

Теория магнитной структуры в соединении MnCoSi

Ю.Д. Заворотнев, Л.И. Медведева

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: zavorot@mail.fti.ac.donetsk

Статья поступила в редакцию 29 июля 2007 г.

Рассмотрены возможные механизмы образования длиннопериодической структуры в соединении MnCoSi. Установлено, что основную роль в теоретическом рассмотрении играют инварианты, содержащие первую пространственную производную от неприводимых магнитных векторов в различных степенях. Показано, что при формировании спиральной структуры только антиферромагнитными векторами возможно спонтанное вовлечение и ферромагнитного вектора, при этом нарушается ортогональность вращающихся векторов. Рассмотрение проводили как с учетом, так и без учета приближения постоянства модулей неприводимых векторов. Это позволило рассмотреть эволюцию магнитной сверхструктуры с изменением температуры.

Розглянуто можливі механізми утворення довгоперіодичної структури в сполуці MnCoSi. Встановлено, що основну роль у теоретичному розгляді грають інваріанти, що містять першу просторову похідну від неприводимих магнітних векторів у різних ступенях. Показано, що при формуванні спіральної структури тільки антиферомагнітними векторами можливо спонтанне залучення й феромагнітного вектора, при цьому порушується ортогональність обертових векторів. Розгляд проводили як з урахуванням, так і без урахування наближення сталості модулів неприводимих векторів. Це дозволило розглянути еволюцію магнітної надструктури зі зміною температури.

PACS: 75.40.Mg Численное моделирование;
75.10.Lp Зонные и локализованные модели.

Ключевые слова: фазовый переход, неприводимый вектор, длиннопериодическая структура.

Введение

Соединение MnCoSi обладает орторомбической структурой типа Co_2P , которая принадлежит пространственной группе $Pnma = D_{2h}^{16}$ [1,2]. Магнитные ионы расположены в трех неэквивалентных 4(c) положениях, причем ионы Co занимают положения с тетрагональной металлоидной координацией, а ионы Mn — с квадратнопирамидальной [2]. Позиции четырех ионов, приходящихся на единичную ячейку, задаются следующим образом: $x, 1/4, z$; $\bar{x}, 3/4, \bar{z}$; $1/2 - x, 3/4, 1/2 + z$; $1/2 + x, 1/4, 1/2 - z$ (рис. 1).

Согласно данным нейтронографии [3], при низких температурах в MnCoSi имеет место длиннопериодическая структура типа SS с вектором распространения вдоль OZ , образованная антиферромагнитными неприводимыми векторами. При повышении температуры до критической T_c наблюдается процесс разрушения спиральной структуры и появляется FM (фер-

ромагнитный) вектор, который вращается вместе с AFM (антиферромагнитный) векторами. При прибли-

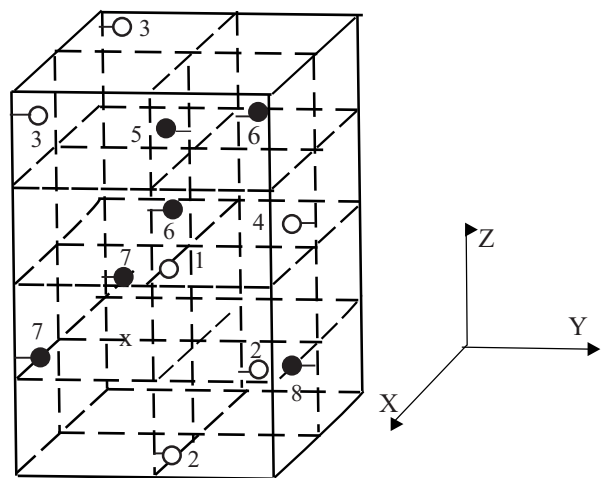


Рис. 1. Кристаллическая структура соединения MnCoSi.

жении к линии фазового перехода (ФП) в окрестности T_C спиральная структура разрушается и переходит в FM состояние, причем, FM вектор направлен вдоль оси b (OX). Как температура T_C фазового перехода SS-FM, так и температура Кюри T_C существенно зависят от способа приготовления образцов [4].

В настоящей работе теоретически проанализирован механизм образования спиральной структуры, наблюдаемой в MnCoSi, с использованием симметричного анализа. При изучении вопроса формирования спиральной структуры использована феноменологическая теория, предложенная в [5] для зонных металлов. При таком рассмотрении проведено разложение термодинамического потенциала по степеням инвариантов, составленных из магнитных параметров порядка. Для определения этих инвариантов целесообразно использовать метод целого рационального базиса инвариантов (ЦРБИ) [6].

Обычно при феноменологическом описании свойств магнетиков сложной структуры удобно использовать в качестве параметра магнитного порядка обобщенные параметры, в частности вектора ферро- и антиферромагнетизма. В проводящих магнетиках, к которым относится соединение MnCoSi, спиновая плотность не является строго локализованной на центрах и магнитные моменты не фиксированы по абсолютной величине. Использование обобщенных параметров в таких случаях не только оправданно, но и чрезвычайно удобно при учете спин-флуктуационных эффектов. Обобщенные параметры порядка рассматриваются как пространственно зависящие классические поля типа $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, где $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ — полная спиновая плотность в точке \mathbf{r} . Под точкой \mathbf{r} подразумевается объем $|\Delta r|^3$, в пределах которого величина $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ постоянна (ее объем для одноатомных кристаллохимических ячеек $|\Delta r|^3$).

Феноменологическое рассмотрение магнитной структуры

В соединении MnCoSi кристаллохимическая и магнитная ячейки для спирального состояния совпадают [3]. Следовательно, соответствующее рассмотрение можно проводить с помощью представлений звезды $\bar{k} = 0$ группы симметрии D_{2h}^{16} . В табл. 1 приведены перестановки магнитоактивных ионов под действием генераторов группы D_{2h}^{16} без указания возвращающих трансляций. В первой строке таблицы в скобках указаны сопровождающие трансляции. Отсюда имеем следующие неприводимые вектора (НПВ):

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 + \mathbf{s}_4; \quad \mathbf{F}_2 = \mathbf{s}_5 + \mathbf{s}_6 + \mathbf{s}_7 + \mathbf{s}_8;$$

$$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_3 - \mathbf{s}_4; \quad \mathbf{Q}_2 = \mathbf{s}_5 + \mathbf{s}_6 - \mathbf{s}_7 - \mathbf{s}_8;$$

$$\mathbf{Q}_3 = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 - \mathbf{s}_4; \quad \mathbf{Q}_4 = \mathbf{s}_5 - \mathbf{s}_6 + \mathbf{s}_7 - \mathbf{s}_8;$$

$$\mathbf{Q}_5 = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_3 + \mathbf{s}_4; \quad \mathbf{Q}_6 = \mathbf{s}_5 - \mathbf{s}_6 - \mathbf{s}_7 + \mathbf{s}_8. \quad (1)$$

Используя методику [6], построим целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ), обусловленный обменными взаимодействиями и содержащий пространственные производные от НПВ. Запишем ряд вложений нормальных подгрупп

$$D_{2h} \otimes C_\infty \otimes R \supset D_2 \otimes C_\infty \otimes R \supset C_2 \otimes C_\infty \otimes R \supset C_\infty \otimes R, \quad (2)$$

где R — операция обращения времени, которая является операцией инверсии спинового пространства, C_∞ — двумерная группа вращений, описывающая трансверсальную изотропию, фактор-группы определяют так:

$$A_1 = 2_z; \quad A_2 = 2_x; \quad A_3 = m_z. \quad (3)$$

Таблица 1. Перестановки магнитоактивных ионов под действием генераторов группы D_{2h}^{16} .

Номер иона	$2_z(101)$	$2_x(110)$	$m_z(011)$
1 (Mn)	3	2	4
2 (Mn)	4	1	3
3 (Mn)	1	4	2
3 (Mn)	2	3	1
5 (Co)	7	6	8
6 (Co)	8	5	7
7 (Co)	5	8	6
8 (Co)	6	7	5

Первым шагом построения ЦРБИ, согласно [7], является составление из компонент тензоров второго ранга, образованных первыми пространственными производными от параметров порядка, симметричных и антисимметричных тензоров. В данном случае этот шаг можно пропустить, так как предполагается неоднородность только вдоль оси OZ .

Инвариантами группы $C_\infty \otimes R$, составленными из тензоров второго ранга и векторов, являются комбинации вида [7]

$$F_{iz}^2; Q_{iz}^2; Q_{lz}; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z} \right)^2; \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z} \right)^2; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z} \right)^2; \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z} \right)^2; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{l\alpha}}{\partial z} \right); \left(Q_{l\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z} \right);$$

$$\left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{k\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{l\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z}\right); \quad (4)$$

$$\left(F_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z}\right) \cdot \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z}\right) \cdot \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z}\right); \dots$$

где $i, j = 1, 2; k, l = 3-6; s, r = 1-6$. Индекс α пробегает только значения x, y (по повторяющемуся индексу α проводится суммирование). Используя теорему о нахождении инвариантов группы циклической перестановки [7] и проводя вычисления в соответствии с соотношением (2) справа налево, в итоге получаем для группы $D_{2h} \otimes C_\infty \otimes R$ следующий ЦРБИ:

$$F_{iz}^2; Q_{rz}^2; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{j\alpha}}{\partial z}\right)^2;$$

$$\left(Q_{i\alpha} \frac{\partial F_{j\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{3\alpha}}{\partial z}\right); \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{4\alpha}}{\partial z}\right); \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{5\alpha}}{\partial z}\right)^2;$$

$$\left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{6\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(Q_{3\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{4\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{5\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right)^2;$$

$$\left(Q_{6\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right)^2; \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{5\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{i\alpha} \frac{\partial Q_{6\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{5\alpha} \frac{\partial Q_{i\alpha}}{\partial z}\right);$$

$$\left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{5\alpha}}{\partial z}\right) \cdot \left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{6\alpha}}{\partial z}\right); \left(Q_{5\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right) \cdot \left(Q_{6\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right);$$

$$\left(F_{i\alpha} \frac{\partial Q_{5\alpha}}{\partial z}\right) \cdot \left(Q_{5\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}}{\partial z}\right); \dots \quad (5)$$

С помощью этого ЦРБИ неравновесный термодинамический потенциал записывается в виде

$$\begin{aligned} \Phi = \int d^3\mathbf{r} \{ & (\alpha_1 - \alpha) \mathbf{F}_1^2 + (\alpha_2 - \alpha) \mathbf{F}_2^2 + (\alpha_3 - \alpha) \mathbf{Q}_1^2 + (\alpha_4 - \alpha) \mathbf{Q}_2^2 + (\alpha_5 - \alpha) \mathbf{Q}_3^2 + (\alpha_6 - \alpha) \mathbf{Q}_4^2 + (\alpha_7 - \alpha) \mathbf{Q}_5^2 + \\ & + (\alpha_8 - \alpha) \mathbf{Q}_6^2 + \beta_1 \mathbf{F}_1^4 + \beta_2 \mathbf{F}_2^4 + \beta_3 \mathbf{Q}_1^4 + \beta_4 \mathbf{Q}_2^4 + \beta_5 \mathbf{Q}_3^4 + \beta_6 \mathbf{Q}_4^4 + \beta_7 \mathbf{Q}_5^4 + \beta_8 \mathbf{Q}_6^4 + \\ & + \gamma_1 \left(\mathbf{F}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial z} - \mathbf{Q}_3 \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial z} \right) + \gamma_2 \left(\mathbf{F}_2 \frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial z} - \mathbf{Q}_3 \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial z} \right) + \gamma_3 \left(\mathbf{F}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_4}{\partial z} - \mathbf{Q}_4 \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial z} \right) + \gamma_4 \left(\mathbf{F}_2 \frac{\partial \mathbf{Q}_4}{\partial z} - \mathbf{Q}_4 \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial z} \right) + \\ & + \gamma_5 \left(\mathbf{Q}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_5}{\partial z} - \mathbf{Q}_5 \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial z} \right) + \gamma_6 \left(\mathbf{Q}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_6}{\partial z} - \mathbf{Q}_6 \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial z} \right) + \gamma_7 \left(\mathbf{Q}_2 \frac{\partial \mathbf{Q}_5}{\partial z} - \mathbf{Q}_5 \frac{\partial \mathbf{Q}_2}{\partial z} \right) + \gamma_8 \left(\mathbf{Q}_2 \frac{\partial \mathbf{Q}_6}{\partial z} - \mathbf{Q}_6 \frac{\partial \mathbf{Q}_2}{\partial z} \right) + \delta_1 \left(\frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial z} \right)^2 + \\ & + \delta_2 \left(\frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial z} \right)^2 + \delta_3 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial z} \right)^2 + \delta_4 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_2}{\partial z} \right)^2 + \delta_5 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_3}{\partial z} \right)^2 + \delta_6 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_4}{\partial z} \right)^2 + \delta_7 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_5}{\partial z} \right)^2 + \delta_8 \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_6}{\partial z} \right)^2 + \\ & + \lambda_1 \left(\mathbf{Q}_1 \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial z} \right) \cdot \left(\mathbf{Q}_1 \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial z} \right) + \rho_1 (\mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_5)^2 + \lambda_2 \left(\mathbf{F}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_1}{\partial z} \right) \cdot \left(\mathbf{F}_1 \frac{\partial \mathbf{Q}_2}{\partial z} \right) + \rho_2 (\mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_6)^2 + \rho_3 (\mathbf{Q}_1 \mathbf{F}_1)^2 + \rho_4 (\mathbf{Q}_1 \mathbf{F}_2)^2 + \dots \}, \quad (6) \end{aligned}$$

где α — коэффициент молекулярного поля, $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, \delta_i, \lambda_i, \rho_i$ — феноменологические коэффициенты.

Разложим все НПВ на три составляющие, из которых первая описывает статическую намагниченность, вторая — колебательную (вращающуюся) медленно меняющуюся в пространстве часть, третья — быстро меняющуюся флуктуационную, следующим образом:

$$M_x(\mathbf{r}) = M_0 + M_k \cos(kz) + \sum_{\bar{k}'} m_{k'x} \cos(\mathbf{k}'\mathbf{r}),$$

$$M_y(\mathbf{r}) = M_0 + M_k \sin(kz) + \sum_{\bar{k}'} m_{k'y} \sin(\mathbf{k}'\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ — это $\mathbf{F}_1(\mathbf{r}), \mathbf{F}_2(\mathbf{r}), \mathbf{Q}_i(\mathbf{r}) (i = 1, \dots, 6)$. Поскольку, согласно данным [3], в кристалле имеет место спиральная структура, положим статическую намагниченность равной нулю.

Интегрирование в (6) проведено в соответствии с методикой [5]. В результате остаются только слагаемые, содержащие четные степени $m_{k'x}$ и $m_{k'y}$. При этом происходит перенормировка коэффициентов, и флуктуации спиновой плотности становятся дополнительным источником температурной зависимости новых коэффициентов разложения термодинамического потенциала. Поэтому в теории Шимицу [5] пренебрегают собственной температурной зависимостью коэффициентов, полагая их величину фиксированной. В частности, имеет место замена

$$a_1 - \alpha \rightarrow a_1 - \alpha + a_3 \sum f_{k'i}^2 \quad (8)$$

и т.д. Как показано в работе [8], сумма в этом выражении пропорциональна температуре образца. Если рассматривать только колебательную и флуктуационную

части НПВ, то в результате интегрирования получим выражение вида

$$\Phi = \frac{V}{2}(\varphi + \sigma(m)), \quad (9)$$

где $\sigma(m)$ — зависящая от флуктуационных частей НПВ функция, явный вид которой ввиду громоздкости здесь не приводится, включает в себя все флуктуационные части НПВ. При этом коэффициент a_3 также перенормируется, φ совпадает с подынтегральным выражением в (6) с заменами типа (8). При всех НПВ необходимо поставить индексы (k). Следует учесть, что коэффициенты a_3 перенормируются.

Из полученного громоздкого выражения следует, что в приближении обменного взаимодействия в соединении MnCoSi могут возникать длиннопериодические структуры, образованные несколькими параметрами порядка. Эти сверхструктуры возникают благодаря учету в термодинамическом потенциале слагаемых, пропорциональных первой и второй степеням от пространственных производных НПВ, т.е. вследствие конкуренции различных взаимодействий обменной природы. Если $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = 0$, то сверхструктуру могут реализовать следующие пары НПВ (здесь и в дальнейшем индекс (k) опускаем):

$$(F_1; Q_3), (F_1; Q_4), (F_2; Q_3), (F_2; Q_4), \\ (Q_1; Q_5), (Q_1; Q_6), (Q_2; Q_5), (Q_2; Q_6). \quad (10)$$

Первая и пятая пары описывают сверхструктуры, образованные только ионами Mn, четвертая и восьмая — только ионами Co, остальные описывают сверхструктуры, образованные всеми ионами (смешанные).

Для решения поставленной задачи необходимо на основе термодинамического потенциала составить систему уравнений Эйлера. При учете всех НПВ аналитически решить эту систему не представляется возможным. Поэтому для упрощения задачи будем искать решение соответствующей системы уравнений Эйлера в приближении постоянства модулей неприводимых векторов, т.е.

$$Q_{1x} = Q_1 \cos qz; \quad Q_{2x} = Q_2 \cos(qz - \varphi_2); \\ Q_{1y} = Q_1 \sin qz; \quad Q_{2y} = Q_2 \sin(qz - \varphi_2); \\ Q_{5x} = Q_5 \cos(qz - \varphi_5); \quad Q_{6x} = Q_6 \cos(qz - \varphi_6); \\ Q_{5y} = Q_5 \sin(qz - \varphi_5); \quad Q_{6y} = Q_6 \sin(qz - \varphi_6). \quad (11)$$

Значения углов $\varphi_2, \varphi_5, \varphi_6$ определяются из системы уравнений

$$\begin{cases} \gamma_5 Q_1 \cos \varphi_5 + \gamma_7 Q_2 \cos(\varphi_5 - \varphi_2) - \rho_1 Q_1^2 Q_5 \sin(2\varphi_5) = 0, \\ \gamma_6 Q_1 \cos \varphi_6 + \gamma_8 Q_2 \cos(\varphi_6 - \varphi_2) - \rho_2 Q_2^2 Q_6 \sin 2(\varphi_6 - \varphi_2) = 0, \\ \gamma_7 Q_5 \cos(\varphi_5 - \varphi_2) + \gamma_8 Q_6 \cos(\varphi_6 - \varphi_2) + \rho_2 Q_6^2 Q_2 \sin 2(\varphi_6 - \varphi_2) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Рассмотрим несколько случаев.

1. Сверхструктуру образуют только ионы Mn. Тогда $\gamma_6 = \gamma_7 = \gamma_8 = 0$, и угол φ_5 определяется из уравнения

$$\cos \varphi_5 (\gamma_5 - 2\rho_1 Q_1 Q_5 \sin \varphi_5) = 0. \quad (13)$$

Это уравнение имеет решение $\varphi_5 = \pm \pi/2$, аналогичное полученному в [6]. Если выполняется соотношение $|\gamma_5| < 2\rho_1 Q_1 Q_5$, то для угла φ_5 имеется второе решение:

$$\sin \varphi_5 = \frac{\gamma_5}{2\rho_1 Q_1 Q_5}, \quad (14)$$

зависящее от величины модулей НПВ. Возможно, именно этим механизмом обусловлено изменение углов при изменении температуры [3].

Аналогичный результат может быть получен и при рассмотрении упорядочения только ионов Co.

2. Сверхструктуру образуют ионы Mn и Co.

В этом случае $\gamma_5 = \gamma_7 = \gamma_8 = 0; \rho_1 = \rho_2 = 0$. Поскольку $\rho_3 \neq 0$, то соответствующий инвариант приводит к тому, что к образующим спиральную структуру НПВ Q_1 и Q_5 могут добавиться ферромагнитные вектора \bar{F}_1 и \bar{F}_2 . Углы φ_3 и φ_4 , которые характеризуют рассогласование фаз между этими векторами и \bar{Q}_1 , определяются из системы уравнений

$$\begin{cases} \cos \varphi_3 (\lambda_1 F_2 \sin \varphi_4 - 2\rho_3 F_1 \sin \varphi_3) = 0, \\ \cos \varphi_4 (\lambda_1 F_1 \sin \varphi_3 - 2\rho_3 F_2 \sin \varphi_4) = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Эта система имеет следующие решения:

$$\begin{aligned} 1) \varphi_3 = \pm \frac{\pi}{2}; \quad \varphi_4 = \pm \frac{\pi}{2}; \quad 2) \varphi_3 = \pm \frac{\pi}{2}; \quad \varphi_4 \neq \pm \frac{\pi}{2}; \\ 3) \varphi_3 \neq \pm \frac{\pi}{2}; \quad \varphi_4 = \pm \frac{\pi}{2}; \quad 4) \varphi_3 \neq \pm \frac{\pi}{2}; \quad \varphi_4 \neq \pm \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (16)$$

Последнее решение возможно только в случае $\lambda_1^2 = 4\rho_3^2$.

Как следует из данных нейтронографии [3], при повышении температуры появляется постоянная состав-

ляющая ферромагнитного вектора по оси b (ось Ox). Для более детального описания такого эффекта в термодинамический потенциал необходимо включить релятивистский инвариант типа αF_x^2 .

Вычислительный эксперимент

Проведенное выше рассмотрение основывалось на приближении постоянства модулей НПВ, что справедливо достаточно далеко от линии ФП. При приближении к этой линии необходимо отказаться от такого приближения. При этом необходимо точно решать систему дифференциальных уравнений Эйлера, возникающую при нахождении экстремума функционала, в которую входят как пространственные производные от углов, так и от модулей НПВ. Решить такую задачу можно численными методами. Соответствующая система уравнений ввиду громоздкости не приведена. Основные полученные результаты заключаются в следующем.

1. Вдали от линий ФП и при малых значениях коэффициентов γ_i термодинамического потенциала при инварианте Лифшица модули НПВ практически постоянны (рис. 2), а периоды пространственных колебаний векторов $Q_i (i = 1, 2, 5, 6)$ различны. Это означает, что в кристалле имеются четыре различные взаимодействующие сверхструктуры. При приближении к линиям ФП из-за координатной зависимости модулей каждого из неприводимых векторов появляется пространственная амплитудная модуляция (АМ) — компонента, «несущая

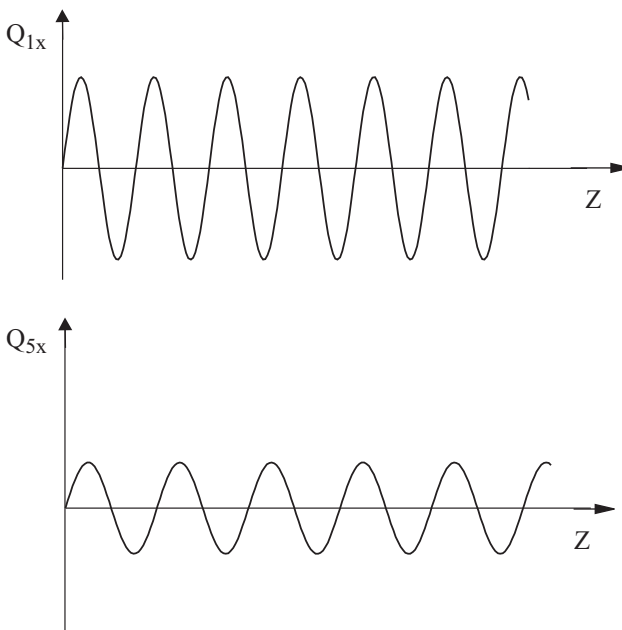


Рис. 2. Координатная зависимость компонент НПВ вдали от линий фазовых переходов (все величины в относительных единицах).

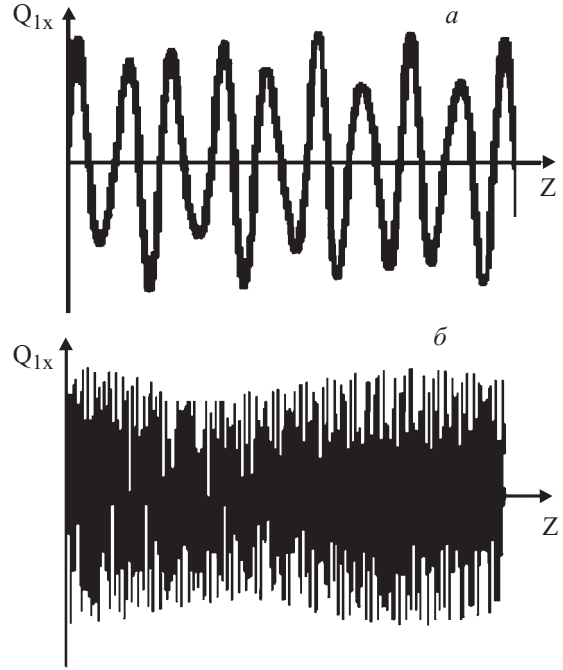


Рис. 3. Координатная зависимость компонент антиферромагнитных векторов на малых расстояниях (а), на больших расстояниях (б).

щая колебания». Так как γ_i отражает неоднородности обменного взаимодействия, то с увеличением $|\gamma_i|$ появляется дополнительная модуляция компонент НПВ, имеющая сложный характер. Несущее колебание теряет периодичность на малых расстояниях (рис. 3,а), и разные группы колебаний участвуют в двух разных АМ с фазовым сдвигом π . Одновременно появляется незаметная на малых расстояниях АМ с гигантской величиной периода (гиперпериод) (рис. 3,б). Если γ_i сравнима с коэффициентами при инвариантах, содержащих квадраты пространственных производных, то при малых z по-прежнему имеет место АМ, амплитуда которой растет с увеличением z и при некоторых значениях наступает перемодуляция. При больших z вторичная модуляция доминирует, и на ее фоне наблюдаются несущие колебания с малой амплитудой (рис. 4). При этом происходит распад обычной АМ на две составляющие, которые по синусоидальному закону «скользят»

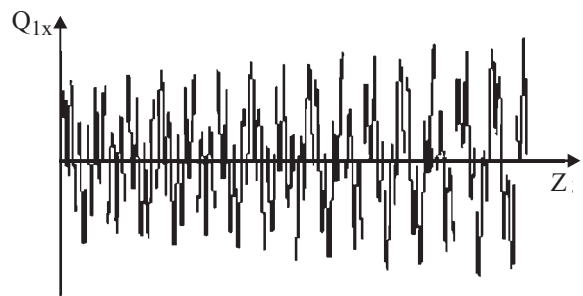


Рис. 4. Координатная зависимость Q_{1x} при больших значениях γ .

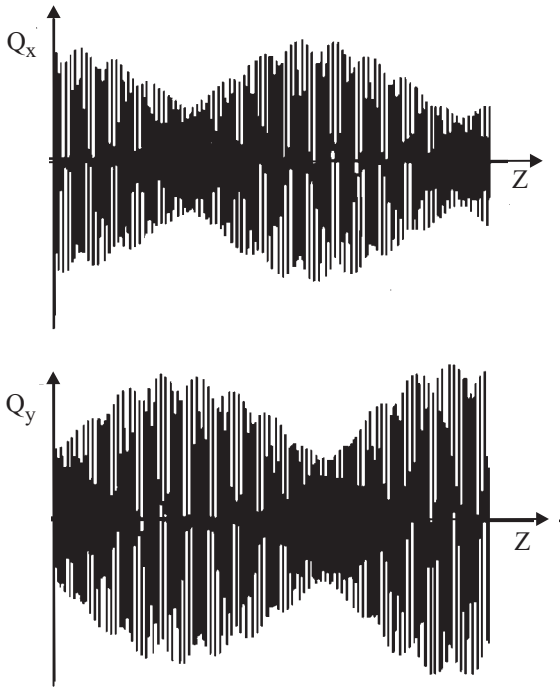


Рис. 5. Координатная зависимость НПВ при больших по модулю отрицательных значениях γ вблизи T_c .

по кривой перемодуляции с большим пространственным периодом (гиперпериод). Аналогичное поведение имеют и y -компоненты НПВ, но все процессы при этом пространственно сдвинуты по отношению к x -компо-

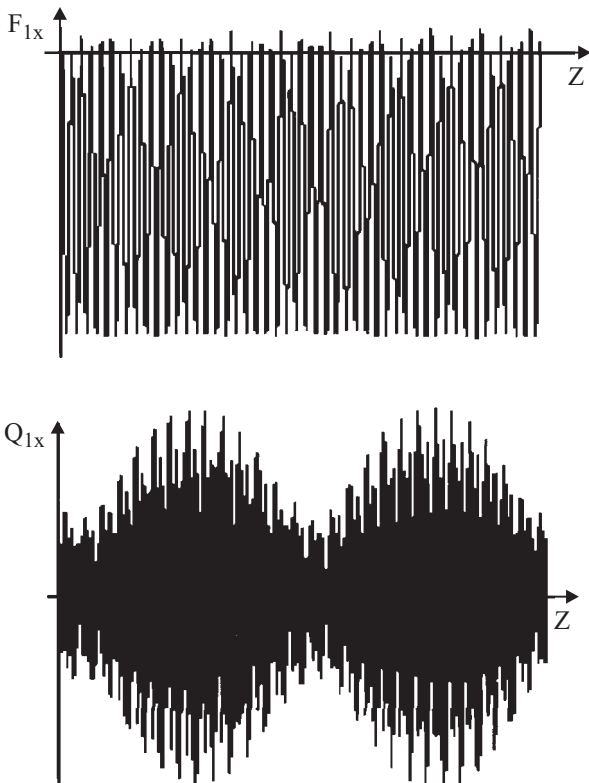


Рис. 6. Поведение FM и AFM векторов вблизи T_c .

нентам. При $T \rightarrow T_c$ перемодуляция становится периодической, но не синусоидальной. С ростом $|\gamma_i|$ число периодов колебаний перемодуляции возрастает.

2. В непосредственной близости к T_c и при больших отрицательных значениях γ_i на фоне гигантской модуляции появляется дополнительная АМ с относительно малой амплитудой и на порядок меньшим периодом (рис. 5). Последняя АМ исчезает по мере приближения к T_c , а частота гигантской модуляции сильно увеличивается. Здесь, как и ранее, при гипермодуляции имеет место обычная перемодуляция, которая также распадается на две составляющие.

3. Поведение ферромагнитного вектора при приближении температуры к T_c снизу носит аналогичный характер. Однако F_x -компонента будет иметь возрастающую по мере увеличения температуры постоянную составляющую вдоль оси OX (рис. 6). Это означает, что годограф вектора \mathbf{F} будет представлять собой замкнутую кривую, деформированную в сторону оси OX . Колебательные центры остальных компонент неприводимых векторов не смещаются, но амплитуда гипермодуляции растет при приближении к T_c . В окрестности T_c колебательный процесс компоненты F_x полностью перемещается в одну полуплоскость, а гипермодуляция остальных компонент становится 100%. При $T > T_c$ остается только постоянная составляющая, колебательные процессы прекращаются, сверхструктура распадается и происходит переход в FM фазу.

Из приведенного рассмотрения следует, что механизм образования спиральной структуры в металлическом магнетике MnCoSi такой же, как и во многих непроводящих магнетиках (см., например, [9]), т.е. обусловлен конкуренцией различных взаимодействий обменной природы.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГФФИ Украины, проект №14.1/024

1. V. Johnson and C.G. Frederick, *Phys. Status Solidi* **20**, 331 (1973).
2. H. Binczycka, A. Szutula, J. Todorovic, T. Zaleski, and A. Zieba, *Phys. Status Solidi* **35**, K69 (1976).
3. S. Niziol, H. Binczycka, A. Szutula, J. Todorovic, R. Fruchart, J.P. Senateur, and D. Fruchart, *Phys. Status Solidi* **45**, 591 (1978).
4. Л.И. Медведева, С.И. Харцев, *ФТВД* **10**, 18 (1982)
- 5 M. Shimizu, *J. Magn. Magn. Mater.* **45**, 144 (1984)
6. Ю.М. Гуфан, *Структурные фазовые переходы*, Наука, Москва (1982).
7. Э. Спенсер, *Теория инвариантов*, Мир, Москва (1974).
8. В.И. Вальков, Е.П. Стефановский, *ФТТ* **34**, 49 (1992).
9. В.Г. Барьяхтар, Е.П. Стефановский, Д.А. Яблонский, *Письма в ЖЭТФ* **42**, 258 (1985).

The theory of magnetic structure
in the compound MnCoSi

Ju.D. Zavorotnev and L.I. Medvedeva

Some possible mechanisms of formation of long-period structures in the compound MnCoSi are considered. It proves that the main role in theoretical description plays the invariants, which contain the first spatial derivative of various powers of irreducible magnetic vectors. It is shown, that at formation of the spiral structure by antiferromagnetic vec-

tors only the ferromagnetic vector may also be spontaneously involved. In this case rotating vectors the orthogonality is broken. The consideration was carried out in the approaches taking and not taking account of the constancy of modules of irreducible vectors. This allowed to examine the evolution of magnetic superstructure at varying temperature.

PACS: 75.40 Mg. Numerical modelling;
75.10.Lp Band and the localized models.

Keywords: phase transition, irreducible vector, long-periodic structure.