta \mu s_k^z).$$

При этом

$$\langle s^z \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi. \quad (46)$$

Из выражения (45) следует, что если энергия магнитной подсистемы определяется выражением (7), то полученное распределение сводится к стандартному каноническому распределению с перенормировкой молекулярного поля, действующего на

спин атома родия (20). Учитывая явное выражение для

$$H_3^{(m)} = z_4 J (\langle S_1^z \rangle + \langle S_2^z \rangle), \quad J > 0,$$

можно заключить, что в АФМ-фазе, когда $H_3^{(m)} = 0$, появление поля $\mu > 0$ невыгодно, поскольку это привело бы к уменьшению вероятности (45). В ФМ-фазе μ будет направлено антипараллельно $H_3^{(m)}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Fallot, Ann. Phys.(Paris) **10**, 291 (1938).
2. M. Fallot and R. Horcart, Rev. Sci. **77**, 498 (1939).
3. J. B. Staunton, R. Banerjee, M. dos S. Dias et al., Phys. Rev. B **89**, 054427 (2014).
4. L. Muldrew and F. de Bergevin, J. Chem. Phys. **35**, 1257 (1961).
5. А. И. Захаров, А. М. Кадомцева, Р. З. Левитин и др., ЖЭТФ **46**, 2003 (1964).
6. N. A. Zarkevich and D. D. Jonson, Phys. Rev. B **97**, 014202 (2018).
7. G. Shirane, C. W. Chen, P. A. Flin et al., J. Appl. Phys. Suppl. **33**, 1044 (1963).

8. G. Shirane, R. Nathans, and C. W. Chen, *Phys. Rev.* **134**, A1547 (1964).
9. J. S. Couvel, *J. Appl. Phys.* **37**, 1257 (1966).
10. M. P. Annaorazov, K. A. Asatryan, G. Myalikgulyev et al., *Cryogenics* **32**, 867 (1992).
11. J. S. Kouvel and J. Hartelius, *J. Appl. Phys.* **33**, 1343 (1962).
12. M. R. Ibarra and Algarabel, *Phys. Rev. B* **50**, 4196 (1994).
13. Р. Р. Гимаев, А. А. Ваулин, А. Ф. Губкин и др., *ФММ* **121**, 907 (2020).
14. C. Kittel, *Phys. Rev.* **120**, 335 (1960).
15. C. P. Bean and D. S. Rotbell, *Phys. Rev.* **126**, 104 (1962).
16. E. Valiev, R. Gimaev, V. Zverev et al., *Intermetallics* **108**, 81 (2019).
17. M. E. Gruner, T. Hoffman, and P. Entel, *Phys. Rev. B* **67**, 064415 (2003).
18. L. M. Sandratckii and P. Navropoulos, *Phys. Rev. B* **83**, 174408 (2011).
19. S. Polesya, S. Mankovsky, D. Ködderitzsch et al., *Phys. Rev. B* **93**, 024423 (2016).
20. М. И. Куркин, А. В. Телегин, П. А. Агзамова и др., *ФММ* **123**, 579 (2022).
21. G. Ju, J. Hohlfeld, B. Bergman et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 197403 (2004).
22. S. O. Mariager, F. Pressacco, G. Ingold et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 087201 (2012).
23. S. Yuasa, Y. Otani, H. Miyajima et al., *IEEE Trans. J. Mag. Jpn.* **9** (6), 202 (1994).
24. K. Nishihara, Y. Nakazawa, L. Li et al., *Mater. Trans.* **49**, 753 (2008).
25. A. S. Komlev, G. F. Cabeza, A.M. Chirkova et al. *Metals* **13**, 1650 (2023).
26. A. S. Komlev, R. A. Makarin, K. P. Skokov et al., *Metall. Mater. Trans. A* **54**, 3683 (2023).
27. Г. А. Смоленский (ред.), В. В. Леманов, Г. М. Недлин и др., *Физика магнитных диэлектриков*, Наука, Ленинград (1974).
28. E. Callen, *Phys. Rev.* **139**, A455 (1965).
29. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965).
30. С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, *Квантовая физика твердого тела*, Наука, Москва (1983).
31. W. He, H. Huang, and X. Ma, *Materials Lett.* **195**, 156 (2017).
32. S. Maat, J.-U. Thiele, and E. E. Fullerton, *Phys. Rev. B* **72**, 214432 (2005).
33. J. Cao, N.T. Nam, S. Inoue et al., *J. Appl. Phys.* **103**, 07F501 (2008).
34. I. Suzuki, T. Koike, M. Itoh et al., *J. Appl. Phys.* **105**, 07E501 (2009).
35. А. И. Захаров, *ФММ* **24**, 84 (1967).
36. *Задачи по термодинамике и статистической физике*, под ред. П. Ландсберга, Мир, Москва (1974).