

Творчество — переход небытия в бытие через акт свободы.

Николай Бердяев



Франсиско Гойя «Игра в жмурки» (1791)

Секция 7. Магнитные фазовые переходы и критические явления

УДК 538.955

Магнитные фазовые диаграммы антиферромагнитного металла DyB₁₂ со структурной и электронной неустойчивостью**Азаревич А.Н.**к.ф.-м.н., старший научный сотрудник отдела низких температур и криогенной техники
ИОФРАН**Богач А.В.**

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник отдела колебаний ИОФРАН

Красиков К.М.

к.ф.-м.н., младший научный сотрудник отдела колебаний ИОФРАН

Шицевалова Н.Ю.к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории тугоплавких соединений РЗЭ ИПМ
НАНУ**Воронов В.В.**к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник научного центра лазерных материалов и технологий
ИОФРАН**Случанко Н.Е.**к.ф.-м.н., доцент, ведущий научный сотрудник отдела низких температур и криогенной
техники ИОФРАН

***Аннотация.** В работе впервые исследованы H - T и H - ϕ магнитные фазовые диаграммы антиферромагнитного металла DyB₁₂ (температура Нееля $T_N \approx 16$ K) с динамическими зарядовыми страйпами. Показано, что в этом редкоземельном додекабориде с янтеллеровской структурной неустойчивостью борного каркаса формирование динамических полос заряда вдоль одного из направлений $\langle 110 \rangle$ подавляет косвенное обменное взаимодействие между локализованными магнитными моментами ионов Dy³⁺ через электроны проводимости (РККИ механизм), приводя к возникновению низкосимметричных магнитных H - ϕ диаграмм в виде «бабочки». Исследованы механизмы рассеяния носителей заряда в различных магнитоупорядоченных фазах.*

***Ключевые слова:** антиферромагнетизм, структурная неустойчивость, электронное фазовое расслоение наномасштаба, зарядовые страйпы*

**Magnetic phase diagrams of antiferromagnetic metal DyB₁₂
with structural and electronic instability****Azarevich A.N.**Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Department of Low
Temperatures and Cryogenic Engineering, IOFRAN**Bogach A.V.**Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Department of Oscillations,
IOFRAN**Krasikov K.M.**Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher, Department of Oscillations,
IOFRAN**Shitsevalova N. Yu.**Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior researcher, Laboratory of Refractory RE
Compounds IPM NASU

Voronov V.V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, Center of Laser Materials and Technology, IOFRAN

Sluchanko N.E.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Leading Researcher, Department of Low Temperatures and Cryogenic Engineering, IOFRAN

Annotation. In this work, the H - T and H - ϕ magnetic phase diagrams of the antiferromagnetic metal DyB_{12} (Néel temperature $T_N \approx 16$ K) with dynamic charge stripes were studied for the first time. It is shown that in this rare-earth dodecaboride with the Jahn-Teller structural instability of the boron framework, the emergence of dynamic charge stripes along one of the $\langle 110 \rangle$ directions suppresses the indirect exchange interaction of localized magnetic moments of Dy^{3+} ions through conduction electrons (RKKY mechanism), leading to the appearance of low-symmetry «butterfly-type» magnetic H - ϕ phase diagrams. The mechanisms of charge carrier scattering in various magnetically ordered phases have been studied.

Keywords: antiferromagnetism, structural instability, nanoscale electronic phase separation, charge stripes

Аномальные свойства редкоземельных додекаборидов RB_{12} обусловлены развитием кооперативной динамической ян-теллеровской (ЯТ) неустойчивости подрешетки бора, что приводит к небольшим *статическим* структурным искажениям борного ковалентного каркаса и появлению полос динамического заряда (страйпов) зонных электронов [1]. Зарядовые флуктуации в страйпах вдоль одного из направлений $\langle 110 \rangle$ в RB_{12} подавляют РККИ обмен между магнитными R-ионами, приводя к спин-поляронным эффектам и формированию волн спиновой плотности ($5d$ - компонента магнитной структуры), причем конкуренция магнитных взаимодействий обуславливает появление различных анизотропных антиферромагнитных (AF) фазовых диаграмм в форме «мальтийского креста» [2] и «бабочки» [3].

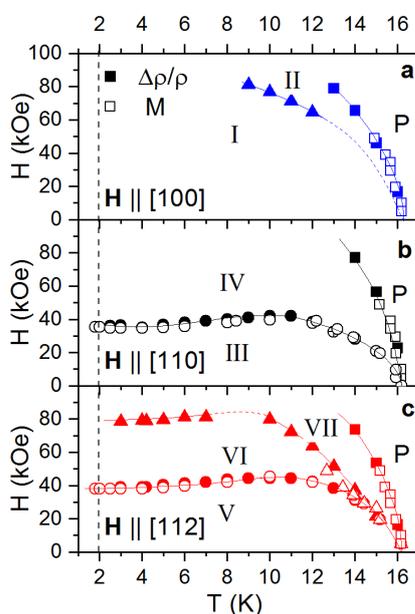


Рис.1. Магнитные фазовые H - T диаграммы DyB_{12} для направлений внешнего магнитного поля (a) $H // [100]$, (b) $H // [110]$ и (c) $H // [112]$. Римскими цифрами показана нумерация различных магнитоупорядоченных фаз. Закрашенные и открытые символы отвечают измерениям магнетосопротивления $\Delta\rho/\rho$ и намагниченности M , соответственно. Вертикальным пунктиром показана температура $T=2$ K, фиксированная при измерениях угловых H - ϕ диаграмм, представленных на рис.2.

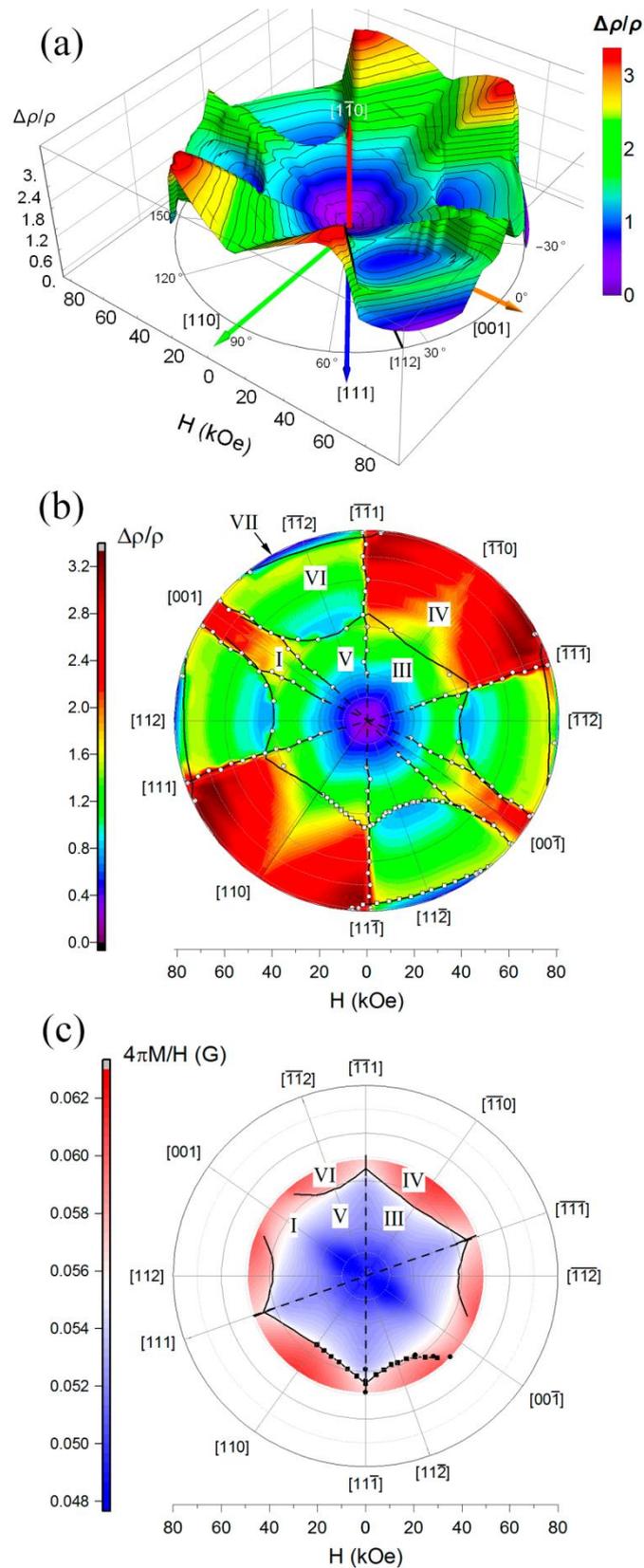


Рис. 2. (a) Магнетосопротивление DyB₁₂ в цилиндрических (H , ϕ , $\Delta\rho/\rho$) координатах полученное в эксперименте с вращением вокруг оси измерительного тока $I/\parallel[110]$ при температуре $T=2K$. Цветом и высотой показана величина $\Delta\rho/\rho$. (b) Магнетосопротивление DyB₁₂ в полярных (H , ϕ) координатах (проекция на плоскость (110)) при $T=2K$. (c) Магнитная восприимчивость M/H в полярных координатах в диапазоне магнитных поле $H \leq 50$ кЭ для $T=2K$. На панелях (b) и (c) цветом показана величина параметров $\Delta\rho/\rho$ и M/H . Границы фаз в плоскости $\mathbf{H} \parallel (110)$ представлены точками и линиями, римскими цифрами обозначены различные магнитоупорядоченные фазы в AF-состоянии.

В работе впервые выполнены прецизионные низкотемпературные измерения магнетосопротивления ($\Delta\rho/\rho$) и намагниченности (M) додекаборида диспрозия в магнитном поле $H \leq 80$ кЭ и, в результате, впервые построены магнитные фазовые H - T (рис.1а-1с) и H - φ (рис.2а-б и рис.2с построены по данным $\Delta\rho/\rho$ и M/H , соответственно) диаграммы DyB_{12} . Показано, что в этом АФ металле (температура Нееля $T_N \sim 16$ К) с крамерсовскими ионами Dy^{3+} реализуется магнитная анизотропия типа «бабочки» (см. рис.2б-2с), подобная обнаруженной в [3] для ErB_{12} , однако в DyB_{12} в используемом в работе интервале магнитных полей для направления $\mathbf{H} // [100]$ не наблюдается фазового перехода в состояние с ферромагнитной компонентой магнитной структуры. Обсуждаются механизмы рассеяния носителей заряда в АФ-фазах I-VI в DyB_{12} (см. рис. 1-2) в сравнении с другими антиферромагнетиками семейства RB_{12} (R- Ho, Er, Tm) [1-5].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-00243).

Список использованной литературы:

1. Sluchanko N. E. Magnetism, quantum criticality, and metal-insulator transitions in RB_{12} . in Rare-Earth Borides / edited by D. S. Inosov – Singapore: Jenny Stanford Publishing, 2021. – pp.331-441
2. Krasikov K., Glushkov V., Demishev S., Khoroshilov A., Bogach A., Voronov V., Shitsevalova N., Filipov V., Gabáni S., Flachbart K., Siemensmeyer K., Sluchanko N. Suppression of indirect exchange and symmetry breaking in the antiferromagnetic metal HoB_{12} with dynamic charge stripes // Phys. Rev. B – 2020. – 102 – 214435.
3. Красиков К.М., Богач А.В., Шицевалова Н.Ю., Филиппов В.Б., Случанко Н.Е. 3D (H - φ - θ) магнитная фазовая диаграмма антиферромагнетика ErB_{12} с динамическими зарядовыми страйпами // Письма в ЖЭТФ – 2023. – 117 – С. 530 – 536.
4. Azarevich A., Glushkov V., Demishev S., Bogach A., Voronov V., Gavrilkin S., Shitsevalova N., Filipov V., Gabáni S., Kačmarčík J., Flachbart K., Sluchanko N. Evidence of symmetry lowering in antiferromagnetic metal TmB_{12} with dynamic charge stripes // Journal of Physics: Condensed Matter – 2022. – 34 – 065602.
5. Azarevich A., Bogach A., Bolotina N., Khrykina O., Shitsevalova N., Polovets S., Filipov V., Gabáni S., Kačmarčík J., Flachbart K., Voronov V., Sluchanko N. Maltese Cross-type magnetic phase diagrams in $\text{Tm}_{1-x}\text{Yb}_x\text{B}_{12}$ antiferromagnets with Yb-valence instability and dynamic charge stripes // J. Magnetism and Magnetic Materials – 2023. – 574 – 170671.

УДК 538.9

Расчет относительных дисперсий намагниченности, теплоемкости и восприимчивости в слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса

Атаева Г.Я.

к.ф.-м.н. Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Бабаев А.Б.

к.ф.-м.н. Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Муртазаев А.К.

член.корр. РАН, профессор, Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

***Аннотация.** Методом Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , теплоемкости R_c и восприимчивости R_χ в спиновой решеточной четырехкомпонентной слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p=0.80$. Показано, что внесение беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерную модель Поттса приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_c , и R_χ в критической точке. Установлено, что значения дисперсий заметно уменьшаются для систем с линейными размерами $L \geq 120$ в единицах межатомной длины.*

***Ключевые слова:** дисперсия, примесь, фазовый переход, модель Поттса, метод Монте-Карло.*

Calculation of relative dispersions of magnetization, heat capacity and susceptibility in weakly diluted four-component Potts model

Ataeva G.Ya.

Ph.D. H. Amirkhanov Institute of Physics of the DFRC, RAS

Babaev A.B.

Ph.D. H. Amirkhanov Institute of Physics of the DFRC, RAS

Murtazaev A.K.

Corresponding member RAS, professor, H. Amirkhanov Institute of Physics of the DFRC, RAS

***Annotation.** Using the Monte Carlo method, the relative dispersions of magnetization R_m , heat capacity R_c and susceptibility R_χ are calculated in a spin lattice four-component weakly diluted Potts model on a square lattice at a spin concentration $p=0.80$. It is shown that the introduction of disorder in the form of non-magnetic impurities into the two-dimensional Potts model is shown to lead to non-zero values for R_m , R_c , and R_χ at the critical point. It has been established that the dispersion values decrease noticeably for systems with linear dimensions $L \geq 120$ in units of interatomic length.*

***Key words:** dispersion, impurity, phase transition, Potts model, Monte Carlo method.*

Изучение влияния немагнитных примесей на различные магнитные и тепловые свойства спиновых систем занимает значительное место в физике конденсированных сред. Связано это тем, что немагнитная примесь оказывает влияние на термодинамические параметры исследуемой системы вплоть до смены рода фазового перехода в них [1-6]. Есть

все основания предполагать наличие зависимости критических параметров от способа реализации беспорядка в исследуемой модели. Также повышенный интерес вызывает вопрос об особенностях влияния беспорядка на род фазового перехода (ФП) в спиновых решеточных моделях [1-6]. Поведение термодинамических критических параметров неупорядоченных моделей при различных реализациях беспорядка в виде немагнитных примесей в широком интервале изменения концентрации примесей $c_{imp}=1-p$, где p – концентрация спинов, с соблюдением единой методики до настоящего времени исследовано недостаточно полно.

В связи с этим в данной работе методом Монте-Карло исследуется проблема самоусреднения термодинамических критических параметров в неупорядоченной четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке

Приведем здесь формулировку слабо разбавленной четырехкомпонентной стандартной модели Поттса, используемую для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. В рассматриваемой нами модели примеси распределены каноническим способом [2]. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах квадратной решётки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 4-х симметричных направлениях в пространстве с размерностью $q-1$ так, что углы между любыми двумя направлениями спинов равны. Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (*quenched disorder*).

2. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или же, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [7]

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4 \quad (1)$$

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальнейшем считаем $J = 1$ и работаем с безразмерной температурой), P_i – обозначение состояния спина с номером i ,

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases},$$

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

Концентрация магнитных спинов определяется выражением:

$$p = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \rho_i \delta(S_i, q) \quad (2)$$

Тогда значение $p=1$ соответствует не разбавленной решетке, $p=0$ – полностью разбавленной.

Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p=1.0, 0.8$. Исследованы системы с линейными размерами $L=10-160$, и числом спинов $N=p \times L \times L$. Начальные конфигурации задавали таким образом, чтобы все атомы находились в одном состоянии. Для вывода системы с линейными размерами $L \times L$ в равновесное состояние вычисляли время релаксации τ_0 . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной $\tau=400\tau_0$. Для

самой большой системы $L=160$, $\tau_0=2 \times 10^3$ МК шагов/спин. Кроме того, проводили усреднение по различным примесным конфигурациям. В случае $p=1.0$ для усреднения использовали 10 различных начальных конфигураций. Для систем с концентрацией $p=0.80$ осуществляли конфигурационное усреднение по 1000 примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка.

Расчет относительных дисперсий (квадратов коэффициентов вариации) намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в зависимости от линейных размеров L исследуемой системы проводился по следующим выражениям

$$R_m = \frac{\overline{m^2(L)} - \overline{m(L)}^2}{\overline{m(L)}^2}, \quad (3)$$

$$R_\chi = \frac{\overline{\chi^2(L)} - \overline{\chi(L)}^2}{\overline{\chi(L)}^2}, \quad (4)$$

$$R_c = \frac{\overline{c^2(L)} - \overline{c(L)}^2}{\overline{c(L)}^2}, \quad (5)$$

Данные, рассчитанные по выражениям (3)-(5), позволяют судить о самоусреднении термодинамических величин и погрешностях, связанных с размерами изучаемых систем.

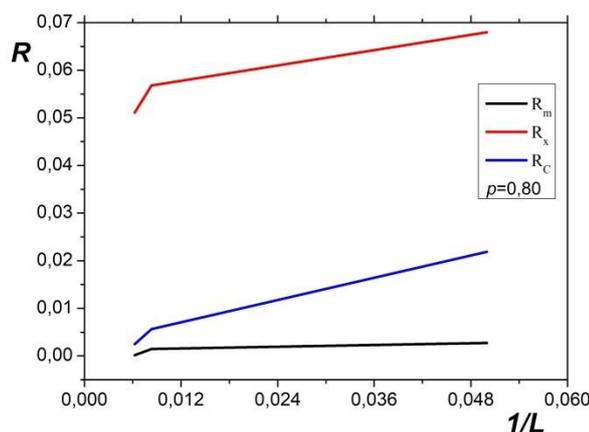


Рис. 1. Зависимость относительных дисперсий намагниченности R_m , теплоемкости R_c и восприимчивости R_χ от обратных размеров $1/L$ при концентрации $p=0.80$, при $T=T_c$.

Анализ данных R_m , R_χ , R_c , полученных в этой работе при $p=0.80$ в зависимости от рассмотренных линейных размеров, позволяет заключить, что на их точность определения сильное влияние оказывает размеры изучаемых систем. На рисунке 1 приведены дисперсии R_m , R_c , R_χ в зависимости от $1/L$. Как видно из рисунка с увеличением линейных размеров, значения R_m , R_c , R_χ заметно уменьшаются.

Для исследуемой неупорядоченной четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке заметное уменьшение значений R_m , R_χ , R_c наблюдается для систем с линейными размерами $L \geq 120$. Таким образом, из полученных данных R_m , R_χ , R_c следует, что для однозначного определения магнитных и тепловых характеристик и их особенностей в разбавленных моделях Поттса, необходимо изначально выявить размерные особенности дисперсии для всех интересующихся физических параметров. В частности, для рассмотренной модели Поттса с $q=4$ заметное уменьшение R_m , R_χ , R_c наблюдается при $L \geq 120$ в слабо разбавленном режиме при $p=0.80$.

В данной работе с соблюдением единой методики впервые на основе кластерного

алгоритма метода Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p=0.80$. Полученные данные свидетельствуют о следующем:

1. Внесение слабого беспорядка в виде немагнитных примесей в четырехкомпонентную модель Поттса на квадратной решетке приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_χ , R_c , что указывает на плохое самоусреднение для исследуемых термодинамических параметров.

2. Установлено, что для получения надежных численных характеристик путем компьютерного моделирования четырехкомпонентной модели Поттса в слабо разбавленном режиме необходимо исследовать спиновые системы с линейными размерами $L \geq 120$.

Список литературы:

1. Dotsenko V.S., Critical phenomena and quenched disorder // Usp. Fiz. Nauk. – 1995. – Т. 165. – С. 481.
2. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // УФН. – 2003. – Т.173. – С.175.
3. Дубс В.В., Прудников В.В., Прудников П.В. Ренормгрупповое описание влияния дефектов структуры на фазовый переход в сложных спиновых системах с эффектами случайной анизотропии и дефектами структуры // Теоретическая и математическая физика. – 2017. – Т. 190. – С. 419.
4. Babaev A.B., Murtazaev A.K. // Fiz. Nizk. Temp. – 2020. – V.46. – P.818.
5. Бабаев А.Б., Муртазаев А.К. Фазовые переходы в низкоразмерных неупорядоченных моделях Поттса // ФТТ. – 2020. – Т. 62. – С. 757.
6. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q=5$ // ФТТ. – 2021. – Т.10. – С.1644.
7. Wu F.Y. The Potts model // Rev. Mod. Phys. – 1982. – V.54. – P. 235.

УДК 538.955

Влияние немагнитного беспорядка на фазовые переходы в моделях Поттса на треугольной решетке

Бабаев А.Б.

к.ф.-м.н., в.н.с., Институт физики ДФИЦ РАН

Муртазаев А.К.

директор ДФИЦ РАН, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н.

Бабаев М.А.

студент, физический факультет ДГУ

Малачиева П.А.

студент, физический факультет ДГУ

***Аннотация.** Работа посвящена исследованию немагнитного беспорядка на фазовые переходы в моделях Поттса с числом состояний спина $q=4$ и $q=5$ на треугольной решетке. Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в чистой модели Поттса с $q=4$ на треугольной решетке наблюдается фазовый переход второго рода и фазовый переход первого рода при $q=5$. Показано, что внесение немагнитного беспорядка в рассматриваемые модели приводит к стабилизации фазового перехода второго рода.*

***Ключевые слова:** модель Поттса, немагнитный беспорядок, фазовые переходы*

The effect of non-magnetic disorder on phase transitions in Potts models on a triangular lattice

Babaev A.B.

Leading Researcher, Institute of Physics of the DFRC RAS

Murtazaev A.K.

Director, DFRC RAS, Corresponding Member,

Babaev M.A.

Student, Faculty of Physics, DSU

Malachieva P.A.

Student, Faculty of Physics, DSU

***Annotation.** The work is devoted to the study of non-magnetic disorder on phase transitions in Potts models with the number of spin states $q=4$ and $q=5$ on a triangular lattice. The numerical data obtained indicate that in the pure Potts model with $q=4$, a phase transition of the second-order and a phase transition of the first-order at $q=5$ are observed on a triangular lattice. It is shown that the introduction of non-magnetic disorder into the models under consideration leads to stabilization of the phase transition of the second-order.*

***Keywords:** Potts model, non-magnetic disorder, phase transitions*

Для моделей Поттса с числом состояний спина $q > 2$ на различных двумерных и трехмерных решетках не имеется ни одного точного решения до сегодняшнего дня. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей на различных двумерных решетках имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Это связано с тем, что многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности, интеркаляция атомов щелочных металлов в решетку графита, описываются моделью Поттса с числом состояний спина $q=4$, а адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита достаточно хорошо описывается низкоразмерными моделями Поттса с $q=4$ и $q=5$ на треугольной решетке [1, 2], и их исследование к настоящему времени является своевременным.

Модель Поттса на квадратной решетке эквивалентна модели типа льда на линии фазового перехода (ФП), и для нее в работе [3] вычислена свободная энергия. Кроме того, для модели Поттса на квадратной, треугольной и гексагональной решетках получены полиномиальные выражения исходя из аргумента дуальности позволяющие получить значения критических точек [1, 2]. Отдельно модель Поттса с $q=4$ интересна тем, что значение $q=4$ является граничным, выше которого должен наблюдаться ФП первого рода. В то же время в любой изучаемой системе всегда имеется неконтролируемый немагнитный беспорядок и изучение его влияния на различные термодинамические характеристики является актуальной задачей. В этом плане следует отметить, что на моделях Поттса можно проверить особенности влияния немагнитных примесей на фазовые переходы и определить их роль при реализации конкретного рода ФП.

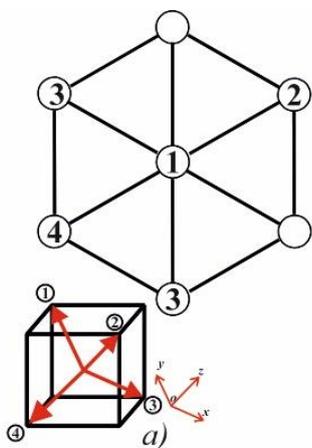


Рис. 1. Примесная модель Поттса с $q=4$ на треугольной решетке

При построении модели Поттса в частности с числом состояний спина $q=4$ необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах треугольной решётки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 4-х симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q-1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис.1); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или в одном из узлов размещен немагнитный примесь и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [4]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = q_1, q_2, q_3, q_4 \quad (1)$$

где $\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases}$, $\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases}$, q_i – число

состояний спина S_i .

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [5]. Методика реализации этого алгоритма приведена в работах [6, 7]. Расчеты

проводились для систем с периодическими граничными условиями для систем с линейными размерами $L=10\div 180$ и числом узлов $L\times L=N$. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одном выбранном состоянии. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 350\tau_0$. Для самой большой системы $L=180$, $\tau_0 = 2 \times 10^4$ МК шагов/спин.

Для наблюдения за температурным ходом поведения энергии E использовалось выражение

$$E = \frac{1}{N} [\langle H \rangle]. \quad (3)$$

Температурные зависимости энергии E на один узел приведены на рисунке 2. Как видно из рисунка 2, температурная зависимость энергии E для чистой модели Поттса с $q=5$ при $L=160$ демонстрирует скачок энергии. В то же время случай $q=4$ является граничным и для конечных L при концентрации спинов $p=1.00$ может наблюдаться фазовый переход второго рода близкий к фазовому переходу первого рода. В случае слабо разбавленных моделей Поттса примеси, наоборот, стабилизируют фазовый переход второго рода. Для полного выяснения особенностей рода фазового перехода в зависимости от немагнитного беспорядка в решеточных моделях Поттса требуется провести анализ данных с применением гистограммного метода в окрестности критической точки. Подробное описание гистограммного метода обработки данных приведено в [7].

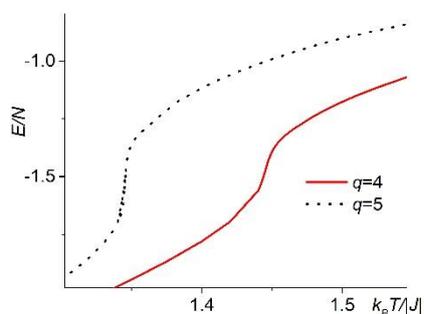


Рис. 2. Температурная зависимость удельной энергии для моделей Поттса.

Анализ рода фазового перехода для моделей Поттса с $q=4$ и $q=5$ на треугольной решетке в чистом ($p=1.0$) и слабо разбавленном ($p=0.90$) режимах нами проводился методом гистограммного анализа данных в критической точке $T=T_c$. Гистограммный анализ данных, проведенный для чистой модели Поттса с $q=4$ (см. рис. 3), выявил в распределении энергии один пик для всех трех различных значений температуры вблизи T_c , что свойственно для фазового перехода второго рода. Аналогичная картина наблюдалась для слабо разбавленной модели Поттса с $q=4$. Гистограммный анализ данных, проведенный для модели Поттса с $q=5$ на треугольной решетке в чистом режиме, выявил в распределении энергии бимодальный характер, что свойственно для ФП первого рода (см. рис.4). Внесение слабо немагнитного беспорядка при $p=0.9$ в эту модель приводит к распределению энергии с одним максимумом (см. рис. 5).

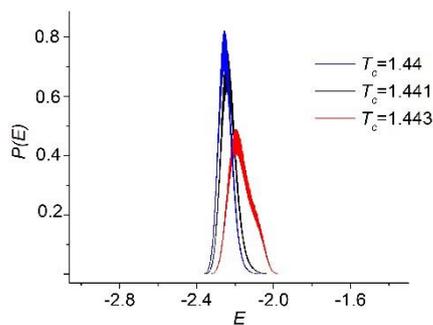


Рис. 3. Гистограмма распределений энергии для чистой модели Поттса с $q=4$.

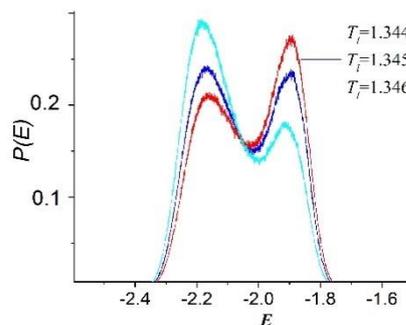


Рис. 4. Гистограмма распределений энергии для чистой модели Поттса с $q=5$.

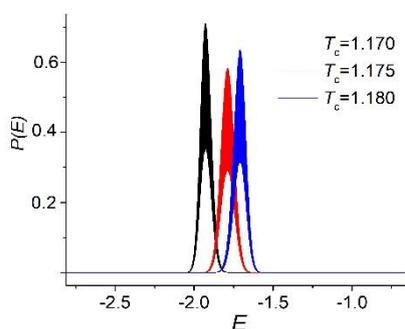


Рис. 5. Гистограмма распределений энергии для слабо разбавленной модели Поттса с $q=5$.

Таким образом, исследование моделей Поттса на треугольной решетке методом Монте-Карло выявил, что в чистой модели Поттса с $q=4$ наблюдается ФП второго рода, в то время как для модели Поттса с $q=5$ – ФП первого рода. Внесение немагнитного беспорядка в рассматриваемые модели Поттса приводит к стабилизации ФП второго рода. Кроме того, выявлено, что в случае однородных систем, для которых в чистом состоянии наблюдается ФП первого рода немагнитный беспорядок приводит к разрушению сосуществующих локальных фаз, характерных для ФП первого рода.

Список использованных источников:

1. Wu F.Y. The Potts model // Rev. Mod. Phys. – 1982. – V. 54. – № 1. – P. 235–268.
2. Wu F.Y. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. London: World Scientific, 2009. – 641.
3. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
4. Ермилов А.Н. Аналитический метод исследования стохастической модели Поттса // Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 1989. – Т. 20. – № 6. – С. 1479.
5. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems // Phys. Lett. 1989. – V. 62. – P. 361.
6. Бабаев А.Б., Муртазаев А.К. Моделирование трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Монте-Карло // Физика металлов и металловедение. 2023. – Т.124. – №7. – С. 577.
7. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов. –М.: Физматлит, 2023. – 184 с.

УДК 538.955

**Спиновые переходы в людвигите Co_2FeBO_5 под высоким давлением:
ab initio исследование****Жандун В.С.**к.ф.-м. н., старший научный сотрудник Института физики СО РАН,
ФИЦ “КНЦ СО РАН”**Казак Н.В.**д.ф.-м. н., старший научный сотрудник Института физики СО РАН,
ФИЦ “КНЦ СО РАН”

Аннотация. Новые оксибораты $\text{Me}_2\text{Me}'\text{BO}_5$, где Me и Me' - переходные металлы, привлекают особое внимание как перспективные ферримагнетики [1-4]. Ферримагнетный людвигит Co_2FeBO_5 является результатом замены диамагнитных ионов Co^{3+} в людвигите Co_3BO_5 на магнитный ион Fe^{3+} , что играет решающую роль в зарядовом и магнитном балансе, определяя уникальные электронные и магнитные свойства данного соединения. В настоящей работе исследуется влияние давления на магнитные и электронные свойства людвигита Co_2FeBO_5 в рамках теории функционала плотности. Расчеты при высоком давлении показывают, что магнитные моменты Fe и Co имеют различное поведение под давлением. Давление оказывает существенное влияние на магнитное состояние атомов Co_2 и Fe_4 , что приводит к резкому уменьшению их магнитных моментов при критическом давлении. В свою очередь магнитные моменты триады $\text{Co}_3\text{-Co}_1\text{-Co}_3$ испытывают слабое монотонное уменьшение с давлением. Наряду со спиновыми переходами обнаружен коллапс энергетической щели при критическом давлении $P=50$ ГПа.

Ключевые слова: первопринципные расчеты, людвигиты, магнитные и электронные свойства, высокие давления, спин-кроссовер

**Spin-state transitions in Co_2FeBO_5 ludwigite under high pressure:
an ab-initio investigation****Zhandun V.S.**PhD Sc., Senior Scientist, Institute of Physics SB RAS,
Federal Research Center “KSC SB RAS”**Kazak N.V.**

Doctor of Science, Senior Scientist, Institute of Physics SB RAS, Federal Research Center “KSC SB RAS”

Annotation. New oxyborates $\text{Me}_2\text{Me}'\text{BO}_5$, where Me and Me' are transition metals, are attracting special attention as promising ferrimagnets [1-4]. Ferrimagnetic ludwigite Co_2FeBO_5 is the result of the replacement of diamagnetic Co^{3+} ions in ludwigite Co_3BO_5 by the magnetic ion Fe^{3+} , which plays a decisive role in charge and magnetic balance, determining the unique electronic and magnetic properties of a given compound. In the present work the effect of pressure on the magnetic and electronic properties of ludwigite Co_2FeBO_5 within the framework of density functional theory was studied. Calculations at high pressure show that the magnetic moments of Fe and Co have different

behavior under pressure. Pressure has a significant effect on the magnetic state of Co2 and Fe4 atoms, which leads to a sharp decrease in their magnetic moments at critical pressure. In turn, the magnetic moments of the Co3-Co1-Co3 triad slightly decrease monotonically with pressure. Along with spin transitions, the collapse of the energy gap was discovered at a critical pressure $P=50$ GPa.

Keywords: *ab initio calculations, ludwigites, magnetic and electronic properties, high pressures, spin crossover*

В настоящей работе проведено *ab initio* исследование возможного влияния гидростатического давления на электронные и магнитные состояния ионов Fe и Co в людвигите Co_2FeVO_5 . Внешнее давление постепенно увеличивалось с шагом 10 ГПа до 100 ГПа. Анализируя зависимость магнитных моментов от давления, мы обнаружили, что в диапазоне давлений $0 < P < 50$ ГПа величины магнитных моментов как атомов Co, так и Fe практически не зависят от давления (рис. 1), в интервале 50-100 ГПа поведение магнитных моментов от давления зависит от кристаллографической позиции атомов металла.

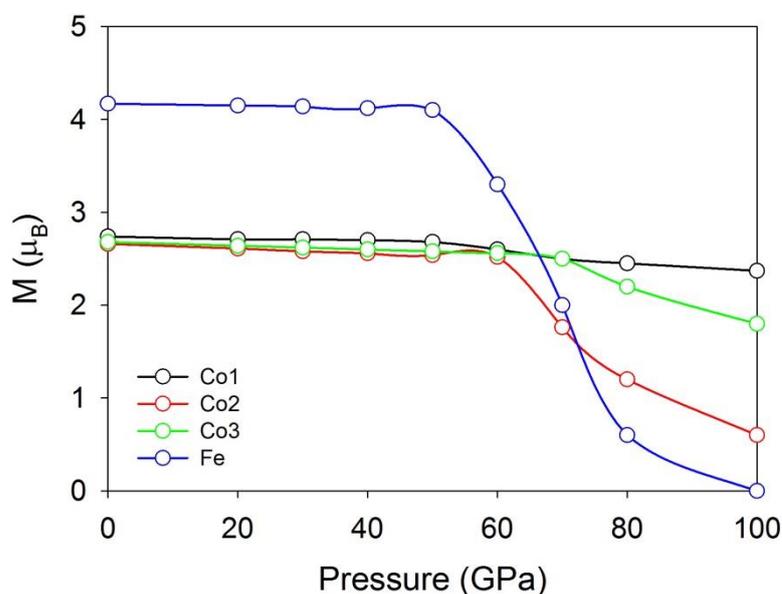


Рис. 1. Расчетные зависимости магнитных моментов от давления для узлов Co1, Co2, Co3 и Fe4.

Так, магнитный момент Co1 практически не изменяется с давлением и испытывает лишь слабое уменьшение с давлением. Поведение момента Co3 более интересно; монотонное снижение с давлением до 70-80 ГПа с последующим более резким уменьшением. Действительно, при максимальном давлении, для которого проводился расчет, магнитный момент Co3 показывает довольно большую величину $m_s(\text{Co3})=1,8$ μ_B , что предполагает отсутствие спинового перехода на этом металлическом узле. Более выраженное влияние высокое давление оказывает на магнитный момент Co2, что приводит к резкому уменьшению значения при 80 ГПа, до $m_s(\text{Co2})=1,1$ μ_B (рис.1). Наконец, мы обнаружили резкое влияние высокого давления на магнитный момент атома Fe4, который испытывает спиновый переход при критическом давлении. При давлении выше 50 ГПа магнитный момент железа резко падает, достигая величины $m_s(\text{Fe4})=0,6$ μ_B при $P=80$ ГПа (рис. 1). Проведен анализ заселенности Co и Fe 3d-оболочек в зависимости от давления. Видно, что уменьшение магнитного момента во всех узлах металла связано в основном с перераспределением d-электронов между состояниями со спином вверх и вниз. Давление оказывает гораздо меньшее влияние на электронное распределение атомов Co1 и Co3. Более того, установлено, что высокое давление оказывает большее влияние на локальное окружение позиций Co2 и Fe4, приводя к резкому увеличению их локальных искажений. Наконец, мы изучили эволюцию

запрещенной зоны под давлением, где обнаружен коллапс энергетической запрещенной зоны и переход металл-изолятор при критическом давлении $P=50$ ГПа (рис.2).

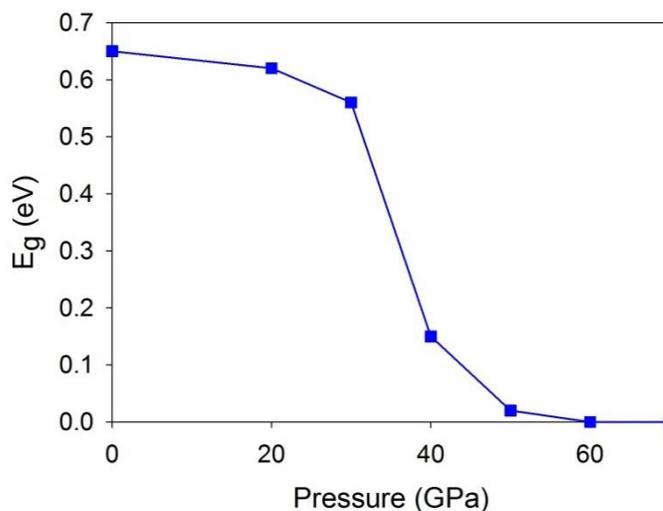


Рис. 2. Изменение ширины запрещенной зоны под давлением

Благодарности. Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-12-20012, <https://rscf.ru/project/24-12-20012>, Красноярского краевого фонда науки.

Список использованной литературы:

1. M. A. Continentino, J. C. Fernandes, H. A. Borges, A. Sulpice, J.-L. Tholence, J. L. Siqueira, J. B. M. da Cunha and C. A. dos Santos, Magnetic interactions in the monoclinic ludwigite $\text{Cu}_2\text{FeO}_2\text{BO}_3$ // *Eur. Phys. J. B*, 1999, 9, 613– 618, DOI: 10.1007/s10051005080.
2. J. Schaefer and K. Bluhm, Zur Kristallstruktur von $\text{Cu}_2\text{M}(\text{BO}_3)_2$ ($\text{M}=\text{Fe}^{3+}$, Ga^{3+})// *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 1995, 621, 571–575, DOI: 10.1002/zaac.19956210414.
3. J. P. Attfield, J. F. Clarke and D. A. Perkins, Magnetic and crystal structures of iron borates//*Phys. B*, 1992, 180, 581– 584, DOI: 10.1016/0921-4526(92)90401-D.
4. Q. Ping, B. Xu, X. Ma, J. Tian and B. Wang, An iron oxyborate Fe_3BO_5 material as a high-performance anode for lithium-ion and sodium-ion batteries //*Dalton Trans.*, 2019, 48(17), 5741–5748, DOI: 10.1039/C9DT00010K.

УДК 538.9

Фазовая диаграмма трехвершинной модели Поттса на ОЦК решетке

Курбанова Д.Р.

к.ф.-м.н., Институт физики ДФИЦ РАН

Муртазаев А.К.

д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, директор ДФИЦ РАН

Магомедов М.А.

к.ф.-м.н., Институт физики ДФИЦ РАН

Рамазанов М.К.

к.ф.-м.н., Институт физики ДФИЦ РАН

***Аннотация.** В данной работе на основе репличного обменного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло исследовано влияние конкуренции обменных взаимодействий на фазовые переходы и термодинамических свойства трехвершинной модели Поттса на объемно-центрированной кубической решетке. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Обнаружено, что учет взаимодействия вторых ближайших соседей в диапазоне $-0.6 \leq J_2 < 0$ приводит к фазовому расслоению. Установлены магнитные структуры основного состояния, соответствующие разным областям фазовой диаграммы.*

***Ключевые слова:** фазовая диаграмма, Модель Поттса, фазовый переход, Монте-Карло*

Phase diagram 3-state potts model on the BCC lattice

Kurbanova D.R.

PhD, Institute of Physics of Daghestan Federal Research Centre of RAS

Murtazaev A.K.

Dr., cor. member RAS, director, DFRC RAS

Magomedov M.A.

PhD, Institute of Physics of Daghestan Federal Research Centre of RAS

Ramazanov M.K.

PhD, Institute of Physics of Daghestan Federal Research Centre of RAS

***Annotation.** In this work, based on the replica exchange algorithm and the Wang-Landau algorithm of the Monte Carlo method, the influence of the competition of exchange interactions on phase transitions and the thermodynamic properties of the three-vertex Potts model on a body-centered cubic lattice is studied. A phase diagram of the dependence of the critical temperature on the magnitude of the interaction of the second nearest neighbors has been constructed. It was found that competition of exchange interactions in the range $-0.6 \leq J_2 < 0$ leads to phase separation. The magnetic structures of the ground state corresponding to different regions of the phase diagram have been established.*

***Keywords:** phase diagram, Potts model, Monte-Karlo*

Фазовая диаграмма модели описывает морфологию фаз, устойчивость фаз, переходы из одной фазы в другую и соответствующие линии переходов. Модель Поттса с конкурирующими взаимодействиями в последнее время широко исследуется из-за возникновения необычных магнитных упорядочений. Основой для возникновения уникальных состояний является отсутствие или затрудненность формирования дальнего порядка. Порядок фазового перехода в модели Поттса зависит от пространственной размерности и числа состояний q .

Фазовые переходы в антиферромагнитных моделях Поттса более сложны, чем в ферромагнитных моделях, поскольку сильно зависят от микроструктуры решетки [1,2]. Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Одним из физических примеров является спиновое стекло. Стекла Поттса обычно используют для описания большого класса анизотропных ориентационных стекол [3].

В настоящей работе на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло мы исследуем влияние конкуренции обменного взаимодействия на фазовые переходы и термодинамические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ на объемно-центрированной кубической решетке [4-6].

Гамильтониан модели:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных взаимодействий для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 8 \div 64$.

Используя метод разности плотности энергии состояний и гистограммный анализ данных, проведен анализ порядка фазовых переходов. На рис. 1 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме наблюдаются несколько различных фаз: частично разупорядоченная фаза (PD1), упорядоченная фаза (LS) и частично разупорядоченная фаза (PD2). При фазе PD1 слоистые структуры чередуются с разупорядоченными слоями (рис. 2(а)), т.е. часть узлов, обозначенных на рисунке зеленым и синим цветом, будут иметь случайное направление спинов, причем доля направлений спинов меняется с температурой. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к фазовому расслоению. На диаграмме при $-0.6 \leq J_2 < 0$ наблюдается область с упорядоченными структурами – фаза LS (полосовые структуры чередуются со страйповыми (рис. 2(б))). При фазе PD2 – страйповые структуры чередуются с разупорядоченными слоями (рис. 2(в)). Анализ порядка ФП, проведенный для всего рассмотренного интервала J_2 , показывает, что фазовый переход из фазы PD1 в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход из фазы PD2 в парамагнитную фазу – первого рода. Установлены магнитные структуры основного состояния, соответствующие разным областям фазовой диаграммы. Беспорядок является особенностью данной системы. Показано, что учет взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $-0.6 \leq J_2 < 0$ приводит к упорядочению системы.

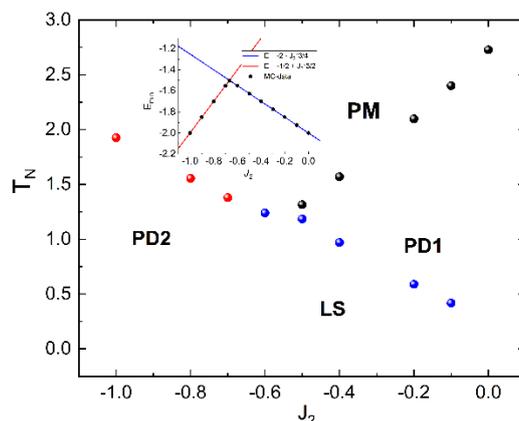


Рис. 1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от J_2 .

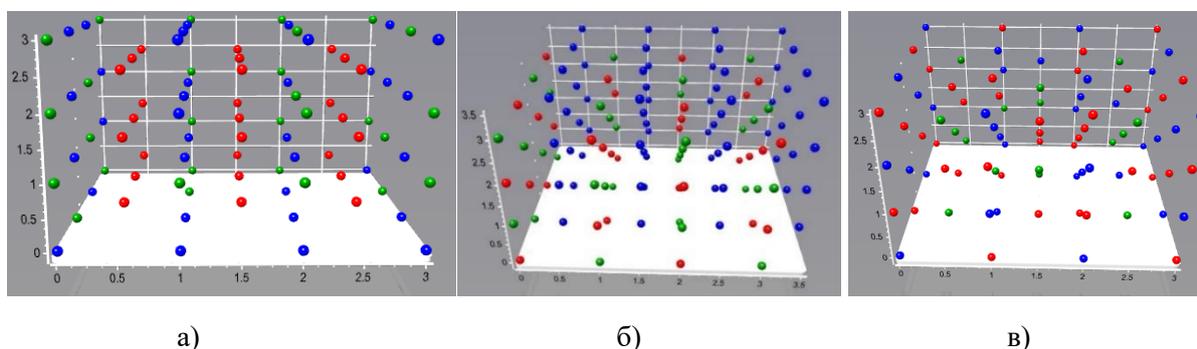


Рис. 2. Магнитные структуры основного состояния, реализуемые в системе при различных значениях J_2 : (а) $J_2 > -0.6$, (б) $-0.6 \leq J_2 < 0$, (в) $J_2 < -0.6$

Работа выполнена при поддержке фонда Гаджи Махачева по поддержке науки, образования и культуры.

Список использованных источников:

1. Wu F.Y., The Potts model. Rev. Mod. Phys. – 1982. – Vol. 54. – P. 235.
2. Kurbanova D.R., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Magomedov M.A. Phase transitions in the four-state Potts model with competing exchange interactions: Application of the Wang-Landau algorithm // Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures. – 2023. – Vol. 140. – P. 115626.
3. Höchli U.T., Knorr K., and Loidl A. Adv. Phys. – 1990. – Vol. 39. – P. 405.
4. Курбанова Д.Р., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Муртазаев А.К. Антиферромагнитная модель Поттса на объемно-центрированной кубической решетке // ЖЭТФ. – 2023. – Т.163, вып. 6. – С. 816-821.
5. Wang F., Landau D.P., Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. Phys. Rev. Lett. – 2001. – Vol. 864. – pp. 2050-2053.
6. Landau D.P., Wang F., A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics. Braz. J. Phys. – 2004, – Vol. 34. – pp. 354-362.

УДК 538.9

Влияние размытости структурного перехода 1-го рода $P6_3/mmc \leftrightarrow P_{nma}$ на магнитоструктурные свойства в $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$

Вальков В.И.

д.ф.-м.н., проф., Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Головчан А.В.

к.ф.-м.н., ст. науч. сотр., Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Грибанов И.Ф.

к.ф.-м.н., ст. науч. сотр., Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Ковалев О.Е.

мл. науч. сотр., Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Митюк В.И.

ст. науч. сотр., Научно-практич. центр НАН Беларуси по материаловедению

***Аннотация.** На примере $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$ предложен подход для описания магнитоструктурных особенностей системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ в рамках концепции размытых фазовых переходов 1-го рода. В основе подхода лежит объединение двух моделей описания структурных переходов 1-го рода $hex(P6_3/mmc) \leftrightarrow orth(P_{nma})$. Микроскопическая модель точечных переходов 1-го рода используется для описания фазового состояния гомогенной среды зародыша ромбической фазы. Термодинамическая модель перераспределения зародышей обеих фаз гетерогенной среды образца под действием энтропии смешения используется для описания макроскопического фазового состояния. В рамках используемой модели дано объяснение трех типов фазовых переходов, наблюдаемых в системах со структурной неустойчивостью. Показано, что изоструктурные переходы 1-го рода могут быть барическими этапами для исходного изоструктурного перехода 2-го рода, при воздействии на образец гидростатического давления.*

***Ключевые слова:** размытые структурные фазовые переходы, размытые магнитоструктурные переходы 1-го рода, гетерогенная среда, гелимагнетизм.*

The effect of the blurriness of the structural first-order transition $P6_3/mmc \leftrightarrow P_{nma}$ on the magnetostructural properties in $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$

Val'kov V.I.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,
Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering

Golovchan A.V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher,
Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering

Gribanov I.F.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher,
Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering

Kovalev O.Ye.

Junior scientist, Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering

Mitsiuk V.I.

Senior Researcher, Scientific and Practical center National Academy of Sciences of Belarus

***Annotation.** Using the example of $NiMn_{0.89}Cr_{0.11}Ge$, an approach is proposed to describe the magnetostructural features of the $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ system within the framework of the concept of*

blurred first-order phase transitions. The approach is based on the combination of two models for describing structural first-order transitions $\text{hex}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{orth}(P_{nma})$. A microscopic model of point first-order transitions is used to describe the phase state of a homogeneous environment of a orthorhombic phase nucleus. A thermodynamic model of the redistribution of the nucleus of both phases of a heterogeneous environment sample under the influence of mixing entropy is used to describe the macroscopic phase state. Within the framework of the model used, an explanation of three types of phase transitions observed in systems with structural instability is given. It is shown that isostructural first-order transitions can be baric stages for the initial isostructural second-order transition, when hydrostatic pressure is applied to the sample.

Keywords: *blurred structural phase transitions, blurred magnetostructural first-order transitions, heterogeneous environment, gelimagnetism.*

Структурные переходы из гексагонального $\text{hex}(P6_3/mmc)$ в ромбическое $\text{orth}(P_{nma})$ состояние в парамагнитной области температур системы $\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{NiGe}$ обладают рядом характеристик, которые позволяют отнести их к парамагнитным структурным фазовым переходам 1-го рода. К таким характеристикам относятся значительное изменение удельного объема, спонтанное выделение (поглощение) тепла и большой температурный гистерезис [1]. Однако поскольку эти характеристики реализуются не скачкообразно (что, согласно Эренфесту, является необходимым условием [2]), то эти переходы можно отнести к категории размытых фазовых переходов 1-го рода [3-5]. Одним из показателей размытости парамагнитного (PM) структурного перехода $\text{PMhex}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{PMorth}(P_{nma})$ является плавное изменение содержания ромбической фазы P_{nma} в образце $I_{\text{orth}}(T)$ в пределах конечного интервала характерных температур перехода. Зависимость $X\text{-Int}_{\text{orth}}(T)$, рис.1b, определялась методом рентгенофазового анализа по изменению интенсивностей дифракционных максимумов сменяющихся фаз. При нагреве или охлаждении образца в определенных температурных интервалах наблюдается монотонное изменение $X\text{-Int}_{\text{orth}}(T)$. Предполагается, что эти температурные интервалы определяют степень размытости структурного перехода 1-го рода $\text{PMhex}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{PMorth}(P_{nma})$.

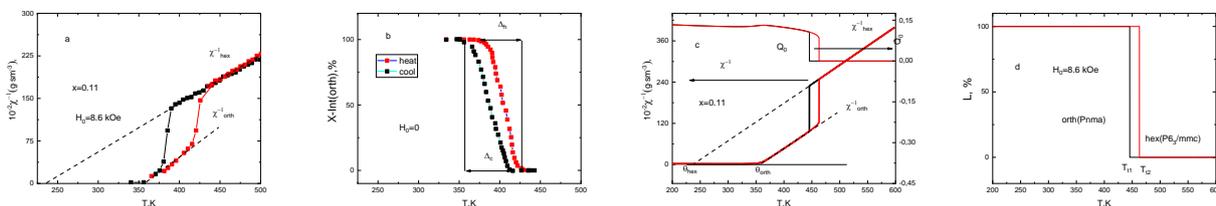


Рисунок 1. Экспериментальные (a, b) и теоретические (c, d) температурные зависимости обратной PM восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ и функции фазового состояния

На рис.1 экспериментальная зависимость $X\text{-Int}_{\text{orth}}(T)$ для образца с $x=0.11$ показывает размытие перехода в пределах $\Delta_h=56$ К при нагреве и порядка $\Delta_c=65$ К при охлаждении. Для модели точечных переходов 1-го рода эти величины должны приближаться к нулю.

Аномальное поведение обратной парамагнитной восприимчивости и изменение фазового состояния заканчивающееся ниже парамагнитной температуры Кюри θ_{orth} (рис.2) характерно для размытого структурного перехода 1-го рода $\text{hex}(P6_3/mmc) \leftrightarrow \text{orth}(P_{nma})$.

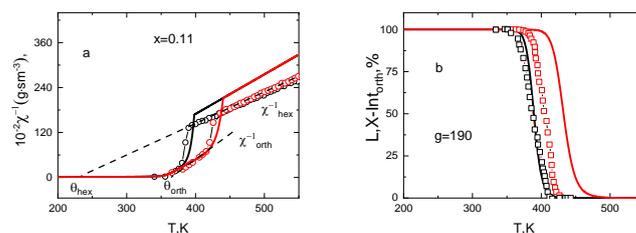


Рисунок 2. Совмещенные экспериментальные (символы) и теоретические (линии) температурные зависимости магнитоструктурных характеристик сплава с $x=0.11$ системы $\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{NiGe}$ при атмосферном давлении (g -число структурных единиц в ромбическом зародыше).

Изотермические зависимости энтропии $\Delta S(T)$, рассчитанные на основе соотношения Максвелла в диапазоне изменения магнитного поля $\Delta H=9.7$ кЭ дополняют магнитоструктурные особенности исследуемого образца. На рис.3 сопоставляются экспериментальные и теоретические зависимости удельных $M(T)$, и $\Delta S(T)$, которые дают представление о взаимосвязи магнитокалорических и магнитоструктурных особенностей системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ при атмосферном давлении.

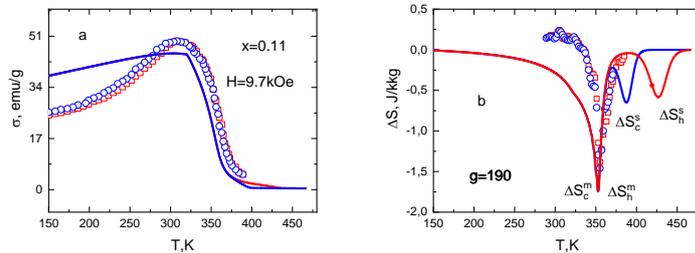


Рисунок 3. Сопоставление температурных зависимостей магнитных $M(T)$ и магнитокалорических $\Delta S(T)$ характеристик для образца с $x=0.11$ системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ (символы-эксперимент; линии-модель).

Как видно из рис.3, для сплавов с разнесенными структурным и магнитным переходами характерна четырехпиковая структура зависимости $\Delta S(T)$. Согласно модели, первые два низкотемпературные пика соответствуют магнитокалорическому вкладу от изоструктурного магнитного фазового перехода $PMorth(P_{nma}) - NMorth(P_{nma})$ в пределах ромбической фазы. Возникновение (исчезновение) этой фазы в результате размытого структурного перехода 1-го рода $PMhex(P_{b3/mmc}) \leftrightarrow PMorth(P_{nma})$ может быть причиной двух высокотемпературных пиков $\Delta S(T)$, соответствующих охлаждению и нагреву. «Структурные» пики значительно меньше по величине «магнитных» пиков. Эти выводы подтверждаются совмещением теоретических магнитных, калорических и структурных характеристик, приведенных на рис.4. Здесь к структурным характеристикам относятся безразмерные параметры локального структурного порядка Q_0 .

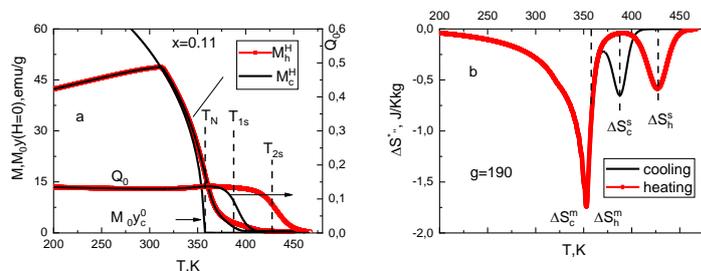


Рисунок 4. Взаимосвязь пиковой структуры $\Delta S(T)$ с магнитокалорическими и магнитоструктурными характеристиками (теория).

Как видно из рис.4 температурная область изменения параметра магнитного порядка $y_{c,h}^0 \equiv y_{cooling,heating}^{H=0}$ находится в области стабильности ромбической фазы, которая лежит за пределами высокотемпературного изменения параметра структурного порядка Q_0 . Поэтому низкотемпературные пики $\Delta S(T)$ соответствуют только магнитному вкладу усиленному изоструктурным переходом 2-го рода $PMorth(P_{nma}) \leftrightarrow NMorth(P_{nma})$ в уже устойчивой ромбической фазе ($Q_0/Q_{0max} \approx 1$). Высокотемпературные пики находятся именно в области температурных изменений параметра структурного порядка выше температуры Нееля T_N т.е. за пределами основного изменения и параметра магнитного порядка y ($H=0$) и намагниченности $M(H)=M_0 \cdot y(H)$.

Еще одной особенностью свойств системы является барическая трансформация магнитоструктурных свойств. В рамках модели размытых переходов рассмотрим ряд этапов

УДК 537.622.4

Фазовый переход и критическое поведение в ферромагнитной фазе Лавеса NdRh₂**Краснорусский В.Н.**

н.с., Институт физики высоких давлений РАН

Боков А.В.

м.н.с., Институт физики высоких давлений РАН

Семено А.В.

с.н.с., к.ф.-м. н., ИФВД РАН, Институт общей физики РАН

Саламатин Д.А.

с.н.с., к.ф.-м. н., Институт физики высоких давлений РАН

Сидоров В.А.

в.н.с., к.ф.-м. н., Институт физики высоких давлений РАН

Цвященко А.В.

зав.лаб. НМСМ, к.ф.-м. н., Институт физики высоких давлений РАН

***Аннотация.** Поликристаллический образец NdRh₂ синтезирован при высоком давлении и температуре в кубической структуре фазы Лавеса C15. В диапазоне температур $2 \leq T \leq 80$ К и магнитных полей $\mu_0 H \leq 9$ Т была детально измерена намагниченность. Полученные полевые зависимости проанализированы построением Белова-Аррота и модифицированного Аррота. Обнаружены нестандартные критические показатели $\beta = 1.5$, $\gamma = 1$, $\delta = 1.7$. Обнаруженная аномалия в магнитных свойствах связывается с наличием двух магнитных подсистем – локализованного магнетизма, связанного с 4f ионами Nd и второй системы связанной с зонным магнетизмом Rh.*

***Ключевые слова:** ферромагнетизм, зонный магнетизм, фаза Лавеса, синтез при высоком давлении*

Phase transition and critical behaviour in the ferromagnetic Laves phase of NdRh₂**Krasnorussky V. N.**

Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS

Bokov A. V.

Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS

Semenov A. V.

PhD, HPPI RAS, Institute of General Physics, RAS

Salamatin D. A.

PhD, Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS

Sidorov V. A.

PhD, Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS

Tsvyashchenko A. V.

PhD, Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS

Annotation. Polycrystalline $NdRh_2$ samples were synthesised at high pressure and temperature in the cubic structure of the Laves $C15$ phase. In the temperature range $2 \leq T \leq 80$ K and magnetic fields $\mu_0 H \leq 9$ T, the magnetisation was measured in detail. The obtained field dependences were analysed by the Belov-Arrott and modified Arrott construction. Non-standard critical indices $\beta = 1.5$, $\gamma = 1$, $\delta = 1.7$ were found. The detected anomaly in the magnetic properties is attributed to the presence of two magnetic contributions - localised magnetism associated with $4f$ Nd ions and the second associated with Rh zone magnetism.

Keywords: ferromagnetism, itinerant magnetism, Laves phase, high-pressure synthesis

Магнитные свойства интерметаллических соединений редкой земли (R) с переходным 3d металлом (M) по-прежнему активно исследуются. Помимо интересных физических свойств данные соединения имеют различные технические приложения, такие как постоянные магниты, магнитоотрицательные устройства, материал для хранения водорода и т.п. Интересные свойства RM соединений являются следствием наличия в соединении как 4f так и 3d атомов. Фазы Лавеса являются одним из наиболее распространенных двойных соединений типа AB_2 . С точки зрения фундаментальных исследований эти материалы интересны тем, что представляют собой почти идеальную модельную систему.

При высоком давлении и температуре из исходных компонент Nd и Rh в камере типа «тороид» в ИФВД РАН синтезирован $NdRh_2$ в кубической структуре $C15$ ($MgCu_2$ – тип). Состав и структура были подтверждены путем рентгенофазового анализа. На вибрационном магнитометре установки PPMS Quantum Design в ИФВД РАН была детально измерена намагниченность полученных образцов в диапазоне магнитных полей $0 \leq \mu_0 H \leq 9$ T и температур $2 \leq T \leq 80$ K. Полученные полевые зависимости намагниченности $M(\mu_0 H)$ (панель а), а также температурная зависимость спонтанной намагниченности $M_s(T)$ (панель б) определенные на формульную единицу (f.u.) представлены на рис. 1.

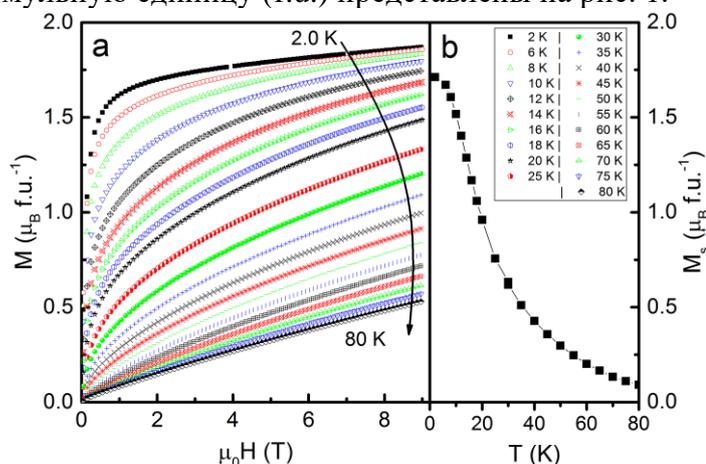


Рис. 6 Полевые зависимости намагниченности (панель а) $M(\mu_0 H)$ для ряда температур в диапазоне $2 \leq T \leq 80$ K и температурная зависимость спонтанной намагниченности $M_s(T)$ (панель б) образца $NdRh_2$.

Хорошо известно [1], что спонтанная намагниченность ферромагнетика (ФМ) благодаря возбуждению спиновых волн с ростом T спадает по Блоховскому закону $(T)^{3/2}$. В случае $NdRh_2$ как видно из Рис.1 (В) такое поведения не происходит. Возможно, наблюдаемое плавное спадание намагниченности при $T > 20$ K и к тому же с кривизной противоположной стандартной, связано с каким-либо дополнительным магнитным вкладом, маскирующим возбуждение спиновых волн с ростом температуры.

В литературе $NdRh_2$ упомянут [2] как ФМ с $T_C = 6$ K. Для определения температуры перехода было выполнено построение Белова-Аррота, которое в случае ФМ в больших полях, превышающих поле реориентации доменов, дает прямые параллельные линии в

координатах $M^2(H/M)$, и при $T = T_C$ прямая линия проходит через начало координат. Данное построение приведено на Рис.2 (левая панель) и из него следует, что $T_C \sim 18$ К.

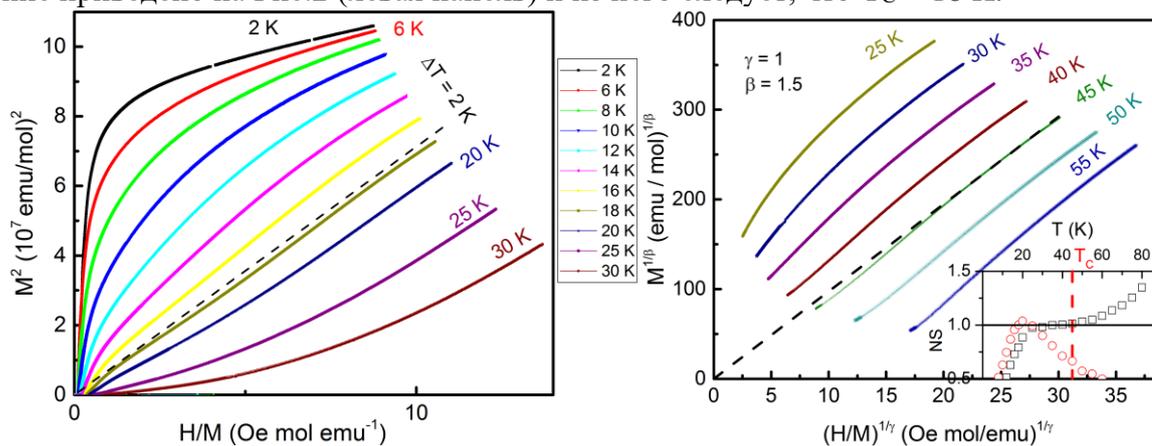


Рис. 2 Построение Белова-Аррота (левая панель) и модифицированное Аррота (правая панель) для $NdRh_2$. На вставке приведены нормализованные температурные зависимости наклона построенных в координатах Белова-Аррота (красная зависимость) и модифицированного Аррота (черная зависимость). Пунктирные прямые линии построены из начала координат вблизи T_C в качестве ориентира для глаз.

Критическое поведение магнитной системы вблизи фазового перехода второго рода характеризуется критическими экспонентами β , γ и δ , которые описывают поведение спонтанной намагниченности, восприимчивости и зависимости намагниченности от поля при $T \sim T_C$. В результате был проведен анализ в рамках модифицированного построения Аррота по методике, представленной в [3]. А именно, начиная с построения Белова-Аррота, методом итераций были уточнены коэффициенты β и γ при которых в координатах $M^{1/\beta}(H/M)^{1/\gamma}$ наблюдается параллельное поведение зависимостей в больших полях. При итерациях также происходил выбор T_C . Таким образом, были найдены коэффициенты, которые отличаются от представления среднего поля и представленные построением Белова-Аррота, когда $\beta = 1/2$ и $\gamma = 1$. Для модифицированного построения наиболее подходящими являются критические индексы $\beta = 3/2$ и $\gamma = 1$ (см. Рис. 2 правая панель), при этом температура перехода также изменилась и составляет $T_{C2} \sim 46$ К. Данное значение коррелирует с появлением особенности на температурной зависимости магнитной восприимчивости (здесь не представлена).

Для определения качества произведенных построений был проведен их дополнительный анализ в рамках определения и построения T зависимости наклона кривых. На вставке правой панели рис.2 приведены нормализованные температурные зависимости наклона кривых, построенных в координатах Белова-Аррота (красная кривая) и модифицированного Аррота (черная кривая). Видно, что действительно в обоих случаях есть область температур вблизи критической, где наблюдается слабое изменение с T наклона полевых зависимостей в соответствующих координатах, что указывает на правильность выбора критических индексов. Отметим, что в случае модифицированного закона эта область существенно шире, что указывает на то, что модифицированное построение лучше отражает критическое поведение по сравнению с построением Белова-Аррота. Также отметим, что при переходе от построения Белова-Аррота к модифицированному построению Аррота изменился и характер поведения наклона – более привычное: сначала растущий, затем падающий, сменился на растущий, плато и затем – растущий далее. Кроме этого, величина критического индекса β также не соответствует каким-либо известным теоретическим представлениям.

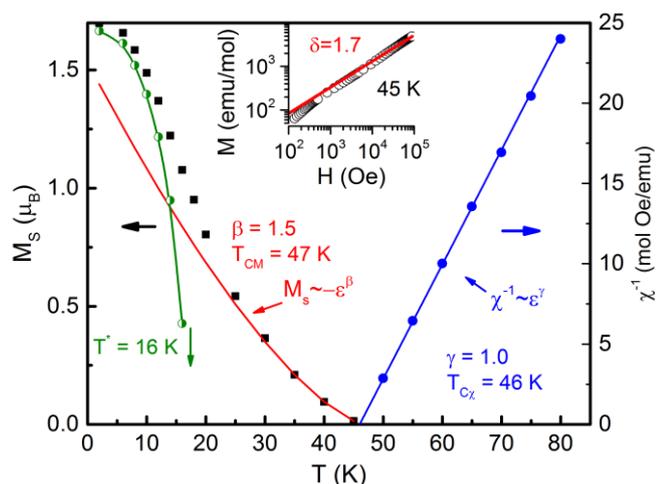


Рис. 3 Температурные зависимости спонтанной намагниченности $M_S(T)$ (левая шкала) и обратной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ (правая), определенные из модифицированного построения Аррота, степенные зависимости с $\beta = 3/2$ и $\gamma = 1$ показаны сплошными линиями. $M_S(T)$ определенная из построения Белова-Аррота – зеленые точки (линия – ориентир для глаз). На вставке показана $M(H)$ при $T = 45$ К и красная линия – степенная зависимость $M \sim H^{1/\delta}$, где $\delta = 1.7$.

На рис. 3 представлены температурные зависимости, определенные из модифицированного построения Аррота, спонтанной намагниченности $M_S(T)$ и обратной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ – черные и синие точки соответственно. Красная и синяя линии демонстрируют степенное поведение этих зависимостей с индексами $\beta = 3/2$ и $\gamma = 1$. Видно, что они действительно хорошо описывают данные вблизи $T_{C2} = 46$ К. Наклон $\chi^{-1}(T)$ соответствует эффективному моменту $\mu_{\text{eff}} = 3.4 \mu_B$, что слегка меньше теоретического значения μ_{eff} иона Nd^{3+} ($3.6 \mu_B$). Дополнительным критерием правильности выбора критических коэффициентов является определение критического индекса δ из соотношения Видома $\gamma = \beta(\delta - 1)$ (здесь $\delta = 1.7$). На вставке рис. 3 представлены экспериментальные данные $M(H)$ при T вблизи T_{C2} (точки) и прямая линия $M \sim H^{1/\delta}$ где $\delta = 1.7$ (красная прямая), видно хорошее описание экспериментальных данных степенным законом. $M_S(T)$ определенная из построения Белова-Аррота представлена зелеными точками на рис. 3. Эта зависимость хорошо описывает низкотемпературный участок ($T < 15$ К) поведения экспериментальной зависимости спонтанной намагниченности $M_S(T)$. Как видно из рис. 3 с повышением T наблюдается кроссовер к степенной зависимости с показателем $\beta = 3/2$.

Таким образом, можем отметить несовместное с каким-либо известным теоретическим представлением поведения спонтанной намагниченности $M_S(T)$ в NdRh_2 – кроссовером при 20 К и нестандартными критическими показателями β и δ . При этом $\gamma = 1$, что соответствует модели среднего поля. По-видимому, такое поведение указывает на конкуренцию нескольких магнитных взаимодействий, а именно локализованного магнетизма 4f от Nd и зонного магнетизма 4d-зон Rh. При низких температурах магнитное поведение в основном определяется магнетизмом 4f электронов, с ростом температуры дальний порядок 4f спадает плавно благодаря подмагничиванию через 4d зону Rh.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ 22-12-00008.

Список использованной литературы:

1. F. Keffer in Handbuch der Physik, Vol. XVIII/2, edited by S. Flugge (Springer, Berlin, 1966).
2. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов / К. Тейлор – М.: Мир, 1974.
3. M. Chattopadhyay, P. Arora and S. Roy // J.Phys.Cond.Matt. – 2009 – 21 – 296003.

УДК 537.638.5

Структура и магнитные свойства средне- и высокоэнтропийных сплавов редкоземельных металлов и их гидридов

Панкратов Н.Ю.

к.ф.-м. н., ст.преп. кафедры ОФиФКС, физический ф-тет, МГУ имени М.В. Ломоносова

Крот П.В.

аспирант, химический ф-тет, МГУ имени М.В. Ломоносова

Вербецкий В.Н.

д.х.н., в.н.с. кафедры ХТиНМ, химический ф-тет, МГУ имени М.В. Ломоносова

Терёшина И.С.

д.ф.-м. н., в.н.с. кафедры ФТТ, физический ф-тет, МГУ имени М.В. Ломоносова

***Аннотация.** В данной работе исследуются структурные, магнитные и магнитотепловые свойства средне- и высоко-энтропийном редкоземельных сплавов на основе Gd, Tb, Dy, Ho и Y, а также их гидриды, в области магнитных фазовых переходов, наблюдаемых в широком температурном интервале. Получены полевые и температурные зависимости величины МКЭ в полях до 18 кЭ в температурном интервале 80-230 К и определена хладоёмкость материалов. Установлено, что внедрение водорода (при его небольших концентрациях) и сложные многокомпонентные эквиатомные замещения в редкоземельных сплавах приводит к возрастанию хладоёмкости, что играет важную роль в повышении производительности магнитных твердотельных холодильных устройств.*

***Ключевые слова:** магнитокалорический эффект, магнитные фазовые переходы, редкоземельные металлы, средне- и высоко-энтропийные сплавы.*

Structural and magnetic properties of medium- and high-entropy alloys and hydrides of rare-earth elements

Pankratov N.Yu.

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

Krot P.V.

Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University

Verbetsky V.N.

Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University

Tereshina I.S.

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

***Annotation:** Structural, magnetic and magnetothermal properties of medium- and high-entropy rare-earth alloys based on Gd, Tb, Dy, Ho and Y, as well as their hydrides, in the region of magnetic phase transitions observed in a wide temperature range were studied. The field and temperature dependencies of the values of magnetocaloric effects in fields up to 18 kOe in the temperature range 80-230 K were obtained. The thermal capacity of the materials was calculated. It was established that the introduction of hydrogen atoms (at low concentrations) and multicomponent equiatomic substitutions in rare-earth alloys leads to an increase in thermal capacity, which is important to increasing the performance of magnetic refrigeration devices.*

Keywords: *magnetocaloric effect, magnetic phase transitions, rare-earth, medium-entropy alloys.*

Водородная энергетика представляет собой перспективную альтернативу традиционной энергетике. Прогресс в развитии водородной энергетике в значительной степени обусловлен созданием эффективных методов получения водорода, его безопасным использованием и хранением [1]. Редкоземельные металлы активно взаимодействуют с водородом, а их гидриды представляют особый интерес для современного развития водородной энергетике и транспорта. В настоящее время многокомпонентные сплавы, которые относятся к категории средне- и высокоэнтропийных, являются объектами с особым набором физико-химических свойств. Способность средне- и высокоэнтропийных сплавов сохранять структуру исходных компонентов открывает для них такую возможность, как получение в результате процедуры наводороживания новых материалов с широким спектром функциональных свойств, перспективных для создания на их основе высокоэффективных устройств для водородной энергетике [1-5]. Целью данной работы явилось получение и комплексное экспериментальное исследование структурных и магнитных свойств средне- и высокоэнтропийных редкоземельных сплавов и их гидрированных аналогов.

В работе был проведен синтез сплавов редкоземельных металлов (РЗМ), представляющих собой различные комбинации элементов La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho и Y в соотношениях, близких к эквиатомному. После подготовки шихты из исходных редкоземельных элементов (чистотой не менее 99.9 масс.%) проводился синтез сплавов в электродуговой печи. Затем сплавы подвергались высокотемпературному отжигу (при температуре 900 °С, продолжительностью несколько часов). Для определения структурных параметров сплавов изучена морфология поверхности при помощи сканирующей электронной микроскопии (SEM) на микроскопе LEO EVO 50 XVP™, уточнен элементный и фазовый состав посредством энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX) и рентгенофазового анализа (XRD) на дифрактометре ARLX'TRA™. Для получения гидридов, а также для дальнейших исследований были отобраны образцы, в которых содержание основной фазы составляло более 90%. Гидриды с различным содержанием водорода были получены на установке типа Сиверста. Количество поглощенного водорода было определено путем измерения изменения давления в камере реактора после завершения реакции. Исследования магнитных свойств проводились на стандартном оборудовании в широком интервале температур (77-300 К) в магнитных полях до 18 кЭ.

Для отобранных образцов был выполнен термомагнитный анализ с целью определения температур магнитных фазовых переходов, включая температуру перехода из магнитоупорядоченного в магнитнеупорядоченное состояние. Поскольку среди используемых РЗЭ самой высокой температурой обладает гадолиний ($T_C = 292$ К), то все исследуемые образцы демонстрировали температуру Кюри (Нееля), в области температур $T_C < 220$ К. Следует отметить, что анализ температурных зависимостей намагниченности, измеренных в слабых магнитных полях, позволил выявить также особенности на кривых $\sigma(T)$, связанные с наличием спин-переориентационных фазовых переходов.

Известно, что редкоземельные металлы способны демонстрировать значительный по величине магнитокалорический эффект (МКЭ) в области магнитных фазовых переходов [6-8]. Именно поэтому следующим этапом данной работы явилась оценка МКЭ как прямым, так и косвенным методом. Изменение энтропии было рассчитано из соотношения Максвелла путем интегрирования полевых зависимостей намагниченности, измеренных в магнитном поле от 0 до 18 кЭ в интервале температур 100 - 250 К через каждые 5 К. Получены температурные зависимости величины МКЭ в различных полях и определена хладоёмкость материала.

Установлено, что в средне- и высокоэнтропийных сплавах РЗМ наблюдается значительное увеличение (в 1.5 – 2 раза) хладоёмкости по сравнению с отдельными РЗМ (Gd, Tb, Dy и Ho). Показано, что увеличение хладоёмкости наблюдается при введении водорода. Найдено, что количество водорода, внедрённого в кристаллическую решетку исходных

сплавов, оказывает сильное влияние на их магнитные характеристики. При малом содержании водорода $x < 0.3$ н. атом/ф.е. величина МКЭ сохраняет высокое значение сравнимое с МКЭ для исходного состава. При дальнейшем возрастании концентрации водорода величина МКЭ плавно снижается.

Выполненное исследование вносит вклад в стратегический поиск новых материалов среди средне- и высоко-энтропийных сплавов, которые сыграют важную роль в значительном повышении производительности магнитных твердотельных холодильных устройств на основе магнитокалорического эффекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-12-00038.

Список использованной литературы:

1. J.Y. Law, V. Franco. Review on magnetocaloric high-entropy alloys: Design and analysis methods // *Journal of Materials Research* 2023 – 38 - 37–51.
2. S.F. Lu, L. Ma, J. Wang et al. Effect of configuration entropy on magnetocaloric effect of rare earth high-entropy alloy // *J. Alloys Comp.* - 2021- 874 - 159918.
3. S. Uporov, E. Sterkhov, I. Balyakin. Magnetocaloric Effect in ScGdHo Medium-Entropy Alloy // *J. Supercond. Nov. Magn.* - 2022 – 35 - 1539–1545.
4. J. Luznik, P. Luznik, S. Vrtnik et al. Complex magnetism of Ho-Dy-Y-Gd-Tb hexagonal high-entropy alloy // *Phys. Rev. B* 2015 – 92 — 224201.
5. R. Soler, A. Evirgen, M. Yao et al. Microstructural and mechanical characterization of an equiatomic YGdTbDyHo high entropy alloy with hexagonal close-packed structure // *Acta Materialia*, – 2018 – 156 – 86-96.
6. S. Vrtnik, J. Lužnik, P. Koželj et al. Disordered ferromagnetic state in the Ce-Gd-Tb-Dy-Ho hexagonal high-entropy alloy // *J. Alloys Comp.* 2018 – 742 – 877-886.
7. W.H. Zhu, L. Ma, M.F. He et al. Magnetic properties and magnetocaloric effect of GdTbHoEr-based high-entropy alloy ribbons // *J Mater Sci: Mater Electron* 2022 - 33 - 25930–25938.
8. S.A. Uporov, S. Kh Estemirova, E.V. Sterkhov et al. Magnetocaloric effect in ScGdTbDyHo high-entropy alloy: Impact of synthesis route // *Intermetallics*, 2022 – 151 – 107678.

УДК 538.214

Магнитные свойства сплавов системы Ni-Mn-Co-Ga при высоких температурах

Кувандиков О.К.

д.ф.-м. н., профессор кафедры общей физики СамГУ

Хамраев Н.С.

к.ф.-м. н., доцент кафедры общей физики СамГУ

Ражабов Р.М.

к.ф.-м. н., доцент кафедры общей физики СамГУ

Аннотация. Исследованы магнитная восприимчивость сплавов системы Ni-Mn-Co-Ga в парамагнитном состоянии до температур 1000 °C. Из экспериментальных данных рассчитаны основные магнитные характеристики: постоянные Кюри, парамагнитные температуры Кюри θ_p и магнитные моменты μ_ϕ , соответствующие химической формуле соединений. Показано, что в изученных сплавах температурная зависимость магнитной восприимчивости подчиняется линейному закону Кюри-Вейсса.

Ключевые слова: магнитная восприимчивость, температура Кюри, магнитный момент

Magnetic properties of alloys of the Ni-Mn-Co-Ga system at high temperatures

Kuvandikov O.,

Doctor of physical and mathematical Sciences, Professor of the Department of physics,
Samarkand state University

Hamrayev N.S.,

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of
physics, Samarkand state University

Razhabov R.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of
physics, Samarkand state University

Annotation. The magnetic susceptibility of alloys of the Ni-Mn-Co-Ga system in a paramagnetic state up to temperatures of 1000 °C has been studied. From the experimental data, the main magnetic characteristics were calculated: Curie constants, paramagnetic Curie temperatures and magnetic moments corresponding to the chemical formula of the compounds. It was shown that in the studied alloys the temperature dependence of magnetic susceptibility obeys the linear Curie-Weiss law.

Keywords: magnetic susceptibility, Curie temperature, magnetic moment

В физике конденсированного состояния редко встречаются материалы, которые испытывают сильные изменения структурных, магнитных, транспортных и других свойств под действием умеренного внешнего магнитного поля при высоких температурах. Такими уникальными материалами являются сплавы Гейслера, исследуемые в настоящей работе. Они вызывают значительный интерес в силу разнообразия проявляемых практически важных свойств, например, таких как магнитная восприимчивость, намагниченность, аномальный эффект Холла, гигантский магнитокалорический эффект, обменное смещение, метамагнетизм, магнитоупругость и др [1-3]. Вышеперечисленные свойства представляют собой перспективу

для практического применения.

В данной работе приводятся экспериментальные результаты по температурным зависимостям магнитной восприимчивости $\chi(T)$ сплавов системы Ni-Mn-Co-Ga. Зависимость $\chi(T)$ исследуемых образцов измеряли относительным методом Фарадея с помощью высокотемпературных маятниковых весов в избыточной атмосфере очищенного гелия. Максимальная относительная ошибка измерения магнитной восприимчивости χ не превышала 3%. Экспериментальные зависимости $\chi(T)$ и $\chi^{-1}(T)$ изученных сплавов соответственно представлено на рис.1 и 2. Тщательный анализ этих рисунков показывает, что χ всех изученных образцов уменьшается с увеличением их температуры (рис.1). Все зависимости $\chi^{-1}(T)$ имеют один излом и два линейных участка (рис. 2).

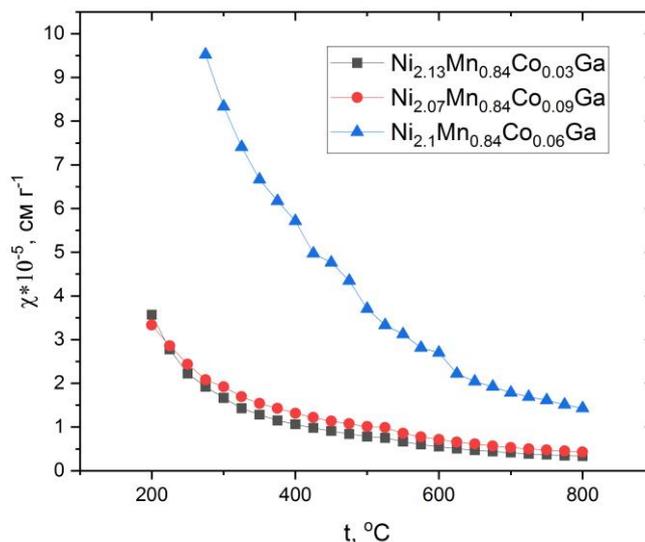


Рис. 1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ сплавов системы Ni-Mn-Co-Ga.

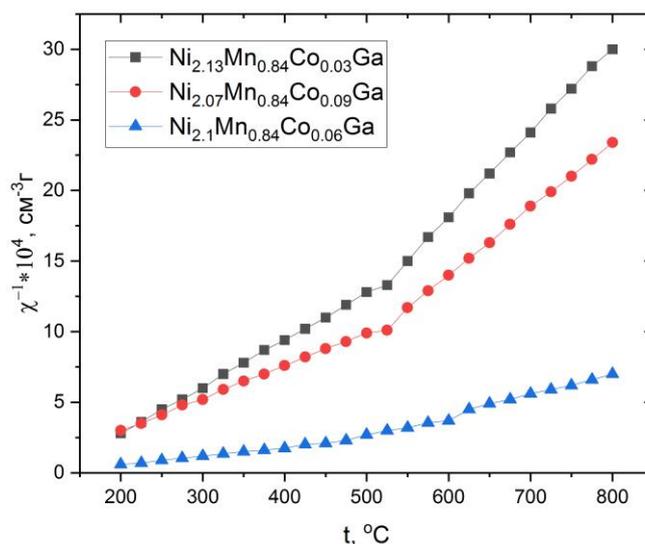


Рис. 2. Температурные зависимости обратной магнитной восприимчивости $\chi(T)$ сплавов системы Ni-Mn-Co-Ga.

Эти изломы наблюдаются для $\text{Ni}_{2.13}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.03}\text{Ga}$ при 525°C , для $\text{Ni}_{2.07}\text{Mn}_{0.8}\text{Co}_{0.09}\text{Ga}$ при 515°C , и для $\text{Ni}_{2.1}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.06}\text{Ga}$ 615°C . Изломы на зависимости $\chi^{-1}(T)$ при температурах 525°C , 515°C и 615°C можно объяснить структурными (полиморфными) превращениями, производящимися в кристаллической решетке изученных образцов при этих температурах. Эти переходы своеобразно отражаются в виде резкого увеличения на зависимостях $\chi^{-1}(T)$ изученных образцов. Линейный характер участки зависимости $\chi^{-1}(T)$ свидетельствуют о том, что зависимости $\chi(T)$ изученных образцов в интервалах температур для $\text{Ni}_{2.13}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.03}\text{Ga}$ $90\text{-}525^\circ\text{C}$ и $525\text{-}800^\circ\text{C}$, для $\text{Ni}_{2.07}\text{Mn}_{0.8}\text{Co}_{0.09}\text{Ga}$ $60\text{-}515^\circ\text{C}$ и $515\text{-}800^\circ\text{C}$ и для $\text{Ni}_{2.1}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.06}\text{Ga}$ $200\text{-}600^\circ\text{C}$ и $600\text{-}800^\circ\text{C}$ подчиняются линейному закону Кюри-Вейсса: $\chi = C/T - \theta_p$, где C – постоянная Кюри-Вейсса, θ_p – парамагнитная температура Кюри. Подобное изменение магнитной восприимчивости обнаруживается в работе [7-9]. Обработкой методом наименьших квадратов, экспериментальных зависимостей $\chi^{-1}(T)$ изученных образцов определены парамагнитные температуры Кюри θ_p и магнитные моменты μ_ϕ , соответствующие химической формуле соединений $\mu_\phi = 2,83\sqrt{CM}\mu_B$, где M – молярная масса образца. Результаты расчетов приведены в таблице.

Таблица.

Образец	Интервал температуры, $^\circ\text{C}$	θ_p , [К]	$C \cdot 10^{-4}$, [$\text{cm}^3 \cdot \text{K} \cdot \text{g}^{-1}$]	μ_ϕ , [μ_B]
$\text{Ni}_{2.13}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.03}\text{Ga}$	110-520	348	28.49	2.35
	520-800	547	21.16	2.03
$\text{Ni}_{2.07}\text{Mn}_{0.8}\text{Co}_{0.09}\text{Ga}$	120-800	352	42.94	2.89
	520-800	563	28.44	2.35
$\text{Ni}_{2.1}\text{Mn}_{0.84}\text{Co}_{0.06}\text{Ga}$	200-600	373	89.79	4.17
	615-800	431	76.13	3.85

Анализ данных в таблице показывает, что значение магнитного момента для изученных соединений меньше по сравнению с значением магнитного момента чистого марганца.

Список использованной литературы:

1. Коуров Н.И., Марченков В.В., Королев А.В. и др.// Физика твердого тела. – 2015– том 57, вып.4. – стр. 684–691.
2. Дробосюк М.О., Файзуллин Р.Р., Бучельников В.Д., Таскаев С.В., Фазлитдинова А.Г. Магнитные свойства четырёхкомпонентных сплавов Ni-Co-Mn-Sn // Вестник Челябинского государственного университета. 2015. № 22 (377). Физика. – Вып. 21. – С. 42–45.
3. Dubenko I., Oli A., Duncan J., Granovsky A., Razhabov R., Hill M., Koshkid'ko Yu, Stadler S., Talapatra S., Ali N. Magnetic properties of B doped Mn-Ga-C based alloys// Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2023 – том 587 – 171505
4. Kuvandikov O.K., Hamraev N.S., Razhabov R.M., Eshkulov A.A., Turdibekov I. Correlation Between Kinetic and Magnetic Properties of Intermetallic Compounds of Gd-In System in Paramagnetic Region.//Russian Physics Journal. –2022. – 65(1) – с. 1–6
5. Kuvandikov O.K., Hamraev N.S., Razhabov R.M., Éshkulov A.A. Estimation of the effective parameter of spinorbital interaction of electrons in intermetallic Er-In system compounds from the kinetic and magnetic properties// Russian Physics Journal. – 2012–54(12) – с. 1384–1388.

УДК 539.955

**Структура и локальные магнитные состояния атомов железа
в фазах Лавеса $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01 - 0.25$)**

Покатилов В.С.

д.ф.м.н., в.н.с., Институт перспективных технологий и индустриального программирования
РТУ МИРЭА; Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Русаков В.С.

д.ф.м.н., профессор, Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Гапочка А.М.

к.ф.м.н., н.с., Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Кубрин С.П.

д.ф.м.н., в.н.с., Научно-исследовательский институт Физики ЮФУ

Сигов А.С.

д.ф.м.н., зав. кафедрой Институт перспективных технологий и индустриального
программирования РТУ МИРЭА

Боков А.В.

м.н.с. Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Магницкая М.В.

к.ф.м.н., с.н.с., Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Цвященко А.В.

к.ф.м.н., в.н.с., Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

***Аннотация:** Работа посвящена исследованию кристаллической структуры, фазового состояния, локальной атомной и магнитной структуры интерметаллической системы $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01 - 0.25$) методами рентгенографии и мессбауэровской спектроскопии при 295 и 87 К. Выполнены первопринципные расчеты сверхтонких взаимодействий, согласующиеся с экспериментом.*

***Ключевые слова:** фазы Лавеса, рентгенография, мессбауэровская спектроскопия, сверхтонкие параметры.*

**Structure and local magnetic states of iron atoms in Laves phases
 $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x=0.01- 0.25$)**

Pokatilov V.S.

Dr.Sc, Leading Researcher, Institute of Advanced Technologies and Industrial Programming of
RTU MIREA; Vereshchagin Institute of High Pressure Physics of the Russian Academy of
Sciences

Rusakov V.S.

Dr.Sc, Professor, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

Gapochka A.M.

Ph.D., Associate Professor, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

Kubrin S.P.

Dr.Sc, Leading Researcher, Research Institute of Physics Southern Federal University

Bokov A.V.

Junior Researcher, L.F. Vereshchagin Institute of High Pressure Physics of the Russian Academy of Sciences

Magnitskaya M.V.

Ph.D., Senior Researcher, L.F. Vereshchagin Institute of High Pressure Physics of the Russian Academy of Sciences

Tsvyashchenko A.V.

Ph.D., Senior Researcher, L.F. Vereshchagin Institute of High Pressure Physics of the Russian Academy of Sciences

Annotation. *The work is devoted to the study of the crystal structure, phase state, local atomic and magnetic structure of the intermetallic $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01 - 0.25$) system by X-ray and Mössbauer spectroscopy at 295 and 15K.*

Keywords: *Laves phases, X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy, hyperfine parameters*

Синтез образцов проводился под давлением 8 ГПа и подробно описан в [1]. Кристаллическая структура образцов системы $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01 - 0.25$) исследовалась методом порошковой рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре MiniFlex 600 с использованием $\text{CuK}\alpha$ -излучения с длиной волны $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Фазовый анализ проводился с помощью программы SmartLab Studio II (Rigaku Corporation) и базы данных PDF-2. Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe снимались при температуре 295 и 15 К в геометрии поглощения на спектрометре MS1104Em (НИИ физики, г. Ростов-на-Дону). Обработка спектров осуществлялась методом модельной расшифровки с помощью программы SpectrRelax [2].

Рентгенографические исследования показали, что в системе $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01 - 0.25$) образуются три фазы: кубическая фаза Лавеса с пространственной группой $O_h^7 - \text{Fd}\bar{3}m$ и примесные фазы (гексагональная фаза $\alpha\text{-Co}(\text{Fe})$ и кубическая фаза $\alpha\text{-Fe}(\text{Co})$). Параметр решетки фазы Лавеса a слегка увеличивается при росте x от $a = 7.41 \text{ \AA}$ ($x = 0.00$ [1]), до 7.45 \AA ($x = 0.01$) и 7.50 \AA ($x = 0.25$).

Обнаружено, что при росте x доля фазы Лавеса уменьшается от $\sim 90\%$ ($x = 0.01$) до $\sim 25\%$ при ($x = 0.25$). Атомы железа в структуре фазы Лавеса расположены в кристаллографически эквивалентных позициях 16(d) – в вершинах тетраэдров (точечная симметрия $\bar{3}m$) с инверсионными осями симметрии третьего порядка в направлениях $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}11]$. Обработка экспериментальных спектров осуществлялась методом наименьших квадратов с помощью программы SpectrRelax [3] в рамках тензорного подхода к описанию анизотропии сверхтонких магнитных взаимодействий ядер ^{57}Fe в соединениях $R\text{Fe}_2$ с кубической структурой C15 [4]. В результате удалось найти оптимальные значения интересующих нас параметров сверхтонких взаимодействий (СТВ): изомерного сдвига δ , константы квадрупольного взаимодействия e^2qQ , изотропного A_{is} и анизотропного A_{an} сверхтонких полей в области расположения ядра, а также азимутального φ и полярного ϑ углов, задающих направление оси легкого намагничивания относительно кристаллографических осей. Параметры СТВ для фазы Лавеса $\text{Ca}(\text{Co}_{0.99}\text{Fe}_{0.01})_2$ при температурах 293 К и 15 К. представлены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры сверхтонких взаимодействий

T (К)	δ (mm/s)	e^2qQ (mm/s)	φ (°)	ϑ (°)	A_{is} (kOe)	A_{an} (kOe)
293	-0.058(2)	-2.138(11)	30.0(4)	24.7(2)	197.9(2)	7.1(2)
15	0.063(2)	-2.286(15)	33.9(11)	18.9(3)	231.5(2)	8.7(2)

Расчеты электронных и магнитных свойств $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01$) проводились в рамках теории функционала электронной плотности методом присоединенных плоских волн (APW+lo), реализованным в пакете WIEN2k с полулокальным приближением PBE-GGA [1] для обменно-корреляционного функционала (таб. 2).

Таблица 2. Расчеты электронных и магнитных свойств $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ ($x = 0.01$)

Атом	$ V_{zz} $ (10^{17} V/cm ²)	η	μ_{at} , μ_B	A_{is} (kOe)
Fe	4.87	0.07	2.01	181.5

Изотропное сверхтонкое магнитное поле (ИСТМП) A_{is} на ядрах ^{57}Fe в $\text{Ca}(\text{Co}_{0.99}\text{Fe}_{0.01})_2$ при 15 К $A_{is} = -231,5$ кОе и при 295 К $A_{is} = -197,9$ кОе. Оценены вклады в сверхтонкое магнитное поле на ядрах ^{57}Fe при 15 К. Локальный вклад $A_{is}^{loc} = P_{loc}(\text{Fe})\mu(\text{Fe})$ (константа поляризации $P_{loc}(\text{Fe}) = -90,5$ кОе/ μ_B) [4]), обусловленный поляризацией внутренних 1s, 2s и 3s электронов и коллективизированных 4s-электронов локальным магнитным моментом атома железа $\mu(\text{Fe})$, на ядре которого измеряется ИСТМП, оценивался из теоретического расчета и равен $A_{is}^{loc} = -181,5$ кОе [1]. Следовательно, локальный магнитный момент на примесном атоме железа равен $\mu(\text{Fe}) = 2,01 \mu_B$ в соединении Лавеса $\text{Ca}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ при $x = 0,01$ и $T = 15$ К. Наведенный вклад в ИСТМП A_{is}^{tran} , обусловленный поляризацией 4s-электронов магнитными моментами атомов кобальта (атомов матрицы) в соседних координационных сферах атомов железа, равен -50 кОе при $T = 15$ К

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (№ 22-22-00806) и Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание для университетов № ФГФЗ-2023-0005), а также программы развития экспериментальной приборной базы Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Список использованных источников:

1. Боков А.В., Магницкая М.В, Саламатин Д.А., Цвященко А.В. Исследование сверхтонких взаимодействий в синтезированных при высоком давлении соединениях $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ ($0 \leq x \leq 1$) методом мёссбауэровской спектроскопии // ЖЭТФ – 2023 – Т. 163. – № 3. – С. 350–356.
2. Matsnev M.E. and Rusakov V.S. SpectrRelax: an application for Mössbauer spectra modelling and fitting // AIP Conference Proceedings. – 2012. – V. 1489. – P. 178–185.
3. Русаков В.С., Покатилов В.С., Губайдулина Т.В., Мацнев М.Е. Сверхтонкие магнитные поля на ядрах ^{57}Fe в интерметаллической системе $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ // Физика металлов и металловедения. – 2019. – Т.120. – № 4. – С. 366–371.
4. Stearns M.B. Origin of the Hyperfine Fields in Pure Fe and at Solute Atoms in Fe // Physical review B. – 1971. – V. 4 – № 11. – P. 4081–4091.

УДК 537.622.4

Изменение параметров магнитных фазовых переходов первого рода при нестационарных внешних воздействиях на примере сплавов на основе FeRh**Комлев А.С.**

аспирант, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Перов Н.С.заведующий кафедрой магнетизма физического факультета, д.ф-м.н., профессор,
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

***Аннотация.** Материалы с магнитными фазовыми переходами перспективны с точки зрения их использования в различных современных устройствах. Каждый из вариантов их применения подразумевает циклическое воздействие на материал с целью изменения типа магнитного упорядочения. В обсуждаемой работе приведены теоретические и экспериментальные исследования поведения параметров фазового перехода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние при конечной скорости нагрева сплавов на основе FeRh. Полученные результаты способны позволить оптимизировать ряд параметров работы устройств на основе материалов с магнитным фазовым переходом первого рода с целью увеличения их энергоэффективности.*

***Ключевые слова:** FeRh сплавы, релаксация намагниченности, магнитный фазовый переход первого рода, магнитокалорические материалы*

Changes in the parameters of first-order magnetic phase transitions under non-stationary external influences on the example of FeRh-based alloys**Komlev A.S.**

PhD student, Lomonosov Moscow State University

Perov N.S.Head of the Department of Magnetism, Faculty of Physics, Doctor of Sciences, Professor,
Lomonosov Moscow State University

***Annotation.** Materials with magnetic phase transitions are promising from the point of view of their use in various modern devices. Each of the options for their use involves cyclic action on the material in order to change the type of magnetic ordering. The work discussed here presents theoretical and experimental studies of the behavior of the parameters of the phase transition from the antiferromagnetic to the ferromagnetic state at a finite heating rate of FeRh-based alloys. The results obtained can make it possible to optimize a number of operating parameters of devices based on materials with a first-order magnetic phase transition in order to increase their energy efficiency.*

***Keywords:** FeRh alloys, magnetization relaxation, first order magnetic phase transition, magnetocaloric materials*

Материалы, в которых наблюдаются магнитные фазовые переходы первого рода, являются интересными объектами для изучения в связи с возможными перспективами

практических применений. Их структурные, электронные, калорические и магнитные свойства в значительной мере изменяются около температуры фазового перехода, что позволяет использовать их в качестве рабочих элементов в устройствах магнитокалорического охлаждения [1], термомагнитных генераторах [2], различных типах датчиков и исполнительных механизмов [3].

Материалом для исследования был выбран сплав $\text{Fe}_{49}\text{Rh}_{51}$, так как он обладает гигантским магнитокалорическим эффектом в поле до двух тесла вблизи комнатной температуры, имеет простой элементный состав и не меняет симметрию при фазовом переходе. Данные критерии позволяют построить простую описательную модель магнитного фазового перехода первого рода. Выбранный сплав давно известен и его статические свойства хорошо описаны [4]. Кинетика фазового перехода данного рода наоборот вызывает интерес с точки зрения ее изучения.

В данной работе были получены и проанализированы температурные зависимости намагниченности сплава $\text{Fe}_{49}\text{Rh}_{51}$. Измерения проведены при различных скоростях нагрева образца на вибрационном магнитометре (LakeShore 7407).

Для описания экспериментальных данных была предложена феноменологическая модель. Поведение намагниченности рассчитывалось на основе теории Бина и Родбелла [5] и теории фазовых переходов Ландау-Лифшица [6]. В расчет были добавлены параметры, при помощи которых была учтена скорость нагрева образца. Для этого свободная энергия магнетика была представлена в следующем виде:

$$F = -MH + \frac{1}{2}\alpha(T - T_0 \left(1 - \beta \frac{v-v_0}{v_0}\right))M^2 + \frac{1}{4}BM^4 + \frac{1}{6}CM^6 - Pv \quad (1)$$

Где M – намагниченность, H – напряженность магнитного поля, T – температура, α – феноменологический параметр теории Ландау (константа), T_0 – температура фазового перехода недеформированной решетки, β – коэффициент пропорциональности между температурой фазового перехода и объемом кристаллической решетки, v – объем кристаллической решетки, v_0 – объем кристаллической решетки высокотемпературной фазы, P – давление, B, C – коэффициенты теории Ландау, мало зависящие от температуры (их температурной зависимостью можно пренебречь). Также учитывается тот факт, что $\frac{v-v_0}{v_0}$ является функцией, линейно зависящей от давления и квадратично от намагниченности. С целью учета конечной скорости нагрева образца было применено уравнение Ландау-Халатникова [7], которое способно описать нестационарный процесс изменения намагниченности:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\Gamma' \frac{\partial F}{\partial M} \quad (2)$$

Где Γ' – кинетический коэффициент. Дифференциальное уравнение (2) решалось при помощи метода Рунге-Кутты 4-го порядка, расчеты проводились в написанной на C++ программе.

Комлев А.С. благодарит фонд «БАЗИС» за стипендиальную поддержку. Перов Н.С. выражает благодарность Минобрнауки России за грант № 075-15-2021-1353.

Список использованной литературы:

1. Nikitin S.A. et al. The magnetocaloric effect in $\text{Fe}_{49}\text{Rh}_{51}$ compound // Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. 1990. Vol. 148, № 6–7. P. 363–366.
2. Waske A. et al. Energy harvesting near room temperature using a thermomagnetic generator with a pretzel-like magnetic flux topology // Nat Energy. 2019. Vol. 4, № 1. P. 68–74.
3. Vasil'ev A.N. et al. Structural and magnetic phase transitions in shape-memory alloys Ni_2MnGa // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1999. Vol. 59, № 2. P. 1113–1120.

4. Lewis L.H., Marrows C.H., Langridge S. Coupled magnetic, structural, and electronic phase transitions in FeRh // J. Phys. D: Appl. Phys. 2016. Vol. 49, № 32. P. 323002.
5. Rodbell D.S., Bean C.P. Some Magnetic First-Order Transitions // Journal of Applied Physics. American Institute of Physics, 1962. Vol. 33, № 3. P. 1037–1041.
6. Мушников Н.В. Магнетизм и магнитные фазовые переходы: учебное пособие. Издательство Уральского университета, 2017.
7. Costa R. et al. Landau theory-based relaxational modelling of first-order magnetic transition dynamics in magnetocaloric materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2023.

УДК 538.913

Динамика намагниченности в точке Кюри в никель-цинковом феррите

Коледов В.В.

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Семёнов Д.С.

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Карпухин Д.А.

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Морозов Е.В.

к.ф.-м.н., младший научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Шавров В.Г.

профессор, главный научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Гамзатов А.Г.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

Алиев А.М.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

***Аннотация:** В работе изучается фазовый переход (ФП) в точке Кюри методом Ландау в никель-цинковом феррите 2000 НН, используя уравнение Ландау-Халатникова. Для описания процессов при ФП были рассчитаны коэффициенты в разложении свободной энергии и в уравнении состояния для никель-цинкового феррита 2000 НН. Авторами разработан метод оценки константы γ в уравнении Ландау-Халатникова, показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода и опробован на примере ферритовых колец 2000 НН.*

***Ключевые слова:** Уравнение Ландау-Халатникова, свободная энергия, точка Кюри, уравнение состояния, кинетика*

Dynamics of magnetization at the Curie point in nickel-zinc ferrite

Koledov V.V.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Semenov D. S.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Karpukhin D. A.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Morozov E. V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher, Kotelnikov IRE RAS

Shavrov V.G.

Professor, Chief Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Gamzatov A. G.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Aliyev A.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Abstract: *In this work, the phase transition (PT) at the Curie point is studied by the Landau method in nickel-zinc ferrite 2000 HH using the Landau-Khalatnikov equation. To describe the processes during PT, the coefficients in the expansion of free energy and in the equation of state for nickel-zinc ferrite 2000 HH were calculated. The authors developed a method for estimating the constant γ in the Landau-Khalatnikov equation, showing the minimum limit for the maximum phase transition rate and tested it on the example of 2000 HH ferrite rings.*

Keywords: *Landau-Khalatnikov equation, free energy, Curie point, equation of state, kinetics*

На сегодняшний день большое количество работ посвящено изучению физических эффектов при фазовых переходах (ФП) в твердотельных материалах [1-10]. Среди огромного разнообразия твердотельных материалов с ФП можно выделить магнетики, в которых, магнитные ФП часто сочетаются и взаимодействуют со структурными ФП [1-7]. Изучение материалов в неустойчивом состоянии, вблизи ФП затруднено отсутствием стандартных методов изучения термодинамических параметров вещества *in situ*, то есть в динамике, непосредственно в процессе ФП. Анализ современной литературы показывает, что кинетика процессов при ФП исследованы слабо [7,8]. Разработка новых методов изучения кинетики ФП открывает возможности для прикладного использования новых функциональных материалов с ФП в технологии сенсоров и актюаторов, приборостроении, при создании твердотельных холодильников и тепловых насосов для альтернативной энергетики и др. [9,10].

Цель работы заключается в создании методики экспериментального изучения и разработке теоретической модели для описания кинетики изменения магнитных и термодинамических параметров твердотельных магнитных материалов с ФП второго рода на основе разложения свободной энергии Ландау по параметрам порядка и уравнения Ландау-Халатникова в быстро изменяющихся внешних полях на примере никель цинкового феррита 2000 HH.

В работе использовались образцы из никель-цинкового феррита марки 2000 HH - (NiZn)Fe шпинели. Выбор материала обусловлен тем, что этот диэлектрический материал позволяет изучать динамику намагниченности с частотами до 107 Гц и, кроме того, имеет температуру фазового перехода второго рода в удобном диапазоне – около 90 С. В эксперименте использованы кольца из этого материала диаметром от 6 до 30 мм и стержни диаметром 8 мм.

Описание кинетических эффектов при анализе временной зависимости $M(t)$ сводится к построению адекватной модели поведения параметров материала вблизи неустойчивости, вызванной ФП.

Для изучения термодинамических свойств образцов при ФП первого и второго рода авторы использовали разложение функции свободной энергии Гельмгольца методом Ландау до четвертого порядка по намагниченности:

$$F = \frac{1}{2}\alpha M^2 + \frac{1}{4}\beta M^4 + \frac{1}{2}NM^2 - MH \quad (1)$$

Где α_0 , α и β – магнитные модули ($\alpha = \alpha_0(T - T_c)$), N – фактор размагничивания, M – намагниченность образца, H – внешнее поле, T – текущая температура, T_c – температура точки фазового перехода.

Для получения термического уравнения состояния воспользуемся условием:

$$\frac{dF}{dM} = 0 \quad (2)$$

Подставив свободную энергию (1) в (2), получим:

$$\alpha_0(T - T_c)M + \beta M^3 + NM = H \quad (3)$$

Термин «кинетика» в физике означает скорость изменения какого-либо параметра со временем. Для ее изучения недостаточно термодинамических потенциалов, поскольку они описывают только статические или квазистатические случаи, в их написании отсутствует время. Для изучения кинетики процессов при ФП было взято уравнение Ландау-Халатникова [11]:

$$\frac{d\eta}{dt} = -\gamma \frac{dF}{d\eta} \quad (4)$$

Где $\frac{d\eta}{dt}$ — изменение параметра порядка со временем, $\frac{dF}{d\eta}$ — производная свободной энергии по параметру порядка (уравнение состояния), γ — положительный коэффициент, характеризующий материал. Из уравнения (9) понятно, что $[\gamma] = \text{с}^{-1}$. Это означает, что γ показывает скорость протекания процессов при изменении параметра порядка. То есть в этом приближении, изучении кинетики процессов сводится к нахождению γ .

Для проверки теоретических расчетов для нахождения точки Кюри в ферритовых кольцах 2000 НН были проведены измерения магнитной восприимчивости в температурном диапазоне от 20 до 120 °С в частотном диапазоне от 20 Гц до 20 МГц. Для изучения кинетики ФП в образцах феррита 2000 НН в точке Кюри возьмем намагниченность M за параметр порядка.

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma(\beta M^3 - H(t)) \quad (5)$$

Сопоставление экспериментальных данных и теоретических оценок позволяет сделать оценку величины γ .

Таким образом, в настоящей работе сообщается о следующих результатах:

- 1) Рассчитаны коэффициенты в разложении свободной энергии по M и в уравнении состояния для никель-цинкового феррита 2000 НН.
- 2) Разработан метод оценки константы γ в уравнении Ландау-Халатникова, показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода и опробован на примере ферритовых колец 2000 НН.
- 3) Сделан вывод о том, что дальнейшая работа по усовершенствованию методики и развитию теории должна быть направлена на более качественную проверку подхода на основе

уравнения Ландау-Халатникова для изучения динамики намагниченности вблизи точки Кюри в различных материалах в широком диапазоне полей и температур.

Настоящая работа выполнена в рамках государственного задания ИРЭ им. Котельникова РАН.

Список использованных источников

1. De Oliveira N. A., von Ranke P. J. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect //Physics Reports. – 2010. – Т. 489. – №. 4-5. – С. 89-159.
2. Tishin A. M., Spichkin Y. I. Recent progress in magnetocaloric effect: Mechanisms and potential applications //international journal of refrigeration. – 2014. – Т. 37. – С. 223-229.
3. Tishin A. M. et al. A review and new perspectives for the magnetocaloric effect: New materials and local heating and cooling inside the human body //International Journal of Refrigeration. – 2016. – Т. 68. – С. 177-186.
4. Liu J. et al. Giant magnetocaloric effect driven by structural transitions //Nature materials. – 2012. – Т. 11. – №. 7. – С. 620-626.
5. Ram N. R. et al. Review on magnetocaloric effect and materials //Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2018. – Т. 31. – С. 1971-1979.
6. Pankratov N. Y., Tereshina I. S., Nikitin S. A. Magnetocaloric Effect in Rare-Earth Magnets //Physics of Metals and Metallography. – 2023. – Т. 124. – №. 11. – С. 1139-1146.
7. Puri S. Kinetics of phase transitions //Phase Transitions. – 2004. – Т. 77. – №. 5-7. – С. 407-431.
8. Basso V. et al. Hysteresis and phase transition kinetics in magnetocaloric materials //Physica status solidi (b). – 2018. – Т. 255. – №. 2. – С. 1700278.
9. Franco V. et al. Magnetocaloric effect: From materials research to refrigeration devices //Progress in Materials Science. – 2018. – Т. 93. – С. 112-232.
10. Reis M. S. Magnetocaloric and barocaloric effects of metal complexes for solid state cooling: Review, trends and perspectives //Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 417. – С. 213357
11. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика – М. Физматлит, 2002. – 527 с.

УДК 537.622; 544.015.4; 548.5

Визуализация магнитных фазовых расслоений и структурных доменов в монокристаллах и керамиках манганита лантана

Евстигнеев Р.С.

младший научный сотрудник, Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна

Успенская Л.С.

д.ф.-м.н., профессор, вед. научный сотрудник, Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна

***Аннотация.** Локальные магнитные свойства фазово-расслоенных манганитов лантана изучены с помощью магнито-оптической визуализации магнитного потока в широком диапазоне температур. Результаты наблюдений сопоставляются с результатами магнитометрии и транспортных наблюдений.*

***Ключевые слова:** легированные манганиты, фазовые расслоения, магнитные фазовые переходы, магнитооптическая визуализация*

Visualization of magnetic phases and structural domains in single crystals and ceramics of lanthanum manganite

Evstigneev R.S.

Junior research assistant, Osipyan Institute of Solid State Physics RAS

Uspenskaya L.S.

Dr.Sc., professor, leading researcher, Osipyan Institute of Solid State Physics RAS

***Annotation.** The local magnetic properties of phase-separated lanthanum manganites have been studied using magneto-optical visualization of the magnetic flux in a wide temperature range. The results of the observations are compared with the results of magnetometry and transport measurements.*

***Keywords:** doped manganites, phase separations, magnetic phase transitions, magneto-optical imaging*

Манганиты лантана широко исследуются в связи с эффектом колоссального магнитосопротивления, наблюдаемым в том числе в относительно слабых магнитных полях [1, 2]. Наиболее ярко этот эффект проявляется в фазоворасслоенных легированных манганитах, где наряду с электронным и примесным расслоениями, обусловленными выбранным легированием, эффективными оказываются локальные механические напряжения [3]. Фазовое расслоение в таких материалах может быть не только на ферромагнитную (антиферромагнитную) и парамагнитную фазы, что рассматривается в теории для объяснения эффекта колоссального магнитосопротивления [4], но и на несколько сосуществующих магнитных фаз, причем такое расслоение может быть и на нано- и на микромасштабах [5]. Экспериментально фазовые расслоения могут исследоваться многими методами: магнитно-

силовой микроскопией, туннельной микроскопией, сканированием поверхности СКВИДом или датчиком Холла и т.д. Но сканирующие методы видят только мельчайшие расслоения и требуют тщательно отполированной поверхности. Более того, кантиливер может перемагничивать исследуемый объект, особенно в области критической температуры. Сканирующие методы сложно применять в широкой области температур.

В данной работе исследования проводились с помощью метода магнитооптической визуализации с помощью индикаторных пленок иттрий-железистого граната, накладываемых непосредственно на исследуемую поверхность, как это делалось в работе [6]. Пространственное разрешение этого метода – оптическое. Исследования возможно проводить в широком температурном диапазоне, в данном случае от 8 до 400 К. Чувствительность к полям рассеяния ~ 1 Э. Поэтому возможно наблюдение магнитной доменной структуры даже в образцах со слабой спонтанной намагниченностью, наблюдение протекания тока по образцу и его взаимодействия с доменной структурой. А при приложении достаточно слабого магнитного поля в исследуемой плоскости образца вариацию магнитной проницаемости удастся визуализировать по модуляции перпендикулярной компоненты индукции. Анализ отклика на приложение поля, его поворот в плоскости и на изменение температуры позволяет судить о природе выявленного контраста, рис.1.

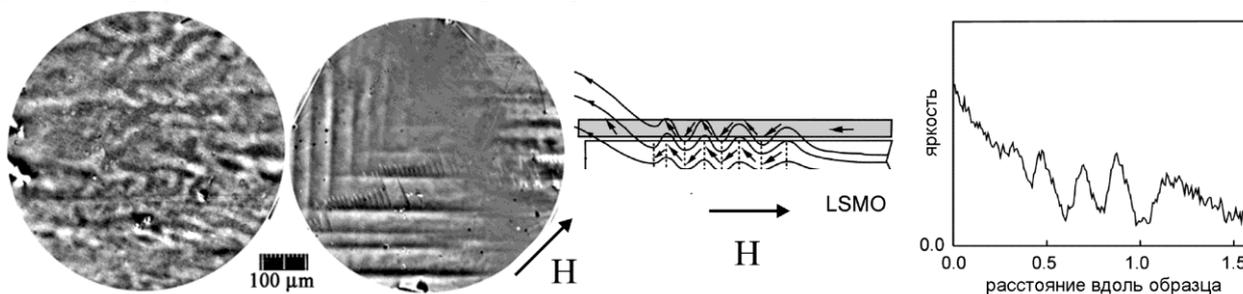


Рис. 1. Спонтанная магнитная доменная структура $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ и структура по двойникам, выявленная в насыщающем магнитном поле (направление указано стрелкой) при $T = 45$ К, а также схема, поясняющая визуализацию доменной структуры и профиль вариации намагниченности поперек двойников.

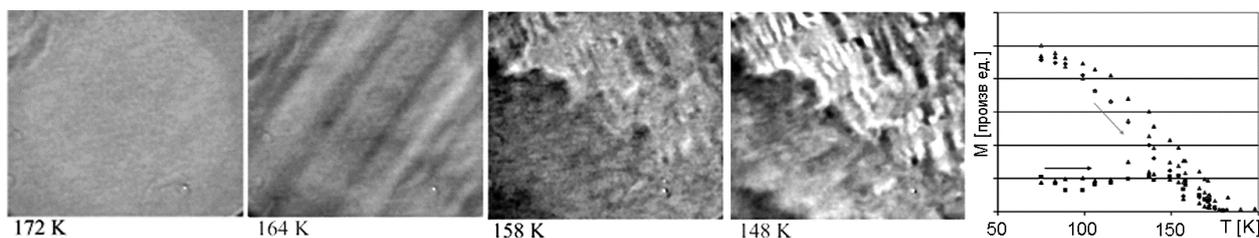


Рис. 2. Формирование ферромагнитного состояния и магнитной доменной в кристалле $La_{0.75}Sr_{0.25}MnO_3$, при понижении температуры от 300 К: сначала в диапазоне $T \sim 170-165$ К формируется суперпарамагнитное состояние с модуляцией намагниченности по полосам роста, затем при $T \sim 160$ К доменная структура, неоднородная в поперечном направлении: в виде мелких бесформенных доменов по краям кристалла и с жесткой доменной структурой лабиринтного типа ближе к центру. Справа – изменение локальной намагниченности того же кристалла, определенное по изменению яркости изображения в насыщающем магнитном поле вблизи края кристалла и в центральной области с понижением температуры.

На рис.2 показан пример визуализации фазового расслоения в кристалле $La_{0.75}Sr_{0.25}MnO_3$, выращенном методом зонной плавки и отожженном пропусканием мощного

тока. Видно, что неоднородности магнитной фазы связаны с особенностями процесса формирования кристалла. Четко выделяются два направления: вдоль направления роста и поперек него. Выявленные особенности трансформации магнитной доменной структуры с температурой, рис.2, показывают отличие магнитных фаз в различных участках кристалла и позволяют объяснить немонотонную температурную зависимость сопротивления.

На рис.3 показано проявление фазового расслоения в легированных манганитах, изготовленных методом горячего прессования. Наблюдения показали, что масштаб магнитных неоднородностей уменьшается с понижением температуры от 300 до 180 К, а затем остается неизменным. Важно отметить, что при низких температурах в пределах оптического разрешения на любом масштабе выявляются магнитные неоднородности.

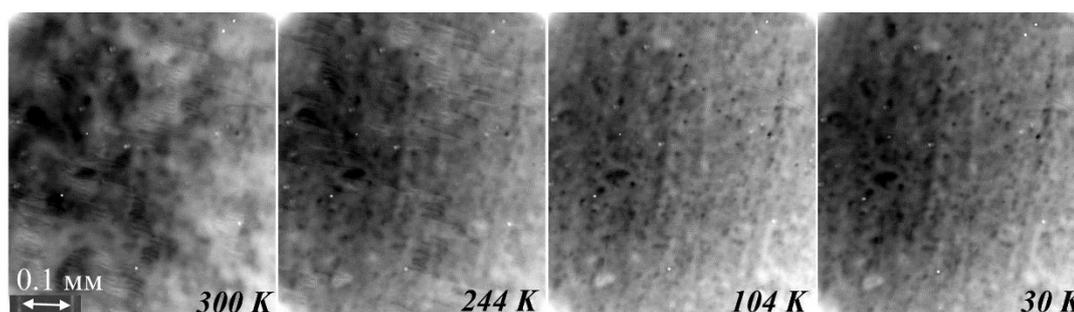


Рис. 3. Трансформация магнитных неоднородностей в кристалле $La_{0.65}Sr_{0.35}Mn_{0.8}Cr_{0.2}O_3$ при понижении температуры от 400 К.

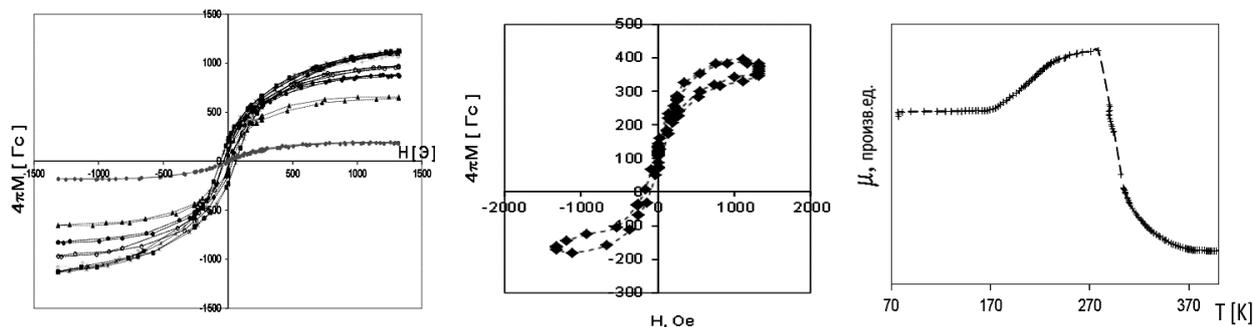


Рис. 4. Петли гистерезиса, измеренные на $La_{0.65}Sr_{0.35}Mn_{0.8}Cr_{0.2}O_3$ при $T = 300, 256, 206, 194, 148, 101$ и 77 К, петля при 300 К, показывающая наличие эффектов магнитного последействия и зависимость магнитной проницаемости от температуры.

При этом при высоких температурах, пока характерный масштаб неоднородностей еще зависит от температуры, по петлям гистерезиса четко виден эффект магнитного последействия (форма петель зависит от скорости развертки поля, но насыщение намагничивания наблюдается). При низких температурах кристалл становится магнито жестким, а его насыщение не достигается даже в полях выше 1500 Э, рис.4, что вполне согласуется с наблюдением мелкомасштабного расслоения магнитных фаз. На температурной зависимости магнитной проницаемости, снятой в поле ~ 1 Э, при охлаждении от 470 К, также прослеживается соответствие выявленным магнитооптикой особенностям микромагнитной структуры: после перехода в ферромагнитное состояние магнитная проницаемость уменьшается до тех пор, пока структура не стабилизируется.

Очень эффективным оказалось использование локальной магнитометрии по яркости

изображений. Один пример приведен на рис.2, где выявлен разный тип зависимости $M(T)$ в центре монокристалла, выращенного методом зонной плавки, и на периферии, что свидетельствует о преобладании в этих областях различных магнитных фаз, несмотря на то, что микроанализ показывает одинаковый состав. Другой пример, это различие магнитных свойств на поверхности и в объеме горячепрессованных манганитов, которое удалось выявить по различной релаксации остаточной намагниченности поликристалла при изменении температуры, и дало возможность понять особенности на температурных зависимостях магнитной проницаемости и сопротивления кристаллов.

Магнитооптическая визуализация проводилась на манганитах лантана с различным легированием, выращенных в МИСИС (Муковский Я.М., Шулятев Д.А., Арсенов А.) и в АГУ (Карпасюк В.К., Выборнов Н.А., Мусаева З.Р., Баделин А.Г.). Во всех случаях магнитооптика оказалась эффективным инструментом, позволившим выяснить наличие фазовых расслоений, в том числе с близкими температурами перехода, удалось выяснить влияние магнитных микронеоднородностей на магнитные и транспортные свойства материалов.

Магнитооптическая визуализация и магнитные измерения выполнены в ИФТТ РАН в рамках госзадания.

Список использованных источников:

1. Нагаев Е.Л. Манганиты лантана и другие магнитные проводники с гигантским магнитосопротивлением // УФН. – 1996. – Т. 166. – № 8. – С. 833-858..
2. Локтев В.М., Погорелов Ю.Г. Особенности физических свойств и колоссальное магнитосопротивление манганитов // ФНТ. – 2000. – Т. 26. – № 3. – С. 231-261.
3. Tulina N.A., Uspenskaya L.S., Sirotkin V.V., Mukovskii Y. M., Shulyatev D.A. Intrinsic inhomogeneities and effects of resistive switching in doped manganites // Physica C. – 2006. – Т. 444. – № 1-2. – С. 19-22.
4. Salamon M.B., Jaime M. The physics of manganites: Structure and transport // Rev. Mod. Phys. – 2001. – Т. 73. – № 3. – С. 583-628.
5. Мусаева З.Р., Выборнов Н.А., Булатов Н.А., Карпасюк В.К., Успенская Л.С., Язенков С.Х. Структурная самоорганизация, доменная структура и магнитные характеристики манганитов системы La-Sr-Mn-Ti-Ni-O // Поверхность: Рентген., синхротрон. нейтрон. исследов. – 2007. – № 7. – С. 66-71.
6. Kharikov A., Uspenskaya L., Bdikin I., Mukovskii Ya., Karabashev S., Shulyaev D., Arsenov A. Magnetic Domains and Twin Structure of the La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ single crystal // Appl. Phys. Lett. – 2000 – Т. 77. – № 15. – С. 2376-2378.

УДК 537.638

Влияние быстрой закалки на зонную структуру и магнитные свойства интерметаллидов ErCo_2 **Макарьин Р.А.**

аспирант кафедры магнетизма физического факультета МГУ

Карпенков Д.Ю.

к.ф.-м. н., старший научный сотрудник кафедры магнетизма физического факультета МГУ

Карпенков А.Ю.

к.ф.-м. н., доцент кафедры физики конденсированного состояния ТвГУ

Квашнин А.Г.

д.ф.-м. н., профессор Сколковского института Наук и Технологий

Железный М.В.

ассистент, Национальный университет наук и технологий «МИСИС»

***Аннотация.** Бинарные интерметаллиды на основе редкоземельных элементов, такие как ErCo_2 , являются отличными кандидатами для магнитных хладагентов, применяемых в генераторах жидкого водорода и природного газа. В данных соединениях наблюдается гигантский магнитокалорический эффект, обусловленный магнитным фазовым переходом первого рода. Однако для практического применения данные соединения должны быть адаптированы для производства на их основе теплообменников. В данной работе было показано, что быстрая закалка изменяет род фазового перехода, а также смещает температуру Кюри в область более высоких температур. При этом мы объясняем изменение магнитного поведения влиянием закалочных вакансий на зонную структуру. В частности, показано, что беспорядок в подрешетке кобальта может привести к увеличению плотности состояний на уровне Ферми за счет большей локализации $3d$ состояний.*

***Ключевые слова:** зонная структура, соединений RCo_2 , метамагнитный фазовый переход, быстрая закалка, закалочные вакансии, магнитокалорический эффект.*

The influence of rapid quenching on the band structure and magnetic properties of ErCo_2 intermetallics**Makaryin R.A.**

Postgraduate student of the Department of Magnetism, Faculty of Physics, Moscow State University

Karpenkov D.Yu.

Ph.D., Senior Researcher of the Department of Magnetism, Faculty of Physics, MSU

Karpenkov A.Yu.

Ph.D, Associate Professor of the Condensed State Physics Department, TvSU

Kvashnin A.G.

Prof., Professor of Skolkovo Institute of Science and Technology.

Zhelezny M.V.

Assistant, National University of Science and Technology "MISIS".

Annotation. *Binary intermetallides based on rare earth elements, such as ErCo_2 , are excellent candidates for magnetic refrigerants used in liquid hydrogen and natural gas generators. These compounds exhibit a giant magnetocaloric effect due to a magnetic phase transition of the first kind. However, for practical applications, these compounds must be adapted to produce heat exchangers based on them. In this work, we have shown that rapid quenching changes the genus of the phase transition and also shifts the Curie temperature to higher temperatures. In doing so, we explain the change in magnetic behavior by the influence of quenching vacancies on the zone structure. In particular, we show that disorder in the cobalt sublattice can lead to an increase in the density of states at the Fermi level due to a greater localization of 3d states*

Keywords: *density of states, RCo_2 compounds, metamagnetic phase transition, rapid quenching, quenching vacancies, magnetocaloric effect.*

Магнитные свойства интерметаллидов привлекают внимание исследователей широким спектром практических применений, включая изготовление магнитотвердых и магнитомягких сплавов, магнитное охлаждение и хранение данных и т.д. Кубические интерметаллиды RCo_2 интересны как с фундаментальной, так и с практической точки зрения, ввиду наличия двух взаимодействующих магнитных подсистем: локализованных магнитных моментов редкоземельных элементов (R) и коллективизированных 3d-электронов Co. Среди этих материалов стоит выделить бинарные сплавы, такие как HoCo_2 , DyCo_2 и ErCo_2 , которые демонстрируют магнитный фазовый переход первого рода (ферримагнетик – парамагнетик).

Эти материалы отличаются высокими значениями как адиабатического изменения температуры, так и изотермического изменения энтропии в области низких температур, что делает их потенциально привлекательными для использования в качестве хладагентов в ожижителях жидких газов на основе технологии магнитного охлаждения [1,2].

В работах [3,4] было показано, что пластинчатая или трубчатая геометрии теплообменников обеспечивают как эффективный теплообмен между хладагентом и теплопередающей средой, так и максимальную хладопроизводительность магнитных рефрижераторов при рабочих частотах свыше 3 Гц. При этом, наиболее оптимальным методом производства подобных теплообменников является технология быстрой закалки.

В работах [5, 6] было показано изменение магнитных свойств соединения ErCo_2 при быстрой закалке и атомизации. Более того, было показано, что свойства восстанавливаются путем отжига. Авторы работ связывают данное изменение магнитного поведения с вариациями параметра решетки, которые могут быть обусловлены в том числе и вариациями фазового состава. Вместе с тем, магнитные свойства данного семейства соединений в первую очередь связаны с их зонной структурой, поэтому цель настоящего исследования заключается в исследовании влияния изменений зонной структуры при быстрой закалке на магнитные свойства данных соединений.

На рис. 1 представлена температурная зависимость изотермического изменения магнитной энтропии литых и быстрозакаленных образцов ErCo_2 . Видно, что быстрая закалка приводит не только к резкому уменьшению величины изменения магнитной энтропии, а также

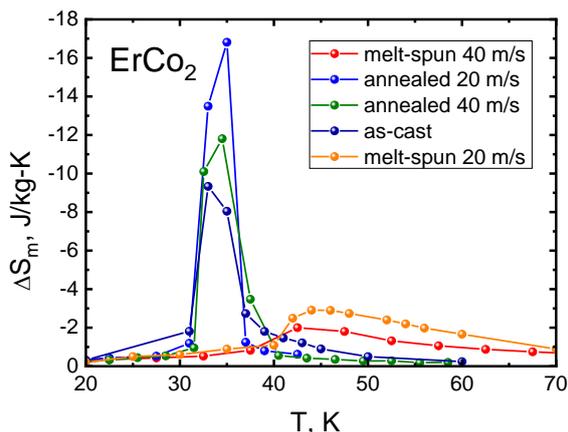


Рис. 1. Температурная зависимость изменения магнитной энтропии для литого, закаленных при разных скоростях и отожженных образцов сплава $ErCo_2$.

связанных с увеличением количества линейных дефектов.

Единственным механизмом, влияющим на увеличение T_c при закалке, остается сужение 3d пика плотности электронных состояний на уровне Ферми. Причиной этого является локализация 3d электронных состояний Co, вызванной беспорядком в подрешетке Co (наличием вакансий в нашем случае) [7].

к увеличению температуры Кюри (T_c). Более того, путем анализа кривых Белова-Аррота, представленных на рис. 2, видно, что уменьшение магнитотепловых свойств связано с изменением рода фазового перехода от первого ко второму. Отдельно стоит отметить, что проведенные исследования рентгенофазового состава показали, что значения параметров решетки для литых и быстрозакаленных образцов одинаковы. Поэтому увеличение температуры Кюри не может быть объяснено изменением объема элементарной ячейки. При этом увеличивается величина внутренних микродеформаций при закалке,

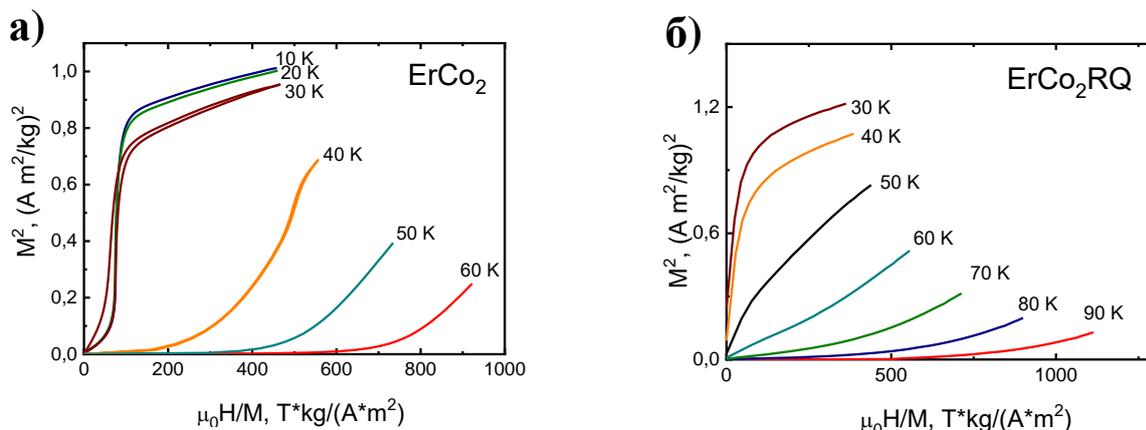


Рис. 2. Графики Белова-Аррота для (а) литого и (б) быстрозакаленного образца $ErCo_2$.

Для проверки этого утверждения были построены плотности электронных состояний для $ErCo_2$ и $ErCo_{1,937}$ (структура с вакансией одного атома Co), представленные на рис. 3. Производился расчет суперячейки $2 \times 2 \times 2$ структуры $Fd\bar{3}m$ с 48 атомами. Для создания дефектов (вакансии) один атом кобальта удалялся из верхнего слоя кобальтовой подрешетки. Из результатов DFT моделирования видно, что введение вакансии в кристаллическую структуру $ErCo_2$ приводит к заселению d-орбиталей при энергиях превышающих энергию Ферми. В работах [7, 8] было показано, что схожий процесс происходит при замещении атомов Co на атомы Al, что также приводит к сдвигу уровня Ферми в сторону меньших энергий. Авторы предположили, что возрастание плотности состояний на уровне Ферми $N(\epsilon_F)$ приводит к большим значениям величины произведения обменного интеграла на плотность электронных состояний $IN(\epsilon_F)$ (критерий Стонера), что приводит к намагничиванию кобальтовой подрешетки кобальта в более слабых полях, а следовательно, к увеличению температуры Кюри.

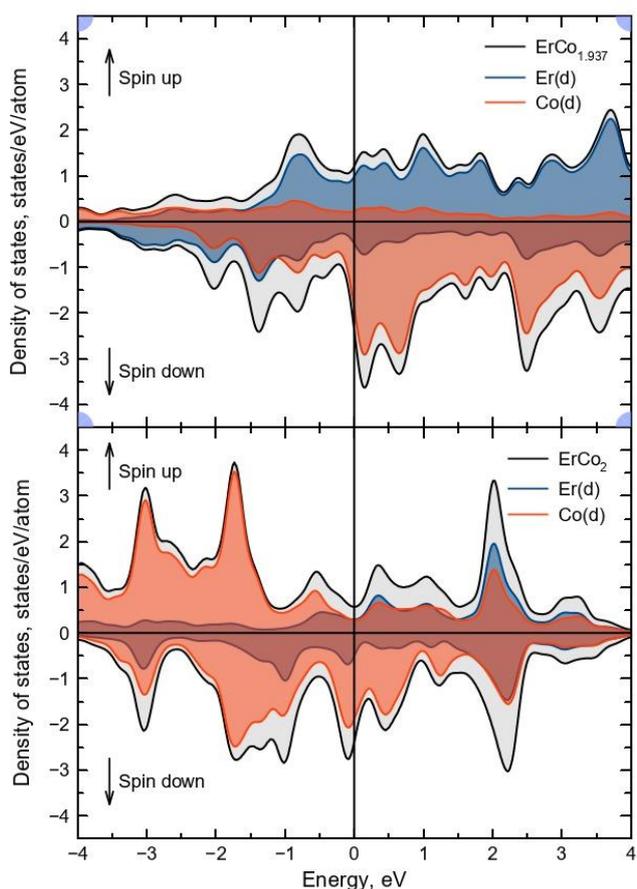


Рис. 3. Результаты DFT расчета плотности электронных состояний для систем $ErCo_2$ и $ErCo_{1,937}$.

Анализ полученных диаграмм плотности состояний показывает, что при введении вакансий величина плотности состояний на уровне Ферми возрастает.

Стоит отметить, что так же, как и в работе [6] отжиг при температуре 800 °C в течение 15 минут способен восстановить магнитотепловые свойства быстрозакаленных образцов и снизить температуру фазового перехода до значений, характерных для литого состояния.

Суммируя все выше сказанное, можно утверждать, что ключевым параметром, влияющим на изменение магнитного поведения соединения $ErCo_2$, подвергнутого быстрой закалке, является изменение зонной структуры данных соединений при введении закалочных вакансий.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-72-10147. Макарьин Р.А. благодарит фонд стипендиальной поддержки Базис.

Список использованной литературы:

1. Zhu Y. et al. Magnetocaloric effect of $(Er_xR_{1-x})Co_2$ ($R = Ho, Dy$) for magnetic refrigeration between 20 and 80 K // *Cryogenics*. 2011. Vol. 51, № 9. P. 494–498.
2. Tang X. et al. Magnetic refrigeration material operating at a full temperature range required for hydrogen liquefaction // *Nat Commun*, 2022. Vol. 13, № 1. P. 1817.
3. Karpenkov D.Y. et al. Adiabatic temperature change of micro- and nanocrystalline Y_2Fe_{17} heat-exchangers for magnetic cooling // *Journal of Alloys and Compounds*. 2016. Vol. 668. P. 40–45.
4. Karpenkov D.Yu. et al. Adjusting of the performance characteristics of the $La(Fe,Si)_{13}$ compounds and their hydrides for multi-stimuli cooling cycle application // *Journal of Alloys and Compounds*. 2023. Vol. 962. P. 171154.
5. Das S.D. et al. Magnetic behavior of nanocrystalline $ErCo_2$ // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. Vol. 21, № 29. P. 296004.
6. Yamamoto T. D. et al. Tunable magnetic and magnetocaloric properties by thermal annealing in $ErCo_2$ atomized particles // *Journal of Alloys and Compounds*. 2023. Vol. 935. P. 168040.
7. Burkov A.T. et al. Effect of static and dynamic disorder on electronic transport in RCo_2 compounds: $Ho(Al_xCo_{1-x})_2$ alloys // *Phys. Rev. B. American Physical Society*, 2008. Vol. 78, № 3. P. 035101.
8. Александрян В.В. et al. Гигантское возрастание температуры Кюри редкоземельных интерметаллических соединений RCo_2 при малых замещениях магнитного кобальта немагнитным алюминием // *Письма в ЖЭТФ*. 1984. Vol. 40, № 2. P. 77.

УДК 538.913

**Экспериментальный подход изучения кинетики намагничивания
вблизи фазовых переходов в гадолинии и сплаве $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$** **Семёнов Д. С.**

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Карпухин Д.А.

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Морозов Е.В.

к.ф.-м.н., младший научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Коледов В.В.

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Шавров В.Г.

профессор, главный научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Гамзатов А.Г.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

Алиев А.М.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

Аннотация: В работе методом Ландау-Халатникова исследуется фазовый переход (ФП) в точке Кюри в чистом гадолинии и в сплаве Гейслера $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ с магнитоструктурным ФП. Авторами разработан экспериментально-теоретический подход, включающий в себя расчет коэффициентов для записи функции свободной энергии Гельмгольца, с последующим вычислением точки Кюри для металлов и сплавов с разными геометрическими размерами, приводя в результате общую формулу с точностью до 0.1 К согласующуюся с экспериментом и результатом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Величина точки Кюри для сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ составила 291,15 К. Так же был разработан метод нахождения константы уравнения Ландау-Халатникова γ , показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода в чистом гадолинии составил $\gamma < 3 \cdot 10^3 \frac{1}{c}$.

Ключевые слова: Магнитоструктурный фазовый переход, точка Кюри, уравнение состояния, кинетика

**An experimental approach to studying the kinetics of magnetization near phase transitions in
gadolinium and $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ alloy**

Semenov D. S.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Karpukhin D. A.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Morozov E. V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Koledov V.V.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Shavrov V.G.

Professor, Chief Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Gamzatov A.G.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Aliyev A.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Abstract: *The Landau-Khalatnikov method investigates the phase transition (FT) at the Curie point in pure gadolinium and in the Geisler alloy $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ with a magnetostructural FT. The authors have developed an experimental and theoretical approach that includes the calculation of coefficients for recording the Helmholtz free energy function, followed by the calculation of the Curie point for metals and alloys with different geometric dimensions, resulting in a general formula with an accuracy of 0.1 K consistent with the experiment and the result of differential scanning calorimetry (DSC). The Curie point value for $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ alloy was 291.15 K. A method was also developed for finding the constant of the Landau-Khalatnikov equation γ , showing the minimum limit for the maximum rate of phase transition in pure gadolinium was $\gamma < 3 \cdot 10^3 \frac{1}{c}$.*

Keywords: *Magnetostructural phase transition, Curie point, equation of state, kinetics*

На сегодняшний день большое количество работ посвящено изучению фазовых переходов (ФП) в твердотельных материалах [1-7]. В магнетиках с ФП часто сочетаются и взаимодействуют ФП структурных и магнитных подрешеток [1-3]. Стандартные методы изучения термодинамических параметров вещества не подходят для изучения вблизи и в точке ФП, что является причиной отсутствия целостного объяснения, как физики, так и механизма процессов, происходящих при ФП [4,5]. Новые методы изучения кинетики ФП открывают возможности для прикладного использования функциональных материалов с ФП в технологии сенсоров и актюаторов, при создании твердотельных холодильников и тепловых насосов для альтернативной энергетики и многих других отраслях [6,7].

Цель работы заключается в создании методики экспериментального изучения и разработке теоретической модели для описания уравнения состояния и кинетики изменения магнитных и термодинамических параметров твердотельных магнитных материалов с ФП первого и второго рода на основе разложения свободной энергии Ландау по параметрам порядка и уравнения Ландау-Халатникова в быстро изменяющихся внешних полях на примере гадолиния и сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$.

В работе авторами использовались образцы из чистого гадолиния в форме брусков длиной 13 мм, шириной 2 мм и толщиной 2 мм с точкой Кюри $T_C = 291$ К, и поликристаллического сплав с эффектом памяти формы (ЭПФ) $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ длиной 16 мм, шириной 2 мм и толщиной 2 мм [12] (рис.1а.). на рисунке 1б представлены результаты исследования этого сплава методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), показывающие характерные точки фазовых превращений: точка Кюри $T_C = 291$ К, а также температуры начала и конца соответственно прямого и обратного метамагнитоструктурного перехода $M_s = 261$ К, $M_f = 250$ К, $A_s = 258$ К, $A_f = 268$ К.

Экспериментальная установка (см. рис. 2) включает блок питания (1) (не указан на фото), который обеспечивает подачу напряжения от 0 до 300 В на катушку, создающую магнитное поле, образец магнитного материала (2) в виде бруска (рис. 1) и помещенный на его торце быстродействующий датчик Холла для измерения магнитного момента и термопару для измерения его температуры.

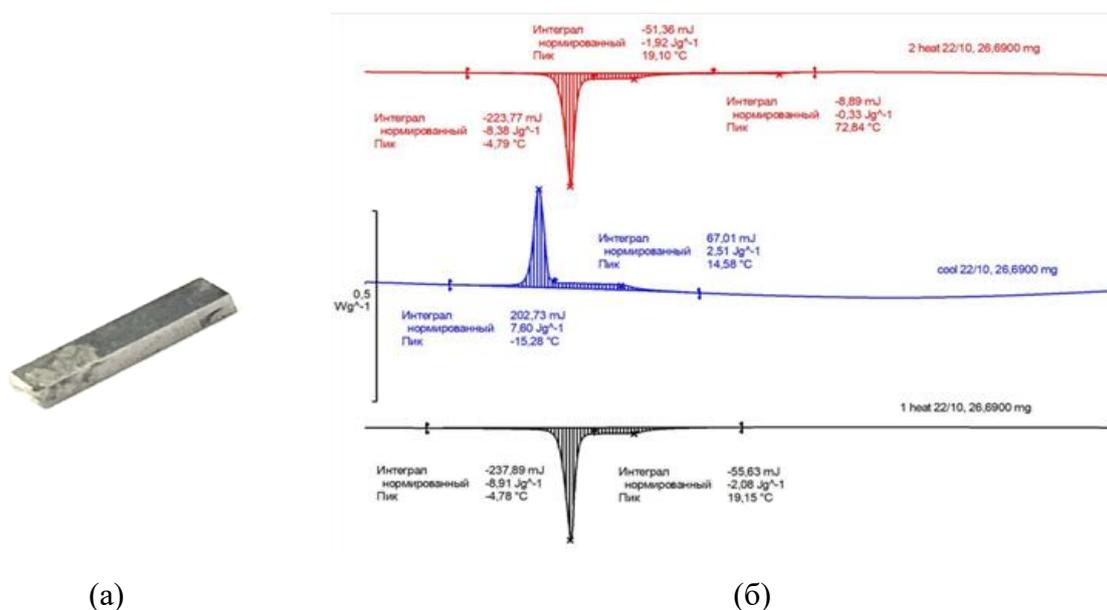


Рис.1. (а) Внешний вид образца поликристаллического сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$. (б) Результаты дифференциальной сканирующей калориметрии этого сплава (ДСК)

Для поддержания температуры используется блок термостатирования. Для усиления сигнала от датчика Холла используется операционный малошумящий, быстродействующий усилитель (3). С помощью блока управления (4) происходит генерация прямоугольного импульса магнитного поля с напряжённостью до 1 Тл переменной длительности от 1 сек до 10 мкс. Для снятия и обработки сигнала применяется плата ЦАП/АЦП L-Card (5). Окончательный анализ, обработка и вывод данных производится при помощи ПК (6).

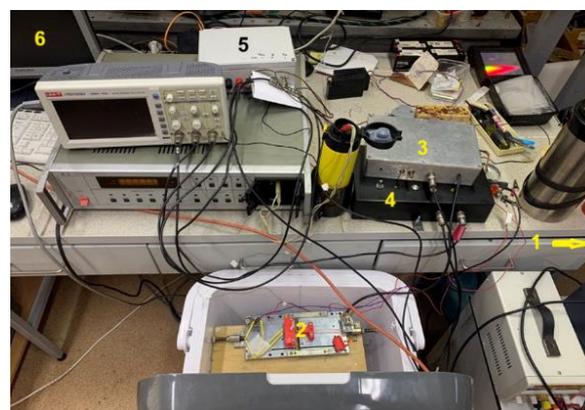


Рис.2. (а) Блок схема и (б) фото экспериментальной установки

Для изучения термодинамических свойств образцов при ФП первого и второго рода использовалось разложение функции свободной энергии Гельмгольца методом Ландау до четвертого порядка по намагниченности:

$$F = \frac{1}{2}\alpha M^2 + \frac{1}{4}\beta M^4 + \frac{1}{2}NM^2 - MN$$

Где α_0 , α и β – магнитные модули ($\alpha = \alpha_0(T - T_c)$), N – фактор размагничивания, M – намагниченность образца, H – внешнее поле, T – текущая температура, T_c – температура точки фазового перехода.

Для изучения кинетики процессов при ФП было взято уравнение Ландау-Халатникова:

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma \frac{dF}{dM}$$

где $\frac{dM}{dt}$ — изменение параметра порядка (намагниченности) со временем, $\frac{dF}{dM}$ — производная свободной энергии по намагниченности, γ — положительный коэффициент, характеризующий материал. В уравнении Ландау-Халатникова γ показывает скорость протекания процессов при изменении параметра порядка.

На рис.3. изображены графики зависимости намагниченности от времени в гадолинии при включении и отключении магнитного поля в точке Кюри.

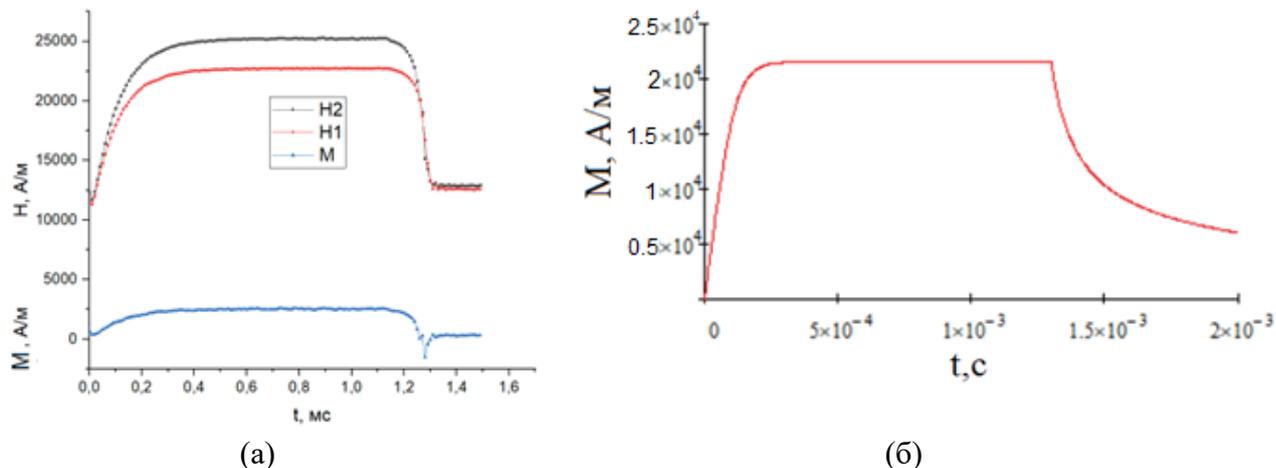


Рис. 3. Графики зависимости магнитной восприимчивости от времени для чистого гадолиния в точке Кюри, $T_c = 293$ К. (а) эксперимент, (б) модель.

Хорошее совпадение экспериментальных и теоретических данных говорит о правильном подборе величины γ . Максимальная скорость ФП 2-го рода в чистом гадолинии составила $\gamma = 3 \cdot 10^3 \frac{1}{c}$, то есть максимальная частота срабатывания не менее 3 кГц.

Кратко сформулируем заключение:

1) Рассчитаны коэффициент в разложении свободной энергии по M и в уравнении состояния в чистом гадолинии и сплаве Ni50.5Mn33.4In15.6V0.5.

2) Разработан метод и экспериментальная установка для определения $M(t)$ в точке Кюри в сплаве Ni50.5Mn33.4In15.6V0.5.

3) Разработан метод нахождения константа γ уравнения Ландау-Халатникова, показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода и опробован на примере чистого гадолиния. Сделана оценка.

Список использованных источников

1. De Oliveira N. A., von Ranke P. J. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect //Physics Reports. – 2010. – Т. 489. – №. 4-5. – С. 89-159.
2. Tishin A. M., Spichkin Y. I. Recent progress in magnetocaloric effect: Mechanisms and potential applications //international journal of refrigeration. – 2014. – Т. 37. – С. 223-229.
3. Aliev A. M., Gamzatov A. G. Magnetocaloric effect in manganites in alternating magnetic fields //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2022. – Т. 553. – С. 169300
4. Puri S. Kinetics of phase transitions //Phase Transitions. – 2004. – Т. 77. – №. 5-7. – С. 407-431.
5. Basso V. et al. Hysteresis and phase transition kinetics in magnetocaloric materials //physica status solidi (b). – 2018. – Т. 255. – №. 2. – С. 1700278
6. Franco V. et al. Magnetocaloric effect: From materials research to refrigeration devices //Progress in Materials Science. – 2018. – Т. 93. – С. 112-232.
7. Reis M. S. Magnetocaloric and barocaloric effects of metal complexes for solid state cooling: Review, trends and perspectives //Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 417. – С. 213357

УДК 537.622.4

Роль вариации элементного состава сплавов на основе FeRhCo на параметры магнитного фазового перехода**Ващенко А.Р.**

студентка, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Комлев А.С.

аспирант, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Русаков В.С.

профессор кафедры общей физики физического факультета, д.ф.-м.н., Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Амиров А.А.

к.ф.-м.н., Институт физики им. Х. И. Амирханова ДФИЦ РАН

Юсупов Д.М.

аспирант, Институт физики им. Х. И. Амирханова ДФИЦ РАН

Перов Н.С.

заведующий кафедрой магнетизма физического факультета, д.ф.-м.н., профессор, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

***Аннотация.** Одну из ключевых ролей в развитии технологического прогресса играют новые магнитные материалы с уникальными структурными и магнитными свойствами. Среди них стоит выделить материалы, проявляющие магнитный фазовый переход вблизи комнатной температуры. Они являются наиболее перспективными в области технологий магнитного охлаждения. Данная работа посвящена всестороннему исследованию параметров фазового перехода первого рода сплавов на основе FeRhCo. На примере полученных экспериментальных данных показан один из возможных методов оценки вариации элементного состава в образце, который обладает магнитным фазовым переходом первого рода. Решаемая задача особенно важна с фундаментальной точки зрения, поскольку механизмы магнитных фазовых переходов до конца не изучены.*

***Ключевые слова:** FeRh сплавы, магнитный фазовый переход первого рода, магнитокалорический эффект, легированные сплавы*

The role of variations in the elemental composition of FeRhCo-based alloys on the magnetic phase transition parameters**Vashchenkova A.R.**

Student, Lomonosov Moscow State University

Komlev A.S.

PhD student, Lomonosov Moscow State University

Rusakov V.S.

Professor of the Department of General Physics, Faculty of Physics, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Lomonosov Moscow State University

Amirov A.A.

Ph.D., Amirkhanov Institute of Physics, Dagestan Scientific Center of Russian Academy of Sciences

Yusupov D. M.

PhD student, Amirkhanov Institute of Physics, Dagestan Scientific Center of Russian Academy of Sciences

Perov N.S.

Head of the Department of Magnetism, Faculty of Physics, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Lomonosov Moscow State University

***Annotation.** New magnetic materials with unique structural and magnetic properties play a key role in technological progress. Among them, materials exhibiting magnetic phase transition at room temperature are the most promising in the field of magnetic cooling technologies. This work is devoted to a comprehensive study of the first order phase transition parameters of FeRhCo based alloys. Using the experimental data obtained as an example, one of the possible methods for assessing the variation in elemental composition in a sample that exhibits a first-order magnetic phase transition is shown. The problem being solved is especially costly from a fundamental point of view, since the mechanisms of magnetic phase transitions are not fully understood.*

***Keywords:** FeRh alloys, magnetic first order phase transition, magneto-caloric effect, doped alloys*

Сплавы на основе FeRh более восьмидесяти лет привлекают внимание ученых. Подобные соединения претерпевают фазовый переход первого рода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние вблизи комнатной температуры [1]. В процессе данного фазового перехода материал способен проявлять ряд различных эффектов, интересных с практической точки зрения. Несмотря на многолетнее изучение параметров фазового перехода в данных сплавах, их природа и механизмы до конца не изучены [2]. Например, известно, что добавление легирующего элемента приводит к изменению температуры фазового перехода, однако достоверно точно предсказать это изменение не представляется возможным [3].

Данная работа посвящена исследованию влияния легирования кобальтом сплава FeRh на параметры магнитного фазового перехода. В качестве объектов исследования были выбраны образцы FeRhCo с различным содержанием Co (от ат. 2% до ат. 3,5 %). Экспериментальные исследования были проведены с использованием таких методов, как рентгеноструктурный анализ (при помощи Rigaku Miniflex при комнатной температуре), магнитометрия (при помощи вибрационного магнитометра LakeShore 7407 Series в диапазоне температур от 80 К до 300 К), энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия (при помощи электронного микроскопа Tescan Vega), измерение магнитосопротивления четырехточечным методом (в магнитных полях до 3 Тл).

С помощью метода энергодисперсионной спектроскопии была определена неоднородность исследуемых образцов по элементному составу, в результате чего был уточнен их реальный состав. Методом рентгеноструктурного анализа были получены данные о кристаллическом строении образцов. Определена симметрия кристаллической решетки основной фазы, ее параметры кристаллической решетки, объемное содержание дополнительных кристаллографических фаз. Температурные зависимости намагниченности в различных внешних полях напряженностью от 1 до 16 кЭ были измерены с помощью

вибрационного магнитометра. Из полученных данных были определены значения температур, при которых происходит магнитный фазовый переход. Также были измерены значения ширины температурного магнитного гистерезиса. Из анализа данных по зависимости температуры фазового перехода от концентрации кобальта в образце и дифференциальных характеристик температурных зависимостей намагниченности была получена информация о возможном диапазоне вариации содержания кобальта в образцах (в атомных процентах). В качестве дополнительных данных оценка процентного содержания легирующего элемента в сплавах была выполнена из анализа данных магнитосопротивления. Авторы предполагают, что развитие предложенного метода позволит усовершенствовать доступные способы определения элементного состава сплавов с магнитными фазовыми переходами.

Комлев А.С. благодарит фонд «БАЗИС» за стипендиальную поддержку. Перов Н.С. выражает благодарность Минобрнауки России за грант № 075-15-2021-1353. Авторы выражают благодарность Алисе М. Чирковой и проф. Николаю В. Баранову за синтез исследуемых образцов.

Список использованной литературы:

1. Komlev A. S. et al. Magnetothermal Properties of Heavy Rare Earth Metals and Fe–Rh-Based Alloys //Moscow University Physics Bulletin. – 2022. – Т. 77. – №. 5. – С. 690-712.
2. Shirane G., Nathans R., Chen C. W. Magnetic moments and unpaired spin densities in the Fe-Rh alloys //Physical Review. – 1964. – Т. 134. – №. 6A. – С. A1547.
3. Lewis L. H., Marrows C. H., Langridge S. Coupled magnetic, structural, and electronic phase transitions in FeRh //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2016. – Т. 49. – №. 32. – С. 323002.

УДК 538.913

Связанность фазовых переходов на примере поликристаллического сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ **Морозов Е.В.**

к.ф.-м.н., младший научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Семёнов Д.С.

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Карпухин Д.А.

Инженер ФГБУН ИРЭ РАН

Коледов В.В.

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Шавров В.Г.

профессор, главный научный сотрудник ФГБУН ИРЭ РАН

Гамзатов А.Г.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

Алиев А.М.

к.ф.м.н., старший научный сотрудник ДФИЦ РАН

Аннотация: В работе изучается взаимосвязь параллельно проходящих магнитоструктурного фазового перехода (ФП) первого рода и ФП второго рода в точке Кюри, используя метод Ландау и уравнение Ландау-Халатникова в поликристаллическом сплаве $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$. Авторами разработан подход, включающий в себя расчет коэффициентов для записи функции свободной энергии обоих ФП, включая члены магнитоструктурного взаимодействия и формфактор конкретного образца. Проверена и подтверждена гипотеза о совпадении точки Кюри с точкой перегиба в графике зависимости $M(T)$ в области ФП в точке Кюри любого материала или сплава с последующим вычислением точки Кюри для изучаемого сплава, учитывая его геометрические размеры, приводя в результате общую формулу с точностью до 0.1 К. Величина точки Кюри для сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ составила 291,15 К. Так же приводится расчет констант уравнений Ландау-Халатникова γ_1 и γ_2 , показывающий скорости обоих ФП. Разница величин γ_1 и γ_2 показывает различие кинетики и механизма ФП.

Ключевые слова: Магнитоструктурный фазовый переход, точка Кюри, уравнение состояния, кинетика, скрытая теплота, свободная энергия

Relationship between phase transitions based on the example of polycrystalline alloy **$Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$** **Morozov E. V.**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Semenov D. S.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Karpukhin D. A.

Engineer of the Kotelnikov IRE RAS

Koledov V. V.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Shavrov V. G.

Professor, Chief Researcher of the Kotelnikov IRE RAS

Gamzatov A. G.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Aliyev A.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher of the DFRC RAS

Abstract: This work studies the relationship between a parallel first-order magnetostructural phase transition (PT) and a second-order PT at the Curie point using the Landau method and the Landau-Khalatnikov equation in the $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ polycrystalline alloy. The authors have developed an approach that includes the calculation of coefficients for writing the free energy function of both phase transitions, including terms of the magneto-structural interaction and the form factor of a particular sample. The hypothesis about the coincidence of the Curie point with the inflection point in the graph of the $M(T)$ dependence in the PT region at the Curie point of any material or alloy was tested and confirmed, followed by the calculation of the Curie point for the alloy under study, taking into account its geometric dimensions, resulting in a general formula with accuracy up to 0.1 K. The value of the Curie point for the $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ alloy was 291.15 K. The calculation of the constants of the Landau-Khalatnikov equations γ_1 and γ_2 is also given, showing the rates of both PTs. The difference between the values of γ_1 and γ_2 shows the difference in the kinetics and mechanism of PTs.

Keywords: Magnetostructural phase transition, Curie point, equation of state, kinetics, latent heat, free energy

В последние годы выходит очень большое количество публикаций, посвященных твердотельным фазовым (ФП) переходам в металлах и металлических сплавах [1-4]. Изучение механизмов, причин возникновения, изменение параметров ФП является актуальнейшей проблемой в областях альтернативной энергетики, создании холодильных систем, приборостроения, технологии сенсоров и актюаторов и многих других.

Проблема, обсуждающаяся в настоящей работе, связана с взаимосвязью и возможным взаимодействием между параллельно происходящими ФП. Целью работы – задача, которая заключается в изучении задачи нахождения констант в написании свободной энергии, а также используя метод Ландау и уравнение Ландау-Халатникова посчитать скорости магнитоструктурного ФП 1-го рода и ФП в точке Кюри 2-го рода и произвести анализ об их связанности. В работе авторами использовался образец поликристаллического сплава с эффектом памяти формы (ЭПФ) $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ длиной 16 мм, шириной 2 мм и толщиной 2 мм [2]. С точкой Кюри $T_C = 291K$, а также температуры начала и конца соответственно прямого и обратного метамагнитоструктурного перехода $M_s = 261 K$, $M_f = 250 K$, $A_s = 258 K$, $A_f = 268 K$.

Для изучения термодинамических свойств образцов при ФП первого и второго рода авторы использовали разложение функции свободной энергии Гельмгольца методом Ландау:

$$F = \frac{1}{2}\alpha M^2 + \frac{1}{4}\beta M^4 + \frac{1}{2}NM^2 - MH \quad (1) \quad \text{Где}$$

α_0 , α и β – магнитные модули ($\alpha = \alpha_0(T - T_C)$), N – фактор размагничивания, M – намагниченность образца, H – внешнее поле, T – текущая температура, T_C – температура точки фазового перехода.

Для получения термического уравнения состояния воспользуемся условием:

$$\frac{dF}{dM} = 0 \quad (2)$$

Подставив свободную энергию (1) в (2), получим:

$$\alpha_0(T - T_C)M + \beta M^3 + NM = H \quad (3)$$

Если проводить измерения в точке Кюри в длинном образце, то формфактором можно пренебречь, тогда выражение (3) примет вид:

$$H = \beta M^3 \quad (4)$$

Таким образом, построив зависимость $M^3(H)$, можно найти β .

На рис.1. изображены зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля для образцов гадолиния с разными факторами размагничивания (формфакторами).

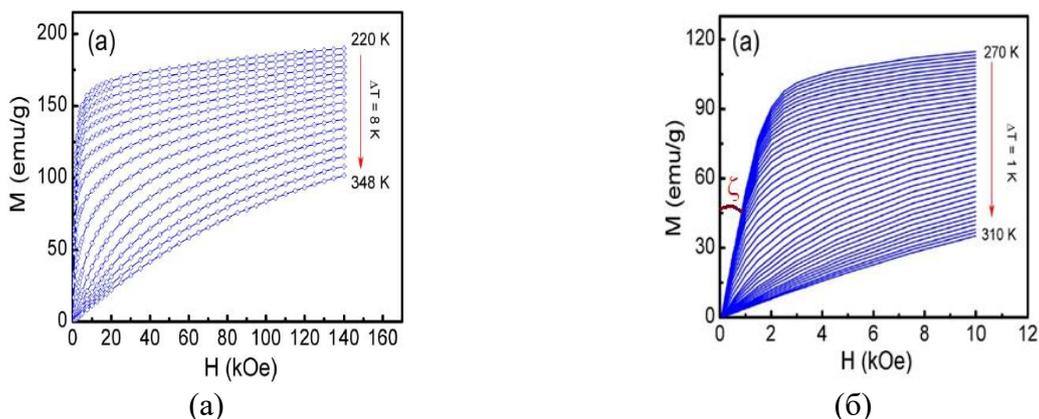


Рис.1. Графики зависимостей намагниченности от внешнего магнитного поля для образцов гадолиния с разными факторами размагничивания (формфакторами) (а) $N=0$, (б) $N \neq 0$ [13].

Тогда фактор размагничивания образца равен котангенсу угла ζ (рис.3б.)

$$N = ctg(\zeta) = \frac{H}{M} \tag{5}$$

Значение коэффициента α_0 подбирается путем сравнения уравнения (3) и снятого экспериментального графика неявной функции зависимости $M(T)$ (3) вблизи ФП в точке Кюри.

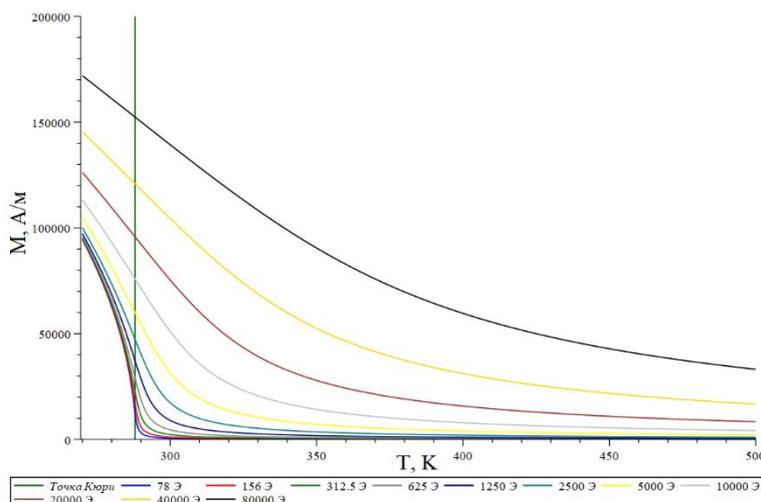


Рис.2. Теоретические графики зависимостей $M(T)$ и точки Кюри в разных магнитных полях для сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$

Последним найденным параметром остается T_c . Сама по себе точка Кюри – это температурная точка, в которой скачком (ФП 2-го рода) металл или сплав переходит из ферромагнитного состояния в парамагнитное при нулевом магнитном поле. На рис.2. показана серия графиков зависимостей намагниченности от температуры при разных внешних постоянных магнитных полях для сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$. При увеличении внешнего магнитного поля видно смещение точки Кюри в сторону увеличения температуры. Однако дальнейшее теоретическое изучение показывает, что если продифференцировать неявную функцию (3) по температуре $\left(\frac{dM}{dT}\right)$, то получим:

$$\alpha_0 M + \alpha_0 T \frac{\partial M}{\partial T} - \alpha_0 T_M \frac{\partial M}{\partial T} + 3\beta \frac{\partial M}{\partial T} M^2 + N \frac{\partial M}{\partial T} = 0 \tag{6}$$

Видно, что первая производная намагниченности по температуре не зависит от внешнего магнитного поля. Взяв вторую производную по температуре $\left(\frac{\partial^2 M}{\partial T^2}\right)$, получаем:

$$6\beta M \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)^2 + 2\alpha_0 \frac{\partial M}{\partial T} = 3\beta \frac{\partial^2 M}{\partial T^2} M^2 + T \frac{\partial^2 M}{\partial T^2} - \alpha_0 T_c \frac{\partial^2 M}{\partial T^2} + N \frac{\partial^2 M}{\partial T^2} \quad (7)$$

Графики $M(T)$, $\frac{\partial M}{\partial T}(T)$ и $\frac{\partial^2 M}{\partial T^2}(T)$ представлены на рис.5.

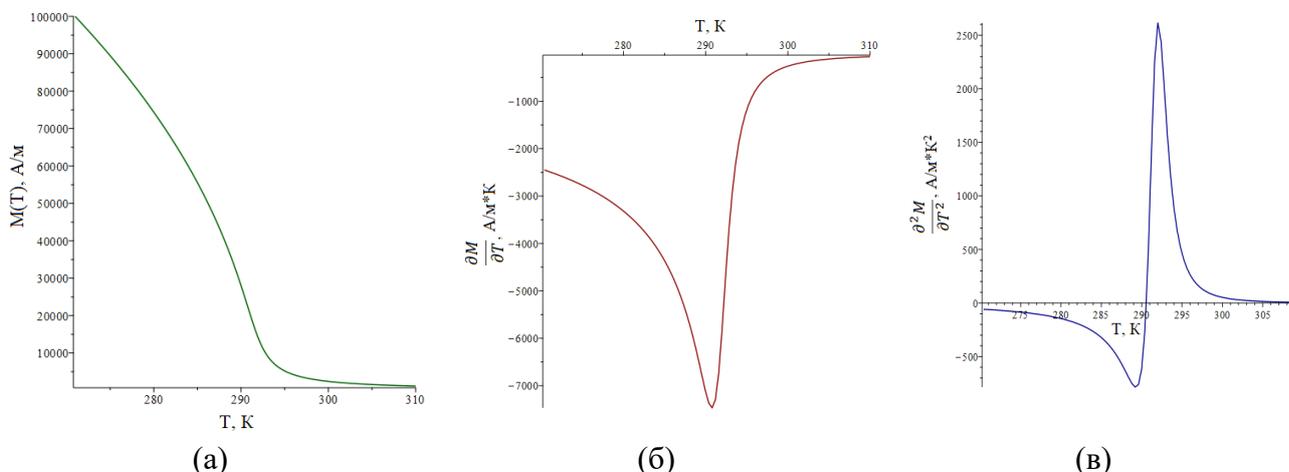


Рис.5. Температурные зависимости при постоянном поле величиной 20000 А/м в сплаве $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$ (а) намагниченности, (б) первой производной намагниченности по температуре, (в) второй производной намагниченности по температуре.

Приравняв $\frac{\partial^2 M}{\partial T^2}$ к нулю в (7), найдём координату ординаты экстремума функции $\frac{dM}{dT}(T)$:

$$6\beta M \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)^2 + 2\alpha_0 \frac{\partial M}{\partial T} = 0$$

Настоящее уравнение имеет два корня: $\frac{dM}{dT} = 0$ и $\frac{dM}{dT} = -\frac{\alpha_0}{3\beta M}$. Первый корень не имеет смысла, поскольку при подстановке в (6) получается, что $M=0$. Подставив второй корень в уравнение (7) получим:

$$T = T_c - \frac{N}{\alpha_0} \quad (8)$$

Уравнение (8) показывает температуру точки перегиба для любого из серии графиков на рис.2 и, следуя из этой формулы видно, что абсцисса точки перегиба не зависит от внешнего поля, а зависит только от параметров образца. Используя такой подход можно найти температуру Кюри для любого образца. Для сплава $Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}$, как видно из графика, $T = 290,78$, значит, подставив N и α_0 , получим $T_c = 291,15$, что было подтверждено экспериментально.

Настоящая работа выполнена в рамках государственного задания ИРЭ им. Котельникова РАН.

Список использованных источников

1. Tishin A. M., Spichkin Y. I. Recent progress in magnetocaloric effect: Mechanisms and potential applications //International journal of refrigeration. – 2014. – Т. 37. – С. 223-229.
2. Aliev A. M., Gamzatov A. G. Magnetocaloric effect in manganites in alternating magnetic fields //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2022. – Т. 553. – С. 169300
3. Puri S. Kinetics of phase transitions //Phase Transitions. – 2004. – Т. 77. – №. 5-7. – С. 407-431.
4. Basso V. et al. Hysteresis and phase transition kinetics in magnetocaloric materials //Physica status solidi (b). – 2018. – Т. 255. – №. 2. – С. 1700278

УДК 537.622

Магнитные фазовые переходы селенида тулия, замещенного марганцем**Романова О.Б.**

к. ф. – м. н., с.н.с., Института физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Аплеснин С.С.

д.ф.-м.н., профессор, вед. н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Удод Л.В.

к. ф. – м. н., н.с., Института физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Живулько А.М.

к. ф. – м. н., с.н.с., ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»

Янушкевич К.И.

д.ф.-м.н., вед. н.с., ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»

***Аннотация.** Данная работа посвящена исследованию магнитных фазовых переходов катион – замещенного селенида тулия $Tm_{1-x}Mn_xSe$ ($0 \leq x \leq 0.2$) в диапазоне температур (77 - 1000 K) и магнитных полей до 12 кЭ. Исследована кристаллическая структура синтезированных соединений методом рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии. Обнаружено, что изменение валентности с ростом концентрации сопровождается изменением параметра кристаллической ячейки и уменьшением магнитного момента. В области низких и комнатных температур установлены температуры Кондо обусловленные марганцевой и тулиевой подсистемой.*

***Ключевые слова:** халькогениды, структура, намагниченность, температура Кондо.*

Magnetic phase transitions of tulium selenide substituted by manganese**Romanova O.B.**PhD, senior researcher
Kirensky Institute of Physics, FRC SB RAS**Aplesnin S.S.**Professor, leading researcher
Kirensky Institute of Physics, FRC SB RAS**Udod L.V.**PhD, researcher
Kirensky Institute of Physics, FRC SB RAS**Zhivulko A.M.**PhD, senior researcher
Scientific-Practical Materials Research Center NAS, Belarus

Yanushkevich K.I.

Professor, leading researcher
Scientific-Practical Materials Research Center NAS, Belarus

Annotation. *The work is dedicated to the study of magnetic phase transitions of cation-substituted thulium selenide $Tm_{1-x}Mn_xSe$ ($0 \leq X \leq 0.2$) in the temperature range (77-1000 K) and magnetic fields up to 12 kOe. The crystal structure of the synthesized compounds was studied by X-ray diffraction analysis and electron microscopy. It has been established that a change in valence with increasing concentration is accompanied by a change in the crystal cell parameter and a decrease in the magnetic moment. In the region of low and room temperatures, the Kondo temperatures are determined by the manganese and thulium subsystem.*

Keywords: *chalcogenides, structure, magnetization, Kondo temperature*

Системы, допированные редкоземельными элементами с переменной валентностью, представляют собой уникальную группу соединений, сочетающих разнообразие магнитных и электрических свойств. Уникальность халькогенидов редкоземельных элементов обусловлена тем, что в зависимости от числа электронов (четное или нечетное) на 4f уровне и расположения уровня Ферми можно получить щель или квазищель с разным типом проводимости, магнитной восприимчивости в области низких температур [1].

Структурные, электронные фазовые переходы, а также магнитотранспортные эффекты в селениде тулия и его твердых растворах преимущественно исследовали в низкотемпературной области, в области магнитного фазового перехода [2]. Исходный селенид тулия Tm_xSe допускает изменение валентности от промежуточной $Tm^{+2.7}$ для $X=1$ до Tm^{+3} для $X=0.87$ в рамках гранцентрированной кубической структуры с уменьшением постоянной элементарной ячейки от 0.5705 до 0.5628 нм [3]. $TmSe$ является антиферромагнетиком с $T_N \sim 2,9$ К с магнитным моментом $7.56 \mu_B$ для трехвалентного иона тулия и $4 \mu_B$ для двухвалентного. Магнитные и проводящие свойства $TmSe$ зависят от термической обработки, которые влияют на формирование либо смешанного, либо промежуточного валентного состояния, а также на стехиометрию во время роста кристаллов и на распределение вакансий и дефектов [4]. Как в самом селениде тулия, так и в его твердых растворах наблюдается уменьшение магнитного момента с ростом концентрации замещения. Причиной уменьшения момента может быть промежуточная валентность, так и Кондо эффект.

Цель данной работы заключается в установлении магнитных фазовых переходов, температур Кондо в катион-замещенных твердых растворах $Tm_{1-x}Mn_xSe$.

Образцы системы $Tm_{1-x}Mn_xSe$ ($0 \leq X \leq 0.2$) синтезированы методом твердофазной реакции в вакуумированных кварцевых ампулах с последующим гомогенизирующим отжигом и закалкой в холодную воду. Более подробное описание методики синтеза поликристаллических соединений представлено в работе [5].

Согласно данным рентгеноструктурного анализа твердые растворы системы $Tm_{1-x}Mn_xSe$ являются двухфазными. Основная и доминирующая фаза принадлежит гранцентрированной кубической структуре типа NaCl пространственной группы $Fm\bar{3}m$ (225), характерной для моноселенида тулия [6]. Сопутствующая фаза на рентгенограммах, полученных с поверхности образцов, подвергнутых отжигу с медленным охлаждением, соответствует соединению Tm_2O_2Se [7].

По результатам анализа дифрактограмм рентгеновских исследований определен параметр кубической элементарной ячейки a синтезированных составов $Tm_{1-x}Mn_xSe$ ($0 \leq X \leq 0.2$), который с ростом концентрации увеличивается от 0.563 нм (для $X=0$) до 0.565 нм ($X=0.2$). Постоянная решетки является хорошим индикатором валентности в редкоземельных соединениях и сплавах. Увеличение параметра элементарной ячейки вблизи концентрации

протекания $X_c=0.17$ при комнатной температуре сопровождается изменением валентности тулия.

Проведен анализ морфологии поверхности синтезированных образцов системы $Tm_{1-x}Mn_xSe$, который согласуется с данными рентгеноструктурного анализа и подтверждает присутствие элементов тулия, марганца, селена и небольшой процент кислорода. Синтезированные образцы имеют ровную сплошную поверхность и макро-гранулярную структуру. С ростом концентрации внедрения марганца в матрицу селенида тулия гранулы приобретают более четкое очертание границ, однако хорошая плотность их остаются неизменной, что несомненно будет влиять на проводящие свойства системы.

Положение $4f$ уровня относительно $5d$ зоны можно регулировать внедрением ионов марганца в решетку $TmSe$, что повлияет на поведение температурной зависимости магнитной восприимчивости и намагниченности синтезированных на его основе твердых растворов. На рис.1 представлены температурные зависимости намагниченности для исходного соединения $TmSe$ и его твердых растворов $Tm_{1-x}Mn_xSe$. Эти зависимости удовлетворительно описываются в форме закона Кюри-Вейсса, учитывающей вклад от сопутствующей парамагнитной фазы Tm_2O_2Se и $d-f$ взаимодействий:

Для исходного $TmSe$:

$$\chi = \frac{w_1 C_{hex}}{T} + \frac{w_2 C_{TmSe}}{T + \theta_{TmSe}} + \chi_k^{TmTm} \quad (1)$$

Для твердых растворов $Tm_{1-x}Mn_xSe$:

$$\chi = \frac{w_1 C_{hex}}{T} + \frac{w_2 C_{TmSe}}{T + \theta_{TmSe}} + \chi_k^{MnTm} + \chi_k^{TmTm} \quad (2)$$

Где $\frac{\chi_1 C_{hex}}{T}$ вклад от гексагональной сопутствующей фазы Tm_2O_2Se , $\frac{\chi_2 C_{TmSe}}{T + \theta_{TmSe}}$ вклад от кубической фазы $TmSe$, χ_k^{MnTm} вклад от взаимосвязи $3d$ с $4f$ электронами и χ_k^{TmTm} вклад от взаимосвязи $5d$ с $4f$ электронами. Определённые из уравнений (1) и (2) температуры являются температурами Кондо ($T_k^{(Tm-Tm)}, K$) и ($T_k^{(Mn-Tm)}, K$). При этих температурах на зависимости $\sigma(T)$ селенида тулия и его твердых растворов обнаружены аномалии.

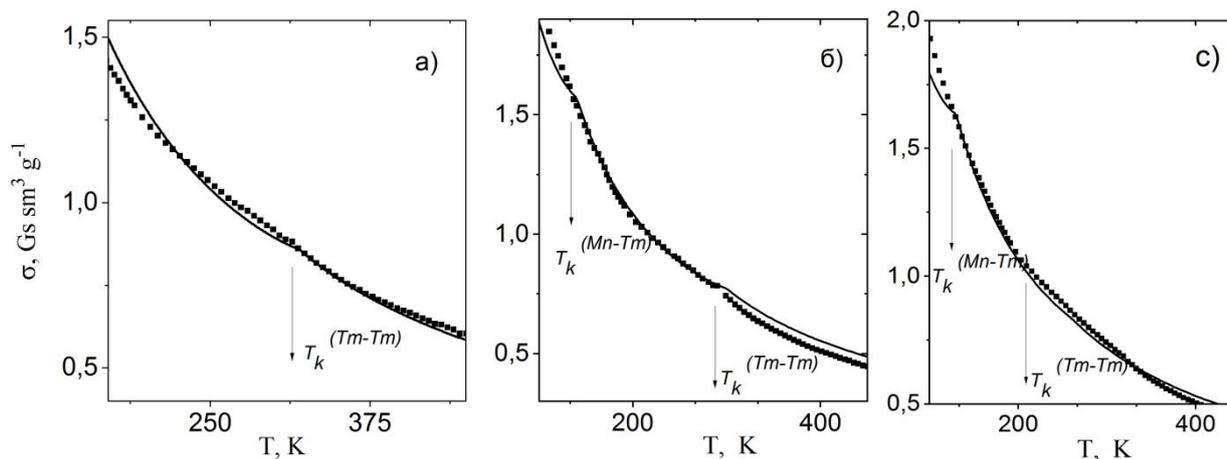


Рис.1 Температурная зависимость намагниченности системы $Tm_{1-x}Mn_xSe$ с концентрацией замещения $X=0$ (а), 0.1 (б), 0.2 (с) измеренной в магнитном поле $H=8.6$ кЭ. Линиями представлен результат аппроксимации для систем $TmSe$ уравнение (1) и $Tm_{1-x}Mn_xSe$ ($X=0.1$ и 0.2) уравнение (2)

Аномалия в области $\sim 320K$ обнаружена на температурной зависимости намагниченности для исходного селенида тулия и соответствует температуре Кондо ($T_k^{(Tm-Tm)}, K$) обусловленной взаимодействием ионов тулия (рис.1а). Температура Кондо $T_k^{(Tm-Tm)}$, определенная из уравнения (2) обнаружена на кривых $\sigma(T)$ образцов системы $Tm_{1-x}Mn_xSe$ с $X=0.1$, $X=0.2$ и

составляет 290К и 250К соответственно (рис.1 б, с). При замещении тулия марганцем для $X=0.1$ и $X=0.2$ на температурных зависимостях магнитной восприимчивости и намагниченности обнаружена дополнительно небольшая аномалия, связанная с температурой Кондо $T_k^{(Mn-Tm)}=140$ и 130К соответственно, обусловленная взаимодействием марганцевой подсистемой с 4f электронами. Видно, что с ростом концентрации марганца в системе TmSe значения температур Кондо смещаются в низкотемпературную область, т.е значение температуры Кондо меняется в результате гибридизации d и f электронов.

Магнитный момент, определенный из зависимости обратной магнитной восприимчивости, для TmSe и его твердых растворов $Tm_{1-x}Mn_xSe$ плавно уменьшаться с ростом концентрации марганца от $5,1\mu_B$ ($X=0$) до $4,38\mu_B$ ($X=0.2$) и практически не меняется выше концентрации протекания $X_C=0.17$. Согласно работе [8] для иона тулия магнитный момент сильно зависит от валентности. Такое поведение магнитного момента согласуется с литературными данными [8] и связывается с образованием промежуточной валентности с ростом концентрации внедрения марганца. Согласно теоретическим расчетам [9] в этой области температур (400-500 К) меняется заселенность 4f уровня, что, скорее всего, проявится в высокотемпературных аномалиях транспортных свойств, исследуемых методом импедансной спектроскопией и термоЭДС.

Таким образом, замещение тулия марганцем в системе $Tm_{1-x}Mn_xSe$ с концентрацией замещения ($0 \leq X \leq 0.2$) приводит к изменению параметра элементарной ячейки и уменьшению магнитного момента вызванного изменением валентности ионов тулия с ростом концентрации и температуры. Замещение тулия марганцем приводит к двум аномалиям в температурном поведении магнитной восприимчивости и намагниченности, которые вызваны обменным взаимодействием носителей заряда $3d-4f$ и $5d-4f$ в низкотемпературной области и в области комнатных температур соответственно.

Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Список использованных источников:

1. Ramakrishnan T. V. Strongly Correlated Electrons in Solids // Curr . Sci. – 2008. - V. 95. – P. 1284–1309.
2. Debray D., Sayetat F., Decker D.L. Anomalous thermal expansion of nonstoichiometric TmSe // Phys. Rev. B. – 1987. – V. 35. – P. 6796 - 6799.
3. Kaldis E., Fritzler B., Jilek E., Wisard A. Phase relationships and structural investigations in TmSe and alloys // J. Phys. Colloques – 1979.-V. 40. - C5-366 – C5-369.
4. Batlogg B., Ott H.R., Kaldis E., Thöni W., Wachter P. Magnetic mixed valent TmSe // Phys. Rev. B – 1979. – V. 19 – P. 247-259.
5. Romanova O.B., Aplesnin S.S., Sitnikov M.N., Udod L.V., Shabanov A.V., Yanushkevich K.I., Galyas A.I., Zhivulko A.M. Structural and electronic transitions in thulium-substituted manganese selenide // Ceram. Int. – 2022. – V. 48. – P. 29822-29828
6. Aplesnin S.S., Romanova O.B., Galays A.I., Zhivulko A.M., Yanushkevich K.I. Synthesis conditions, crystal structure and magnetic properties of Mn-Tm-Se selenides // Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series -2022.- V. 67. – P. 135–143.
7. Guittard Par M., Flanaut J., Domange L. La série complete des oxysélénies des terres rares et d'yttrium // Acta Cryst. – 1966 – V. 21.- P. 832.
8. Holtzberg F., Penney T., Tournier R. Valence instabilities of Tm in its compounds and solid solutions // J. Phys. Colloques – 1979. - V. 40. - P. C5-314 – C5-320.
9. Zlatić V., Monnier R. Theory of the thermoelectricity of intermetallic compounds with Ce or Yb ions // Phys. Rev. B – 2005. – V. 71. – P. 165109 (12).

УДК 537.622

Влияние замещения в ортоферрите $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ на особенности фазовой диаграммы при малых концентрациях марганца ($x < 0.1$)**Шайхутдинов К.А.**

к.ф.-м. н., зав. лаб. ИФ СО РАН

Семенов С.В.

к.ф.-м. н., СНС ИФ СО РАН

Скоробогатов С.А.

к.ф.-м. н., НС ИФ СО РАН

Фрейдман А.Л.

к.ф.-м. н., с.н.с. ИФ СО РАН

***Аннотация.** Ортоферриты редкоземельных элементов широко исследованы и проявляют спонтанные магнитные переходы. В то же время, соединения с замещением 3d-элементов исследованы достаточно слабо. В данной работе проведено исследование магнитных свойств монокристаллов ортоферрита гольмия с замещением ионов Fe^{3+} ионами Mn^{3+} . Из магнитных измерений установлено, что при замещении железа на марганец изменяется тип магнитного ориентационного перехода от перехода II рода ($\text{AxFyGz} \rightarrow \text{CxGyFz}$) к переходу первого рода ($\text{AxFyGz} \rightarrow \text{GxCyAz}$) с наличием слабого ферромагнитного момента только в направлении b (для установки $R\text{nta}$). Последнее позволяет использовать степень замещения, как инструмент создания материала с заданными магнитными свойствами. Кроме этого, установлено, что при малых концентрациях марганца ($x < 0.1$) на фазовой диаграмме $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ наблюдается более сложный переход $\text{AxFyGz} \rightarrow \text{GxCyAz} \rightarrow \text{CxGyFz}$.*

***Ключевые слова:** ортоферриты, фазовые переходы, спонтанная магнитострикция*

Effect of substitution in orthoferrite $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ on the features of the phase diagram at low manganese concentrations ($x < 0.1$)**Shaykhutdinov K.A.**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of laboratory, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center

Semenov S.V.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior scientist, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center

Skorobogatov S.A.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, research officer, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center

Freidman A.L.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior scientist, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center

Annotation. *Rare earth orthoferrites have been widely studied and exhibit spontaneous magnetic transitions. At the same time, compounds with substitution of 3d-elements have been studied rather poorly. In this work, we studied the magnetic properties of holmium orthoferrite single crystals with the replacement of Fe^{3+} ions by Mn^{3+} ions. From magnetic measurements it has been established that when iron is replaced by manganese, the type of magnetic orientation transition changes from a second-order transition ($AxFyGz \rightarrow CxGyFz$) to a first-order transition ($AxFyGz \rightarrow GxCyAz$) with the presence of a weak ferromagnetic moment only in the b direction (for the $Pnma$ installation). The latter makes it possible to use the degree of substitution as a tool for creating a material with specified magnetic properties. In addition, it has been established that at low concentrations of manganese ($x < 0.1$) a more complex transition $AxFyGz \rightarrow GxCyAz \rightarrow CxGyFz$ is observed in the $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ phase diagram.*

Keywords: *orthoferrites, phase transitions, spontaneous magnetostriction*

Ортоферриты редкоземельных элементов привлекают большое внимание и широко исследовались начиная с середины 20-го века. Однако, и до настоящего времени появляются новые публикации посвященные исследованию магнитных свойств этого семейства [1-3]. Последнее обусловлено богатой фазовой диаграммой, наличием 3d- и 4f-элементов и их взаимодействием между собой.

В данной работе проведено исследование монокристаллов ортоферрита гольмия $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ с замещением ионов Fe^{3+} ионами Mn^{3+} методом дилатометрии и магнитных измерений с замещениями $x=0, 0,05, 0,1$. Исследование магнитных свойств монокристаллов $HoFe_{1-x}Mn_xO_3$ с большими концентрациями x были проведены в работе [4] Образцы монокристаллов выращены методом зонной плавки. Измерения относительной деформации были произведены без приложения магнитного поля, в то время как намагниченность измерялась во внешнем магнитном поле напряженностью 100 Ое. Результаты измерений температурных зависимостей намагниченности M и относительной деформации λ для состава с $x=0,05$ приведены на рис. 1.

Как видно из рисунка, по мере уменьшения температуры наблюдается два магнитных фазовых перехода. По мере уменьшения температуры при $T = 96$ К происходит переход из фазы $AxFyGz$ (слабый ферромагнитный момент вдоль оси b) в фазу коллинеарного антиферромагнетика $GxCyAz$, а при температуре $T = 17$ К наблюдается переход, соответствующий формированию фазы $CxGyFz$ (слабый ферромагнитный момент вдоль оси c). Между двумя этими переходами существует температурная область соответствующая промежуточной фазе (коллинеарное антиферромагнитное упорядочение). Последнее не свойственно чистому соединению $HoFeO_3$, где промежуточное коллинеарное состояние не наблюдается. Таким образом, замещение ионов Fe^{3+} ионами Mn^{3+} приводит к возникновению новой магнитной фазы. Также заметим, что замещение приводит к сдвигу температур указанных фазовых переходов, открывая, таким образом, возможность контроля магнитных свойств путем изменения степени замещения x .

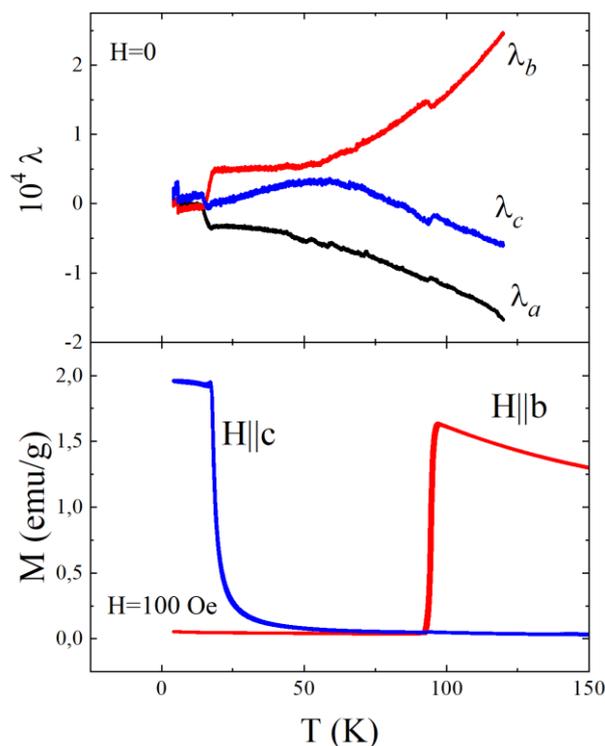


Рис. 1. Температурные зависимости относительной деформации λ и намагниченности M монокристалла $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ с $x=0.05$ (кристаллографические оси определены в системе $Rnma$)

Как видно из результатов измерений относительной деформации, в температурах фазовых переходов также наблюдаются аномалии теплового расширения, что обусловлено изменением магнитного порядка и возникновением спонтанной магнитострикции.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10026, <https://rscf.ru/project/23-22-10026/>, Красноярского краевого фонда науки.

Список использованной литературы:

1. A. Podlesnyak, S. Nikitin, and G. Ehlers, Low-energy spin dynamics in rare-earth perovskite oxides// Journal of Physics: Condensed Matter – 2021 – 33 – 403001.
2. A. V. Kimel, A. Kirilyuk, P. A. Usachev, R. V. Pisarev, A. M. Balbashov & Th. Rasing, Ultrafast non-thermal control of magnetization by instantaneous photomagnetic pulses.// Nature – 2005 – 435.7042: 655-657.
3. S. Artyukhin, M. Mostovoy, N. P. Jensen, et al, Solitonic lattice and Yukawa forces in the rare-earth orthoferrite TbFeO_3 //Nat. Mater. – 2012 – 11 – 694.
4. К.А. Шайхутдинов, С.А. Скоробогатов, Ю.В. Князев, Т.Н. Камкова, А. Д. Васильев, С.В. Семенов, М.С. Павловский, А.А. Красиков. Управление температурой спин-переориентационного перехода в монокристаллах ортоферритов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$. // ЖЭТФ, т. 165, №5, с.1-15 (2024).

УДК 537.622.5

Намагниченность твердых растворов антиферромагнетиков $Ni_{3-x}Co_xV_2O_6$ с конкурирующей ориентацией осей анизотропии**Софронова С.Н.**

к.ф.-м.н., доцент, Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Великанов Д.А.

д.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Карташев А.В.

к.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Павловский М.С.

к.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Мошкина Е.М.

к.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Чернышев А.В.

аспирант, Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

***Аннотация.** Работа посвящена исследованию магнитных свойств ряда твердых растворов $Ni_{3-x}Co_xV_2O_6$ со структурой котаита, где $x = 0; 0,19; 0,6; 0,93; 2$. Соединения $Ni_3V_2O_6$ и $Co_3V_2O_6$ являются антиферромагнетиками, при этом легкая ось намагничивания в этих соединениях совпадает с кристаллографическими направлениями c и b , соответственно. Обнаружено, что в твердом растворе $Ni_{2,81}Co_{0,19}V_2O_6$ появляется вторая особенность в низкотемпературной области, при этом в других твердых растворах второй особенности в низкотемпературной области не наблюдается. При концентрации ионов кобальта $x > 0,9$ магнитные моменты ориентируются преимущественно вдоль оси b .*

***Ключевые слова:** антиферромагнетики, легкая ось намагничивания, твердые растворы*

Magnetization of solid solutions of anti-ferro-magnets $Ni_{3-x}Co_xV_2O_6$ with competing orientation of anisotropy axes**Sofronova S.N.**

Dr.Sc., Associate Professor, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Velikanov D.A.

Dr.Sc., Senior Researcher, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Kartashev A.V.

Dr.Sc., Senior Researcher, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Pavlovskii M.S.

Dr.Sc., Senior Researcher, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Moshkina E. M.

Dr.Sc., Senior Researcher, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Chernyshev A.V.

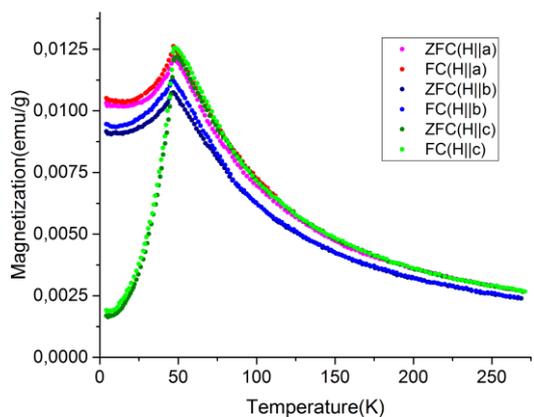
postgraduate student, L. V. Kirensky Institute of Physics FRC KSC SB RAS

Annotation. *The work is present the study of the magnetic properties of $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ solid solutions with the kotoite structure, where $x = 0; 0.19; 0.6; 0.93; 2$. The compounds $Ni_3B_2O_6$ and $Co_3B_2O_6$ are antiferromagnets, and the easy axis of magnetization in these compounds coincides with the crystallographic directions c and b , respectively. It was found that in the $Ni_{2.81}Co_{0.19}B_2O_6$ solid solution a second feature appears in the low-temperature region, while in other solid solutions the second feature in the low-temperature region is not observed. When the cobalt ion concentration $x > 0.9$, the magnetic moments are oriented predominantly along the b axis.*

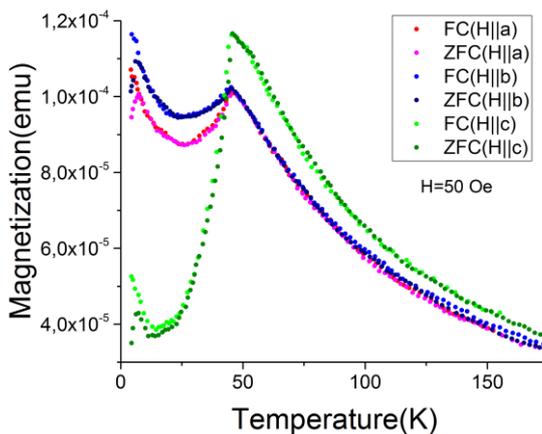
Keywords: *antiferromagnets, easy axis of magnetization, solid solutions*

Твердые растворы антиферромагнетиков со смешанной анизотропией можно рассматривать как новый способ управления свойствами однофазных магнетиков. Смещение магнитных ионов с несовпадающими одноионными анизотропиями приводит к образованию того, что можно рассматривать как композит на атомном уровне. Анизотропия, которая зависит от случайного распределения магнитных ионов по узлам кристаллической решетки, и обменные взаимодействия способствуют возникновению фрустраций, что может привести к так называемой наклонной антиферромагнитной фазе. В наклонной антиферромагнитной фазе упорядоченные моменты ориентированы в сторону от любой из легких осей, наблюдаемых в стехиометрических соединениях [1-3].

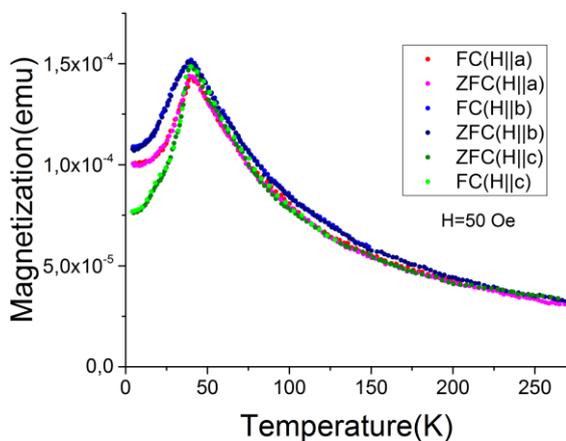
Твердые растворы $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ относятся к антиферромагнетикам со смешанной анизотропией. В стехиометрических соединениях $Ni_3B_2O_6$ и $Co_3B_2O_6$ легкая ось намагничивания совпадает с кристаллографическими направлениями c и b , соответственно. Таким образом, оси легкого намагничивания взаимозаменяемых магнитных ионов никеля и кобальта ортогональны друг другу. Ранее нами с помощью раствор-расплавного метода был получен ряд монокристаллов соединений $Ni_{3-x}Co_xB_2O_6$ со структурой котоита, где $x = 0; 0,19; 0,6; 0,93; 2$ [4]. Технология выращивания монокристаллов, структурная характеристика полученных образцов приведена в [4]. В данной работе приведено исследование магнитных свойств полученных соединений. На рис. 1 приведены ориентационные температурные зависимости намагниченности всех шести составов, снятые на вибрационном магнитометре [5] в поле $H = 50$ Ое в режимах охлаждения в поле (FC) и охлаждения без поля (ZFC).



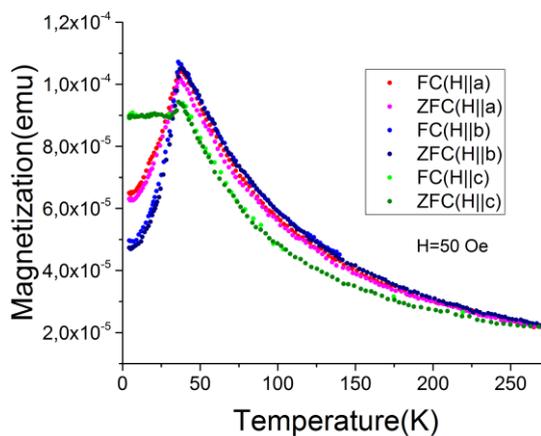
а)



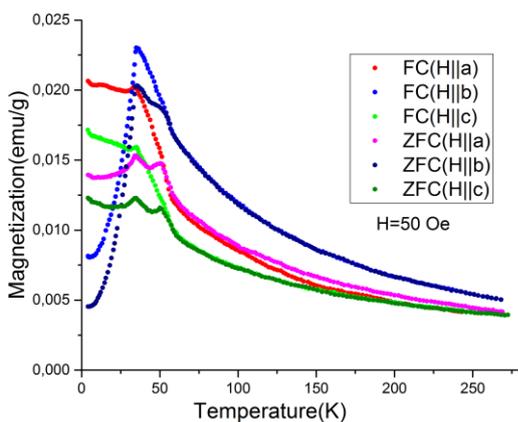
б)



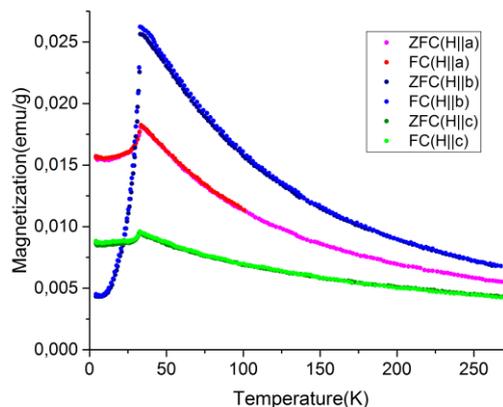
в)



г)



д)



е)

Рис. 1. Ориентационные температурные зависимости намагниченности, снятые в поле $H=50$ Oe в режимах охлаждения в поле (FC) и охлаждения без поля (ZFC) для $Ni_3B_2O_6$ (а), $Ni_{2.81}Co_{0.19}B_2O_6$ (б), $Ni_{2.4}Co_{0.6}B_2O_6$ (в), $Ni_{2.07}Co_{0.93}B_2O_6$ (г), $NiCo_2B_2O_6$ (д) и $Co_3B_2O_6$ (е).

Как видно из рис. 1, в соединениях $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Ni}_{2.81}\text{Co}_{0.19}\text{V}_2\text{O}_6$ ось легкого намагничивания совпадает с кристаллографическим направлением c . Однако, при включении в состав небольшой ($x=0,19$) доли ионов кобальта в низкотемпературной области возникает еще одна особенность, которая не наблюдается в составах с большим содержанием ионов кобальта. В соединениях $\text{NiCo}_2\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_6$ ось легкого намагничивания совпадает с кристаллографическим направлением b . Интересно отметить, что в $\text{NiCo}_2\text{V}_2\text{O}_6$ на намагниченности, снятой в режиме охлаждения без поля есть особенности выше температуры магнитного упорядочения, тогда как на намагниченности, снятой в режиме охлаждения в поле, таких особенностей не наблюдается. В соединениях $\text{Ni}_{2.4}\text{Co}_{0.6}\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Ni}_{2.07}\text{Co}_{0.93}\text{V}_2\text{O}_6$ магнитные моменты не ориентированы вдоль одной из кристаллографических осей, в этих составах возможно возникновение наклонной антиферромагнитной фазы.

Учет спин-орбитального взаимодействия при расчете энергии ферромагнитного состояния с помощью программного пакета Wien2k показывает, что в стехиометрических соединениях $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_6$ легкая ось намагничивания совпадает с кристаллографическими направлениями c и b , соответственно, что согласуется с экспериментальными данными. В $\text{Ni}_2\text{CoV}_2\text{O}_6$ согласно теоретическим расчетам наиболее выгодно магнитным моментам ориентироваться вдоль направления b , что также отчасти согласуется с экспериментальными исследованиями намагниченностями: в соединении $\text{Ni}_{2.07}\text{Co}_{0.93}\text{V}_2\text{O}_6$ намагниченность перпендикулярна кристаллографической оси c , а намагниченность лежит в плоскости ab .

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, проект № 23-12-20012 (<https://rscf.ru/project/23-12-20012/>).

Список использованных источников:

1. Fishman S., Aharony A. Phase diagrams of multicritical points in randomly mixed magnets with mixed anisotropies // *Phys. Rev. B.* – 1978. – № 18. – P. 3507-3520.
2. Oguchi T., Ishikawa T. Theory of a mixture of two anisotropic antiferromagnets with different easy axis // *Journal of the Physical Society of Japan.* – 1978. – № 45. – P. 1213
3. Mano H. Possible phase diagrams of systems with competing anisotropies // *Prog. Theo. Phys. Suppl.* – 1990. – № 101. – P. 597
4. Sofronova S., Moshkina E., Chernyshev A. [et al] Crystal growth and cation order of $\text{Ni}_{3-x}\text{Co}_x\text{V}_2\text{O}_6$ oxyborates // *Crysengcomm.* – 2024. – in print
5. Velikanov D.A. High-sensitivity measurements of the magnetic properties of materials at cryogenic temperatures // *Inorg. Mater. Appl. Res.* – 2020. – № 11. – P. 801–808

УДК 538.955

Метамagnetизм зонных электронов, вызванный гигантскими сингулярностями ван Хова плотности электронных состояний

Василевский Ф.А.

инженер-исследователь, ИФМ УрО РАН

Игошев П.А.

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ИФМ УрО РАН

Аннотация. Исследуется зонный метамagnetизм в модели Хаббарда для различных электронных спектров, имеющих гигантские сингулярности ван Хова плотности электронных состояний, что обеспечивает ее сильную положительную кривизну как функции энергии. Обнаружен и исследован метамagnetный переход в случае, когда уровень Ферми расположен вблизи положения особенности ван Хова. Исследованы температурные зависимости намагниченности и восприимчивости в зависимости от электронной концентрации. Построена фазовая диаграмма в переменных концентрация-кулоновское взаимодействие.

Ключевые слова: зонный метамagnetизм, модель Хаббарда, сингулярности ван Хова, магнитные фазовые переходы первого рода

Metamagnetism of itinerant electrons caused by giant van Hove singularities in the density of states

Vasilevskiy F.A.

Research Engineer, Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences

Igoshev P.A.

Ph.D., Senior Researcher, Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences

Annotation. Itinerant metamagnetism is investigated in the Hubbard model for various electronic spectra having giant van Hove singularities of the density of states, which ensures its strong positive curvature as a function of energy. A metamagnetic transition has been discovered and investigated in the case when the Fermi level is located near the position of the van Hove singularity. The temperature dependences of magnetization and susceptibility depending on the electron concentration are investigated. A phase diagram is constructed in the concentration-Coulomb interaction variables.

Keywords: Itinerant metamagnetism, Hubbard model, van Hove singularities, magnetic first order phase transitions.

Согласно критерию Стонера, необходимым условием ферромагнитного упорядочения в материалах с коллективизированными электронами (металлах) является высокое значение плотности электронных состояний (ПЭС) $\rho(\epsilon)$ на уровне Ферми E_F : $U\rho(E_F) > 1$, где U — параметр кулоновского взаимодействия. При этом хорошо известно, что критерий Стонера существенно недооценивает критическое U , при котором может формироваться ферромагнитный порядок [1]. Учет корреляционных эффектов был выполнен в рамках функциональной ренормгруппы для невырожденной модели Хаббарда для гранецентрированной кубической решетки (ГЦК) [2]. Было показано, что экранирование электрон-электронного взаимодействия электронов в частично-частичном канале приводит к подавлению ферромагнетизма в том случае, когда плотность состояний недостаточно велика в окрестности уровня Ферми. Этот факт

приводит к существенному усилению критерия ферромагнетизма в невырожденной модели Хаббарда, которому можно удовлетворить лишь в том случае, когда плотность электронных состояний содержит гигантскую (для трехмерных решеток) особенность ван Хова [3-5].

Зонный метамагнетизм представляет собой явление, заключающееся скачкообразном изменении состояния зонного магнетика, сопровождающимся изменением его намагниченности, под действием внешнего магнитного поля и соответствует фазовому переходу первого рода [6]. Условием для возникновения метамагнетизма является положительная кривизна плотности состояний $\rho(\epsilon)$ как функции энергии ($d^2\rho/d\epsilon^2 > 0$) в окрестности уровня Ферми [6]. Одним из таких механизмов может быть наличие сингулярностей ван Хова в электронном спектре [3]. Это обстоятельство делает задачу об определении условий метамагнитного перехода для того случая, когда уровень Ферми находится вблизи выраженной (гигантской) особенности ван Хова особенно актуальной.

В работе мы сравниваем характер метамагнитного фазового перехода для различных решеток: (1) для ГЦК решетки с различным $\tau = t/t'$ (t — интеграл переноса для ближайших соседей, t' — для следующих за ближайшими), при значениях $\tau = -0.52$ и $\tau = -0.54$ плотность состояний будет иметь сильную кривизну и особенность в виде плато ван Хова, см. рис. 1 [3]; (2) квадратная решетка с анизотропным спектром в приближении ближайших и следующих за ближайшими соседями, в котором интегралы переноса между ближайшими соседями зависят от направления, что обеспечивает возможность возникновения двух пиков ПЭС и области между ними с большой кривизной; (3) бесконечномерная ГЦК решеткой, имеющая сингулярность ван Хова плотности состояний на дне зоны $\epsilon = 0$ [7].

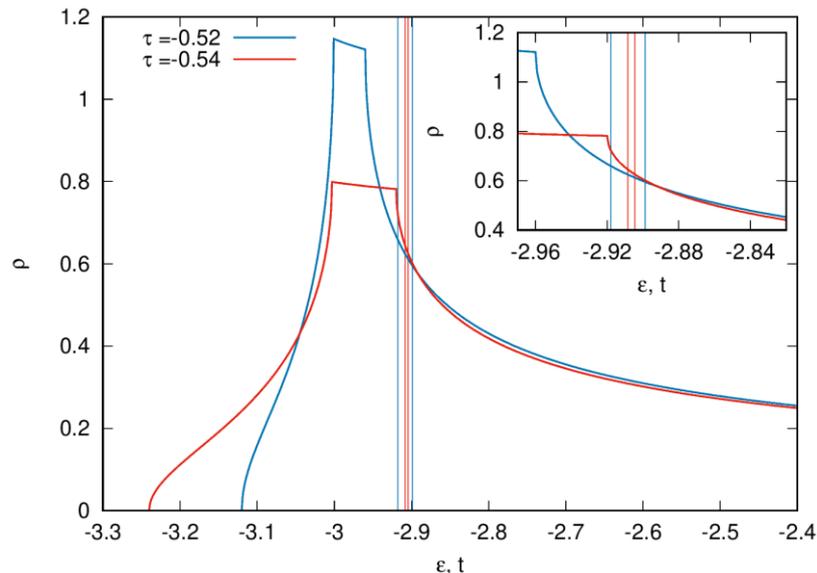


Рис. 1 Плотность состояний $\rho(\epsilon)$ для ГЦК решетки при $\tau = -0.52$ и $\tau = -0.54$.

Исследуя такую модель в приближении среднего поля, получим систему уравнений для нахождения магнитных свойств [1]. Эта система решалась численно относительно намагниченности m и химпотенциала μ при заданных значениях для кулоновского взаимодействия U , электронной концентрации n и магнитного поля h . Для метамагнетизма необходимо наличие двух минимумов свободной энергии $F(m)$, соответствующих парафазе m_{PM} и ферромагнитной фазе m_{FM} , причем в нулевом поле $F(m_{PM}) < F(m_{FM})$, тогда при определенном значении поля минимумы становятся равны и происходит фазовый переход, сопровождающийся скачкообразным изменением намагниченности.

Исследуем зависимость $m = m_i(n, h_c(n))$, получим зависимость намагниченности от поля, показанную на рис. 2 для ГЦК решетки (а) для $\tau = -0.52$ и (б) для $\tau = -0.54$. Данная зависимость имеет характерный для метамагнитного фазового перехода вид: при определенном значении внешнего магнитного поля m изменяется скачком. Видно, что зонный метамагнетизм

сохраняется и при увеличении температуры, но концентрационный интервал, для которого наблюдается скачок намагниченности, становится заметно меньше.

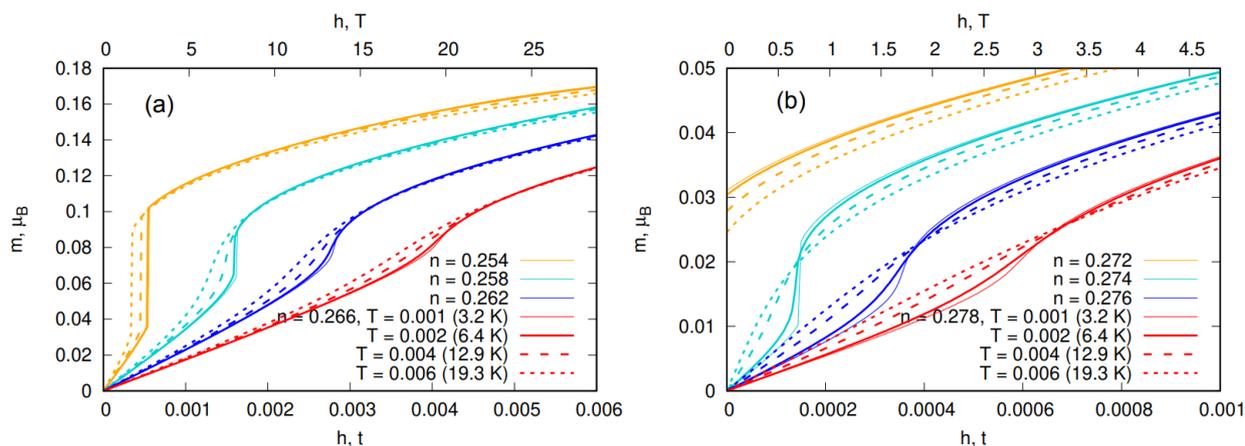


Рис. 2. Зависимость намагниченности от магнитного поля при различных значениях концентрации и температуры для ГЦК решетки $U = 1.5$. (a) $\tau = -0.52$ (b) и $\tau = -0.54$.

Были вычислены коэффициенты эффективного функционала Ландау для свободной энергии $F_{\text{Landau}}(m)$ как функции намагниченности. Показано, что применение теории Ландау для описания метамагнетизма существенно ограничено из-за особенности ван Хова плотности электронных состояний.

Таким образом, в работе был исследован зонный метамагнетизм в модели Хаббарда для ГЦК решетки для плотностей состояний, имеющих особенность в виде узкого плато ван Хова, что обеспечивает сильную кривизну в зависимости $\rho(\epsilon)$. Сравнивая результаты, полученные для различных спектров, можно определить как кривизна плотности состояний влияет на характер поведения перехода и сделать вывод, что с увеличением кривизны температурный и концентрационный интервалы, в которых реализуется метамагнитный фазовый переход, увеличиваются.

Список использованных источников:

1. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. – Мир, Москва, 1988. – P. 287.
2. Igoshev P., Katanin A. Ferromagnetic instability in itinerant fcc lattice electron systems with higher-order van Hove singularities: Functional renormalization group study // *Physical Review B*. – 2023. – Vol. 107, – no. 11. – P. 115105.
3. Igoshev P., Irkhin V. Y. Giant density-of-states van hove singularities in the face-centered cubic lattice // *Physics Letters A*. – 2022. – Vol. 438. – P. 128107.
4. Igoshev P., Irkhin V. Y. Giant Van Hove Density of States Singularities and Anomalies of Electron and Magnetic Properties in Cubic Lattices // *Physics of Metals and Metallography*. – 2019. – Vol. 120. – P. 1282–1290.
5. Игошев П. А., Ирхин В. Ю. Топология электронного спектра и гигантские особенности плотности состояний в кубических решетках // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2019. – Vol. 110, – no. 11. – P. 741–747.
6. Levitin R., Markosyan A. S. Itinerant metamagnetism // *Soviet Physics Uspekhi*. – 1988. – Vol. 31, – no. 8. – P. 730.
7. Ulmke M. Ferromagnetism in the Hubbard model on fcc-type lattices // *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*. – 1998. – Vol. 1. – P. 301–304.

УДК 537.638.5, 537.634.2

Структура, магнитострикция, магнитные и магнитотепловые свойства нестехиометрических соединений ErFe_2Mn_x **Инишев А.А.**

н.с., Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Герасимов Е.Г.

к.ф.-м.н., в.н.с., Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Терентьев П.Б.

к.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Гавико В.С.

к.ф.-м.н., в.н.с., Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Барташевич А.М.

м.н.с., Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Мушников Н.В.

д.ф.-м.н., академик РАН, директор института, Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

***Аннотация.** Исследованы кристаллическая структура, магнитострикция, магнитные и магнитотепловые свойства новых нестехиометрических соединений ErFe_2Mn_x ($0 \leq x \leq 0.6$). Показано, что сплавы с $x \leq 0.4$ однофазны и кристаллизуются в структуру типа MgSi_2 . Обнаружено, что с ростом концентрации марганца в ErFe_2Mn_x происходит значительное уменьшение температуры Кюри. На основе данных магнитных измерений и теплоемкости определены значения магнитокалорического эффекта (ΔS и ΔT) в соединениях. Продемонстрировано, что увеличение содержания Mn в ErFe_2Mn_x приводит к значительному увеличению (до 39%) величины анизотропной магнитострикции при 77 К в магнитном поле 18 кЭ.*

***Ключевые слова:** редкоземельные интерметаллиды, магнитное упорядочение, магнитокалорический эффект, магнитострикция*

Structure, magnetostriction, magnetic and magnetothermal properties of the non-stoichiometric ErFe_2Mn_x compounds**Inishev A.A.**

Research Associate, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Gerasimov E.G.

PhD, Leading Researcher, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Terentyev P.B.

PhD, Senior Researcher, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Gaviko V.S.

PhD, Leading Researcher, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Bartashevich A.M.

Junior Researcher, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Mushnikov N.V.

Doctor of Science, Academician RAS, Director, M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

Annotation. *Crystal structure, magnetostriction, magnetic and magnetothermal properties have been studied for novel non-stoichiometric $ErFe_2Mn_x$ ($0 \leq x \leq 0.6$) compounds. It is shown that for $x \leq 0.4$ the compounds crystallize with $MgCu_2$ -type structure. It was found that the Curie temperature decreases significantly with increasing manganese concentration in $ErFe_2Mn_x$. The magnetocaloric effect (ΔS and ΔT) in the compounds was determined based on the magnetic and heat capacity measurements. It has been demonstrated that increasing the Mn content in $ErFe_2Mn_x$ leads to a significant increase (up to 39%) of anisotropic magnetostriction value at 77 K in magnetic field of 18 kOe.*

Keywords: *rare-earth intermetallics, magnetic ordering, exchange interactions, magnetocaloric effect, magnetostriction*

Интерметаллические соединения RFe_2 (R – редкоземельный элемент) с кристаллической структурой типа $MgCu_2$ интенсивно исследуются многие десятилетия, поскольку они сочетают в себе относительно простую структуру и уникальные магнитные свойства, такие как гигантская магнитострикция [1] и большой магнитокалорический эффект [2].

Недавно было обнаружено, что существуют новые нестехиометрические соединения RM_2Mn_x (R – редкоземельный элемент, M – 3d-переходный элемент), в которых соотношение числа R и M равно 1:3, при кристаллизации образуют структуру типа $MgCu_2$, такую же, как и сплавы, в которых соотношение числа R и 3d-переходных атомов равно 1:2. В RM_2Mn_x часть атомов Mn занимает позиции атомов M (16d), оставшаяся часть занимает позиции атомов редкоземельных элементов (8a) [3-6]. В данных работах было показано, что концентрационные границы существования нестехиометрических фаз RM_2Mn_x со структурой типа $MgCu_2$ существенно зависят от типа редкоземельных и 3d переходных элементов. Установлено также, что температура Кюри RM_2Mn_x немонотонно зависит от концентрации Mn и достигает максимума в области концентраций $x < 1$.

В настоящей работе мы изучили структурные, магнитные, магнитотепловые свойства и магнитострикцию нестехиометрических соединений $ErFe_2Mn_x$.

Нестехиометрические соединения $ErFe_2Mn_x$ при концентрациях Mn $x < 0.4$ кристаллизуются в структуру типа $MgCu_2$. При дальнейшем увеличении концентрации Mn ($x > 0.4$) появляется значительное количество дополнительной фазы типа Th_6Mn_{23} . Образование $ErFe_2Mn_x$ со структурой типа $MgCu_2$ происходит, по-видимому, как и в случае других нестехиометрических соединений RM_2Mn_x , вследствие того, что марганец занимает позиции как Er (8a), так и Fe (16d). Диапазон концентраций однофазных соединений $ErFe_2Mn_x$ соответствует правилу 7.2 \AA , введенному в [7], где была установлена зависимость между максимальной концентрацией Mn и параметром решетки исходного соединения RM_2 . С добавлением марганца параметр решетки резко возрастает от $a = 7.289 \text{ \AA}$ для бинарного $ErFe_2$ до значения $a = 7.306 \text{ \AA}$ для соединения с концентрацией марганца $x = 0.4$.

Температура Кюри постепенно снижается с 575 К для $ErFe_2$ до 430 К для $ErFe_2Mn_{0.4}$.

Согласно модели молекулярного поля для двухподрешеточного ферримагнетика, наиболее сильные обменные взаимодействия наблюдаются в 3d-подрешетке (Fe-Fe и Mn-Fe). Эти обменные взаимодействия уменьшаются при легировании Mn, что может объяснить снижение температуры Кюри. Величина спонтанного магнитного момента μ_s изменяется немонотонно. Спонтанный магнитный момент уменьшается при добавлении Mn до $x = 0.2$ из-за уменьшения магнитного момента подрешетки Er. При $x > 0.2$ μ_s увеличивается, что указывает на частичное антиферромагнитное упорядочение в 3d-подрешетке.

Используя температурную зависимость намагниченности в магнитном поле 10 кЭ, было оценено изменение магнитной энтропии $\Delta S_m(T)$ для соединений ErFe_2Mn_x по термодинамическому соотношению Максвелла:

$$\Delta S_m(T, H) = \int_{H_1}^{H_2} (\partial M(T, H) / \partial T)_H dH \quad (1)$$

Максимальное изменение энтропии при изменении магнитного поля от 0 до 10 кЭ составляет -0.3 Дж/кг·К для $\text{ErFe}_2\text{Mn}_{0.4}$.

Адиабатическое изменение температуры в магнитном поле можно рассчитать, используя выражение:

$$\Delta T(T)_{\Delta H} = -\frac{T}{C_p(T, H=0)} \Delta S_m. \quad (2)$$

Адиабатическое изменение температуры составляет $0.3 - 0.5$ К в диапазоне температур от 100 К до 300 К при изменении магнитного поля $\Delta H = 10$ кЭ. Соединения могут быть использованы в магнитном охлаждении для непрерывного охлаждения от комнатной температуры до криогенных температур.

Добавление Mn приводит к значительному увеличению магнитострикции ErFe_2Mn_x . Значение анизотропной магнитострикции в магнитном поле 18 кЭ при температуре 77 К для $\text{ErFe}_2\text{Mn}_{0.4}$ на 39% выше по сравнению с исходным соединением ErFe_2 . В то же время значение константы анизотропии уменьшается при увеличении содержания Mn. Частичная замена атома редкоземельного элемента атомами Mn в нестехиометрических соединениях RM_2Mn_x открывает новые возможности для уменьшения магнитной анизотропии и увеличения магнитострикции.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00140, <https://rscf.ru/project/23-22-00140/>

Список использованных источников:

1. Koon N.C., Schindler A.I., Carter F.L. Giant magnetostriction in cubic rare earth-iron compounds of the type RFe_2 // *Physics Letters A*. – 1971. – № 37(5). – 413.
2. Nikitin S.A., Talalaeva E.V., Chernikova L.A., Andreenko A. S. Magnetocaloric effect in compounds of rare-earth metals with iron // *ЖЭТФ*. – 1974. – № 38(5). – 1028.
3. Wang J.L., Marquina C., Ibarra M. R., Wu G. H. Structure and magnetic properties of RNi_2Mn compounds (R=Tb, Dy, Ho, and Er) // *Phys. Rev. B*. – 2006. – № 73. – 094436-1.
4. Gerasimov E.G., Mushnikov N.V., Terentev P.B., Gaviko V.S., Inishev A.A. Magnetic properties of the off-stoichiometric GdNi_2Mn_x alloys // *J. Alloys and Compd.* – 2013. – № 571. – 132.
5. Gerasimov E.G., Mushnikov N.V., Inishev A.A., Terentev P.B., Gaviko V.S. Structure, magnetic

and magnetothermal properties of the non-stoichiometric ErCo_2Mn_x alloys // J. Alloys and Compd. – 2016. – № 680. – 359.

6. Mushnikov N.V., Gerasimov E. G., Terentev P. B., Gaviko V. S., Inishev A. A. Magnetic properties of nonstoichiometric 4f–3d intermetallics // Physics of Metals and Metallography. – 2019. – № 120. – 1347.

7. Bartashevich A.M., Gerasimov E.G., Mushnikov N.V., Inishev A.A., Terentev P.B., Gaviko V.S., Kolodkin D.A., Kulesh N.A. Structural and magnetoelastic properties of non-stoichiometric TbFe_2Mn_x Laves phase // Journal of Alloys and Compounds. – 2022. – № 923. – 166360.

УДК 537.638.5

Обратимость магнитокалорического эффекта в сплавах на основе $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$

Каманцев А.П.

к.ф.-м. н., старший научный сотрудник Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Кошкидько Ю.С.

к.ф.-м. н., научный сотрудник Института низких температур и структурных исследований им. В. Тшебятковского ПАН

Амиров А.А.

к.ф.-м. н., старший научный сотрудник Института физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Алиев А.М.

к.ф.-м. н., главный научный сотрудник Института физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Аннотация. Исследован магнитокалорический эффект в образцах сплавов на основе $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ в адиабатических ΔT и изотермических ΔQ условиях. Измерения проводились в магнитном поле $\mu_0 H = 1,8$ Тл. Образцы показали высокую обратимость ΔQ -эффекта, что критически важно для технологии магнитного охлаждения. Образец $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$ демонстрирует высокие значения ΔQ -эффекта с максимальным $\Delta Q = 3400$ Дж/кг вблизи $T_C = 275$ К, что в 2,5 раза превосходит значения для чистого поликристаллического Gd.
Ключевые слова: магнитокалорический эффект, сплавы La-Fe-Si, сильные магнитные поля.

Reversibility of magnetocaloric effect in alloys based on $\text{La}(\text{Fe},\text{Si})_{13}$

Kamantsev A. P.

Candidate of physical and mathematical Sciences, Senior Researcher, Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS

Koshkid'ko Yu. S.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Institute of Low Temperature and Structure Research

Amirov A.A.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Amir Khanov Institute of Physics, Dagestan Federal Research Centre of RAS

Aliev A.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head Researcher, Amirkhanov Institute of Physics, Dagestan Federal Research Centre of RAS

Annotation. The magnetocaloric effect in samples of alloys based on $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ was studied under adiabatic ΔT and isothermal ΔQ conditions. The measurements were carried out in a magnetic field $\mu_0 H = 1.8 \text{ T}$. The samples showed high reversibility of the ΔQ effect, which is critical for magnetic cooling technology. The $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$ sample demonstrates high values of the ΔQ effect with a maximum $\Delta Q = 3400 \text{ J/kg}$ near $T_C = 275 \text{ K}$, which is 2.5 times higher than the values for pure polycrystalline Gd.

Keywords: magnetocaloric effect, La-Fe-Si alloys, high magnetic fields

Усилия множества исследовательских групп направлены на разработку технологии магнитного охлаждения на основе твердотельных магнитных материалов с фазовыми переходами (ФП). Ведутся поиски эффективных и дешевых материалов, например, перспективными являются сплавы системы La-Fe-Si [1]. Магнитные интерметаллические сплавы $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ широко исследуют из-за обнаруженного в них значительного магнитокалорического эффекта (МКЭ), который в интервале концентраций $1.0 \leq x \leq 1.8$ наблюдается вблизи комнатной температуры [2]. Достоинством данного семейства сплавов является возможность изменять температуру Кюри T_C в широком диапазоне температур как изменяя x , так легированием атомами Ce, Pr, Nd, Cr, Mn.

Прямые измерения МКЭ в сплаве $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ в адиабатических условиях в магнитном поле $\mu_0 H = 1,9 \text{ Тл}$ проводились в [3], при этом максимальное значение МКЭ составило $\Delta T = 7 \text{ К}$ при $T_0 = 194 \text{ К}$ в режиме охлаждения образца (Рис. 1а). Данные величины МКЭ являются высокими, так как значительно (на 2,5 К) превышают значения МКЭ для поликристаллического Gd в том же поле при комнатной температуре [4].

Одним из путей изменения температуры магнитного ФП в сплавах на основе $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ также является гидрирование [5]. Гидрированные соединения $\text{La}(\text{Fe}, \text{Mn}, \text{Si})_{13}\text{H}_y$ имеют T_C в области комнатных температур и показывают высокие значения МКЭ вблизи этого ФП [5].

Результаты прямых измерений МКЭ в сплаве $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$ в адиабатических условиях в магнитном поле $\mu_0 H = 1,8 \text{ Тл}$ представлены на Рис. 1б, при этом максимальное значение МКЭ составило $\Delta T = 4,5 \text{ К}$ вблизи $T_C = 275 \text{ К}$ в режимах нагрева и охлаждения образца. Полученные величины МКЭ сравнимы со значениями МКЭ для Gd в том же поле при комнатной температуре [4].

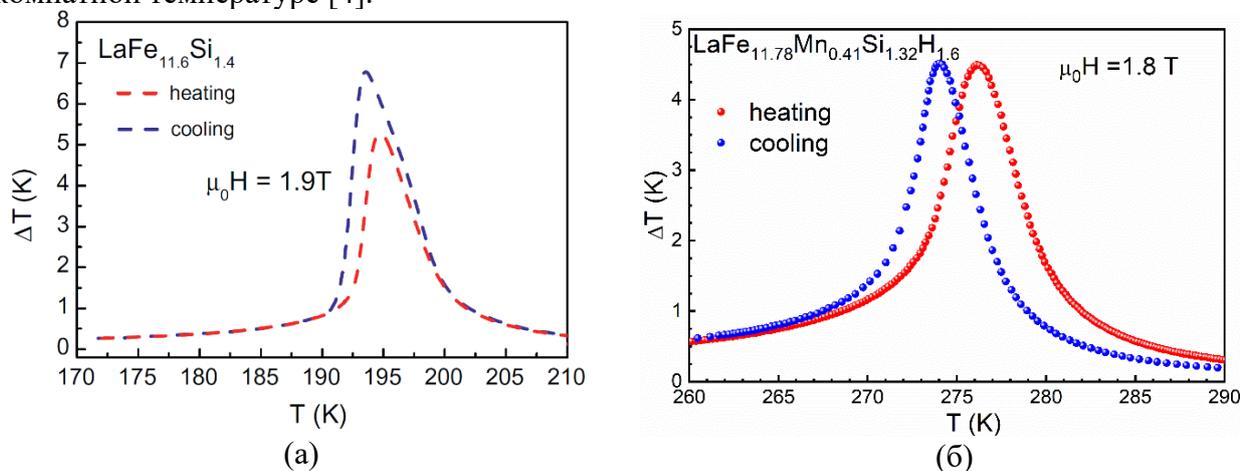


Рис. 1. Температурные зависимости адиабатического изменения температуры ΔT в: (а) сплаве $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$, отожженном при 1323 К в течение 7 суток, данные из [3], (б) сплаве $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$

Также были проведены прямые измерения изменения изотермического тепла – ΔQ в описанных образцах. Метод измерения ΔQ заключается в том, что измерение изменения температуры ΔT_b ведётся не на самом образце, а на массивном медном блоке с известной теплоемкостью C_b , не зависящей от магнитного поля, при этом блок приводится в хороший тепловой контакт с образцом [4]. Мы можем пренебречь теплотой, связанной с изменением температуры образца, если его масса m будет пренебрежимо мала по сравнению с массой блока $M_b \gg m$, тогда:

$$\Delta Q \approx \left| -\frac{M_b}{m} \cdot C_b \cdot \Delta T_b \right| \quad (1)$$

Результаты измерений изотермического МКЭ в образце $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ представлены на Рис. 2а. Максимумы ΔQ вблизи $T_C = 190$ К в режимах охлаждения и нагрева составили $\Delta Q = 3000$ Дж/кг в поле $\mu_0 H = 1,8$ Тл. Кроме того, на образце сплава $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ исследовался эффект второго включения магнитного поля при той же температуре. Из Рис. 2а видно, что ΔQ при втором включении поля изменялся незначительно.

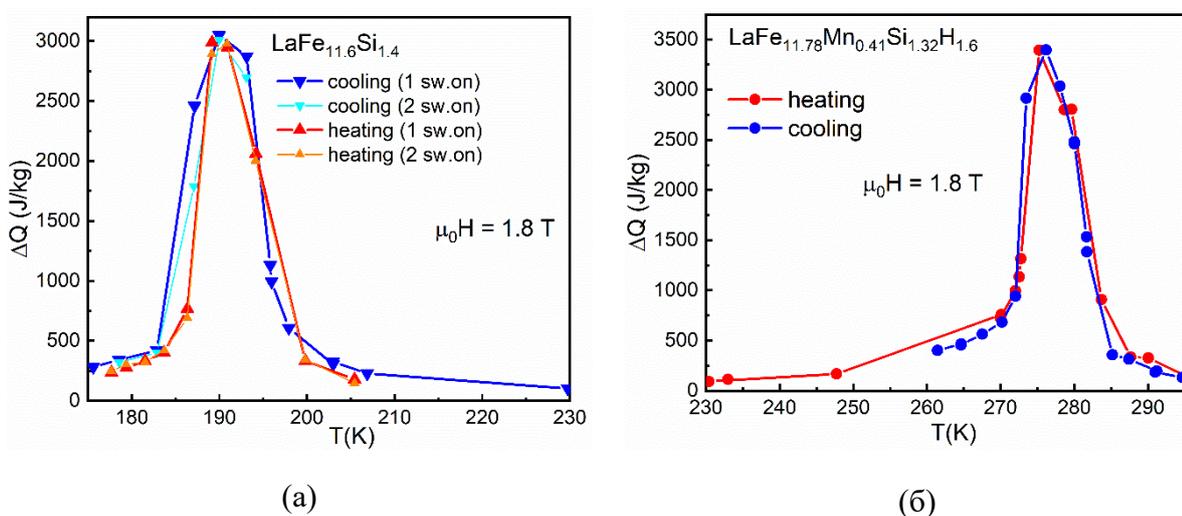


Рис. 2. Температурные зависимости изотермического тепла ΔQ в: (а) сплаве $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$, измерения для каждой температуры проводились 2 раза. (б) сплаве $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$

Результаты измерений изотермического МКЭ в образце $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$ представлены на Рис. 2б. Максимумы ΔQ вблизи $T_C = 275$ К в режимах охлаждения и нагрева образца составили $\Delta Q = 3400$ Дж/кг в магнитном поле $\mu_0 H = 1,8$ Тл. Полученные значения ΔQ являются высокими, так как в 2,5 раза превосходят значения для чистого Gd в таком же поле [4]. Полученные значения ΔQ для сплава $\text{LaFe}_{11.6}\text{Si}_{1.4}$ оказались несколько ниже, чем для сплава $\text{LaFe}_{11.78}\text{Mn}_{0.41}\text{Si}_{1.32}\text{H}_{1.6}$, что можно объяснить разницей в температурах магнитоструктурного ФП.

Работа выполнена в рамках госзадания ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН.

Список использованной литературы:

1. T. Gottschall, K.P. Skokov, M. Fries, et al. // Adv. Energ. Mater. – 2019. – Vol. 9, № 34. – p. 1901322.
2. S. Fujieda, A. Fujita, K. Fukamichi, // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 81, № 7. – pp. 1276–1278.
3. J. Liu, M. Krautz, K. Skokov, et al. // Acta Mater., – 2011. – Vol. 59, № 9. – pp. 3602–3611.
4. A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, et al. // Solid State Phenom. – 2015. – Vol. 233. – pp. 216–219.
5. I.A. Radulov, D.Yu. Karpenkov, K.P. Skokov., et al. // Acta Mater. – 2017. – Vol. 127. – pp. 389–399.

УДК 537.6/.8

**Усиление магнитоэлектрического эффекта в композите
 $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$** **Удод Л.В.**

н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СОРАН

Аплеснин С.С.

в.н.с., профессор, Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СОРАН

Ситников М.Н.

ст. преподаватель, СибГУ им. М.Ф. Решетнева

Романова О.Б.

с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СОРАН

Зеленов Ф.В.

аспирант СибГУ им. М.Ф. Решетнева

***Аннотация.** Работа посвящена исследованию влияния размера наночастиц $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ и BiFeO_3 в композите $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ на магнитоэлектрическое взаимодействие. Установлены линейный и квадратичный вклады в магнитоэлектрический (МЭ) эффект. Предложена модель для объяснения усиления МЭ эффекта за счет миграционной поляризации в муллите и линейного МЭ в феррите висмута.*

***Ключевые слова:** композитные материалы, магнитоэлектрический эффект, поляризация*

Enhancement of the magnetoelectric effect in the $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ composite**Udod L.V.**

PhD, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Aplesnin S.S.

Dr.Sc., professor, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Sitnikov M.N.

PhD, Reshetnev Siberian State University of Science and Technology

Romanova O.B.

PhD, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Zelenov F.V.

graduate student, Reshetnev Siberian State University of Science and Technology

***Annotation.** The work is dedicated study of effect of the size of $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ and BiFeO_3 nanoparticles on the magnetoelectric interaction in the $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ composite with a percentage ratio of 67/33 has been studied. Linear and quadratic contributions to the magnetoelectric effect have been established. Model have been proposed to explain the enhancement of the magnetoelectric effect via the migration polarization in mullite and linear magnetoelectric effect in bismuth ferrite.*

Keywords: *composite materials, magnetoelectric effect, polarization*

Современные многофункциональные устройства требуют новых материалов, которые должны обладать свойствами мультиферроиков. Интерес к исследованию мультиферроиков связан с обнаружением в них гигантских значений магнитоэлектрического (МЭ) эффекта [1], который может быть использован в новейших электронных устройствах, таких как память, сенсорные датчики, солнечные батареи и т. д. К этому классу соединений относится хорошо известный феррит висмута BiFeO_3 , который обладает сильной взаимосвязью между магнитной и ферроэлектрической подсистемами, высокой температурой магнитного $T_N=643$ К и сегнетоэлектрического $T_c=1083$ К упорядочения [2]. Кристаллическая структура BiFeO_3 допускает сосуществование антиферромагнитной и сегнетоэлектрической фаз, однако магнитоэлектрические явления (МЭ) в нем не проявляются по причине существования пространственно модулированной спиновой структуры [3]. Разрушение пространственно-модулированной структуры внешним магнитным полем, замещением ионов висмута редкоземельными и 3d ионами приводит к ферромагнетизму и МЭ взаимодействию [4]. В композитных соединениях пространственно-модулированная структура становится энергетически невыгодной. Так, нанокompозиты на основе перовскитоподобного ортоферрита висмута BiFeO_3 и муллитоподобного феррита $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ демонстрируют эффекты, связанные с обменными взаимодействиями на границе раздела этих фаз [5]. В нанокompозитах BiFeO_3 (~90-94 %)- $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ (~10-6 %) проявляется аномальное смещение exchange bias (~300–600 Oe) после охлаждения в нулевом магнитном поле. Такое поведение объясняется взаимодействием между ферромагнитным $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ с размером зерна 13-19 нм и BiFeO_3 со скошенной антиферромагнитной структурой с размером зерна 57-112 нм.

Целью данной работы является, определение индуцируемой электрической поляризации во внешнем магнитном поле в композите $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$, что должно привести к усилению МЭ эффекта.

Синтез композитного соединения $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ осуществлялся методом твердофазной реакции [6]. Согласно рентгеноструктурным данным синтезированный композит содержит $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ – 67 % и BiFeO_3 – 33 %. Порошковая рентгенограмма снята на дифрактометре D8 ADVANCE фирмы Bruker при комнатной температуре. В эксперименте использовался линейный детектор VANTEC и Cu-K α излучение. Средний размер кристаллитов $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ составляет 1.5-4.0 μm . Размеры зерен BiFeO_3 меньше разрешающей способности прибора 100 нм.

Магнитоэлектрическое взаимодействие $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ установили из индуцированной магнитным полем до 13 kOe электрической поляризации. На рис.1 представлена полевая зависимость индуцированной поляризации в магнитных полях. Параметр магнитоэлектрического взаимодействия меняет знак при температурах 80, 200, 240, 320, 360 К. Поляризация, индуцированная магнитным полем, описывается двумя слагаемыми:

$$P = aH + b \frac{H^2}{1+dH^2}, \quad (1)$$

где a , b , d — подгоночные параметры. Магнитоэлектрическое взаимодействие обусловлено спин-орбитальным взаимодействием с линейной зависимостью и квадратичной зависимостью от магнитного поля.

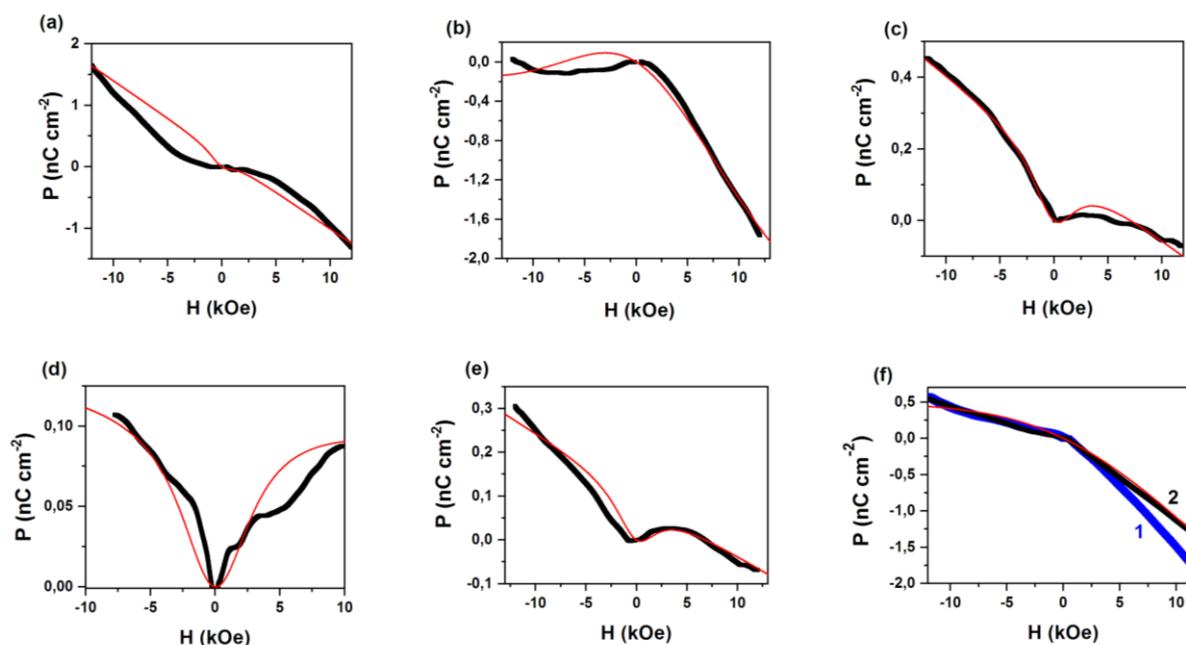


Рис. 1. Индуцированная магнитным полем электрическая поляризация при различных температурах: $T=80$ К (а), $T=120$ К (б), $T=240$ К (в), $T=300$ К (г), $T=320$ К (д), Кривая 1 соответствует $T=200$ К, кривая 2-300 (е). Кривые, выделенные красным цветом, соответствуют теоретическим расчетам (1).

Ниже 120 К линейный вклад в МЭ-эффект на порядок превышает квадратичный. В интервале температур 120–240 К линейный и квадратичный вклад незначительно различаются по величине, а выше 240 К преобладает квадратичный вклад в МЭ-эффект, обусловленный прыжковой проводимостью электронов в муллите. Возможно, что в этом диапазоне температур существуют ферроны, т.е. спины электронов проводимости поляризуют локализованные спины, а внешнее магнитное поле может изменить подвижность ферронов или спиновых поляронов. Качественно это подтверждается магнитной восприимчивостью композита $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ с широким максимумом в области магнитного фазового перехода $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ из антиферромагнитного состояния в парамагнитное [6]. При $T > 320$ К проводимость и подвижность в муллите возрастают и в зернах муллита индуцирует холловская разность потенциалов, пропорциональная квадрату напряженности магнитного поля. Электрический ток в муллите создается электрическим полем частиц BiFeO_3 в результате линейного магнитоэлектрического эффекта. Линейный коэффициент МЭ-взаимодействия имеет отрицательный знак ($a < 0$), как и у нанопроволок BiFeO_3 [7], во всем диапазоне температур и уменьшается при нагреве.

Этот эффект можно объяснить в рамках модели ядро-оболочка. Внешнее магнитное поле и линейный МЭ-эффект индуцируют электрическое поле в наночастицах феррита висмута, что приводит к электрической поляризации муллита при $T < 240$ К (рис. 2а). В результате общая поляризация композита увеличивается. При нагреве $T > 240$ К электрическое поле в феррите висмута вызывает миграционную поляризацию зерен муллита (рис. 2б). Изменение полярности магнитного поля вызывает изменение знака электрического поля и, следовательно, приводит к изменению знака поляризации муллита.

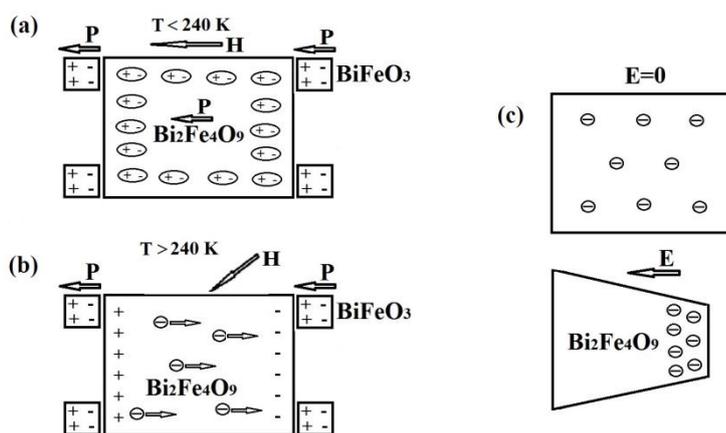


Рис 3. Дипольная поляризация композита $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$, индуцированная внешним магнитным полем (а). Линейный МЭ-эффект под действием магнитного поля индуцирует электрическое поле в наночастицах феррита висмута, что приводит к миграционной поляризации зерен муллита (б). Сжатие зерна $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ в электрическом поле выше комнатной температуры в результате электронной сжимаемости (в).

Работа выполнена при поддержке государственного задания Института физики им. Киренского.

Список использованных источников:

1. J. Wang, J. Neaton, H. Zheng, V. Nagarajan, S. Ogale, B. Liu, D. Viehland, V. Vaithyanathan, D. Schlom, U. Waghmare. Epitaxial BiFeO_3 multiferroic thin film heterostructures // Science. – 2003. – №. 299. – P. 1719.
2. P. Fischer, M. Polomska, I. Sosnowska, M. Szymanski. Temperature dependence of the crystal and magnetic structures of BiFeO_3 // J. Phys. C: Solid St. Phys. – 1980. - № 13. – P. 1931-40.
3. F. Gao, C. Cai, Y. Wang, S. Dong, X. Y. Qiu, G. L. Yuan, and Z. G. Liu. Preparation of La-doped BiFeO_3 thin films with Fe^{2+} ions on Si substrates // JAP. – 2006. - № 99. – P. 094105.
4. А.К. Звездин, А.Р. Пятаков. Фазовые переходы и гигантский магнитоэлектрический эффект в мультиферроиках // УФН. – 2004 - № 174. – С. 416.
5. Tuhin Maity, Sudipta Goswami, Dipten Bhattacharya, Saibal Roy. Superspin Glass Mediated Giant Spontaneous Exchange Bias in a Nanocomposite of BiFeO_3 - $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ // PRL. – 2013. - № 110. – P. 107201.
6. L.V. Udod, S.S. Aplesnin, M.N. Sitnikov, E.V. Eremin, M.S. Molokeev, A.V. Shabanov, O.B. Romanova, A.M. Kharkov. Structural and magnetic transitions in the $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9/\text{BiFeO}_3$ composite // Journal of Alloys and Compounds. – 2023.- № 958. – P. 170445.
7. F. Gao, Y. Yuan, K. F. Wang, X. Y. Chen, F. Chen, J.-M. Liu, Z. F. Ren. Preparation and photoabsorption characterization of Nanowires // Appl. Phys. Lett. – 2006. - № 89. – P.102506.

УДК 538.913

**Кинетические и магнитокалорические свойства в сплаве Гейслера
 $\text{Ni}_{50,5}\text{Mn}_{33,4}\text{In}_{5,6}\text{V}_{0,5}$ в близи точки Кюри**

Карпухин Д.А.

инженер ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Морозов Е.В.

н.с. ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Семенов Д.С.

инженер ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Коледов В.В.

д.ф.-м.н., в.н.с. ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Шавров В.Г.

д.ф.-м.н., г.н.с., зав. лаб ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Мусабилов И.И.

с.н.с. Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

Алиев А.М.

к.ф.-м.н., зав. лаб Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Гамзатов А.Г.

к.ф.-м.н., Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

Абдулкадирова Н.З.

м.н.с., институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН

***Аннотация.** На сегодняшний день большое количество работ посвящено изучению физических эффектов при фазовых переходах (ФП) в твердотельных материалах [1-10]. Среди огромного разнообразия твердотельных материалов с ФП можно выделить магнетики, в которых, магнитные ФП часто сочетаются и взаимодействуют со структурными ФП [1-7]. Изучение материалов в неустойчивом состоянии, вблизи ФП затруднено отсутствием стандартных методов изучения термодинамических параметров вещества *in situ*, то есть в динамике, непосредственно в процессе ФП. Анализ современной литературы показывает, что кинетика процессов при ФП исследованы слабо [7,8]. Разработка новых методов изучения кинетики ФП открывает возможности для прикладного использования новых функциональных материалов с ФП в технологии сенсоров и актюаторов, приборостроении, при создании твердотельных холодильников и тепловых насосов для альтернативной энергетики и др. [9,10].*

***Ключевые слова:** сплавы Гейслера, фазовый переход, калорический эффект.*

Kinetic and magnetocaloric properties in the Geisler alloy Ni 50.5 Mn 33.4 In 5.6 V 0.5 near the Curie point

Karpukhin D.A.

Engineer of the IRE V.A. Kotelnikov of the Russian Academy of Sciences

Morozov E.V.

Research Associate IRE V.A. Kotelnikov of the Russian Academy of Sciences

Semenov D.S.

Engineer of the IRE V.A. Kotelnikov of the Russian Academy of Sciences

Koledov V.V.

Doctor of physical and mathematical Sciences of IRE named after V.A. Kotelnikov of the Russian Academy of Sciences

Shavrov V.G.

Doctor of physical and mathematical Sciences, head. of lab. V.A. Kotelnikov IRE Laboratory of the Russian Academy of Sciences

Musabirov I.I.

Senior Researcher Institute of Problems of Superplasticity of Metals of the Russian Academy of Sciences

Aliev A.M.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, head of lab Kh.I. Amirkhanov Institute of Physics of the Russian **Academy of Sciences**

Gamzatov A.G.

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Kh.I. Amirkhanov Institute of Physics, Russian Academy of Sciences

Abdulkadyrova N.Z.

Junior research assistant. Kh.I. Amirkhanov Institute of Physics of the Russian Academy of Sciences

***Abstract.** To date, a large number of papers have been devoted to the study of physical effects during phase transitions (FPS) in solid-state materials [1-10]. Among the huge variety of solid-state materials with AF, magnets can be distinguished, in which magnetic AF often combine and interact with structural AF [1-7]. The study of materials in an unstable state near the AF is hampered by the lack of standard methods for studying the thermodynamic parameters of matter in situ, that is, in dynamics, directly during the AF process. An analysis of modern literature shows that the kinetics of*

processes in AF have been poorly studied [7,8]. The development of new methods for studying the kinetics of AF opens up opportunities for the applied use of new functional materials with AF in sensor and actuator technology, instrumentation, in the creation of solid-state refrigerators and heat pumps for alternative energy, etc. [9,10].

Ключевые слова: сплавы Гейслера, фазовый переход, calorический эффект.

В работе экспериментально, с применением оригинальной методики и теоретически с применением уравнения Ландау-Халатникова исследуется кинетика намагниченности при фазовом переходе (ФП) в точке Кюри в чистом гадолинии и в сплаве Гейслера Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5} с магнитоструктурным ФП. Предварительные результаты позволяют сделать оценку для нахождения константы уравнения Ландау-Халатникова γ , показывающей минимальный предел для скорости изменения намагниченности при возбуждении импульсами магнитного поля до 200 кА/м в чистом гадолинии $\gamma < 3 \cdot 10^3$ 1/с.

Изучение calorических эффектов (КЭ) в твердых телах под воздействием сильных переменных полей признано перспективным для создания новой технологии эффективных твердотельных холодильников. Наибольший интерес вызывают материалы с фазовыми переходами (ФП), обладающие «гигантскими» КЭ. Уравнения состояния вблизи ФП имеют аномалии, описывающие КЭ. Недавно, в работе [11] обнаружен эффект резкой зависимости магнитокалорического эффекта от частоты переменного сильного магнитного поля. Цель настоящей работы заключается в экспериментальном изучении зависимостей термодинамических параметров температуры и намагниченности для решения уравнений состояния и кинетики в магнитных полях порядка 1 Тл в сплаве Гейслера Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}. Температура Кюри была измерена экспериментально и составила 286,5 К. Для исследования кинетики МКЭ использована методика, описанная в [11], для исследования кинетики намагниченности вблизи магнитного фазового перехода образца сплава Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5} в импульсных полях была создана оригинальная установка.

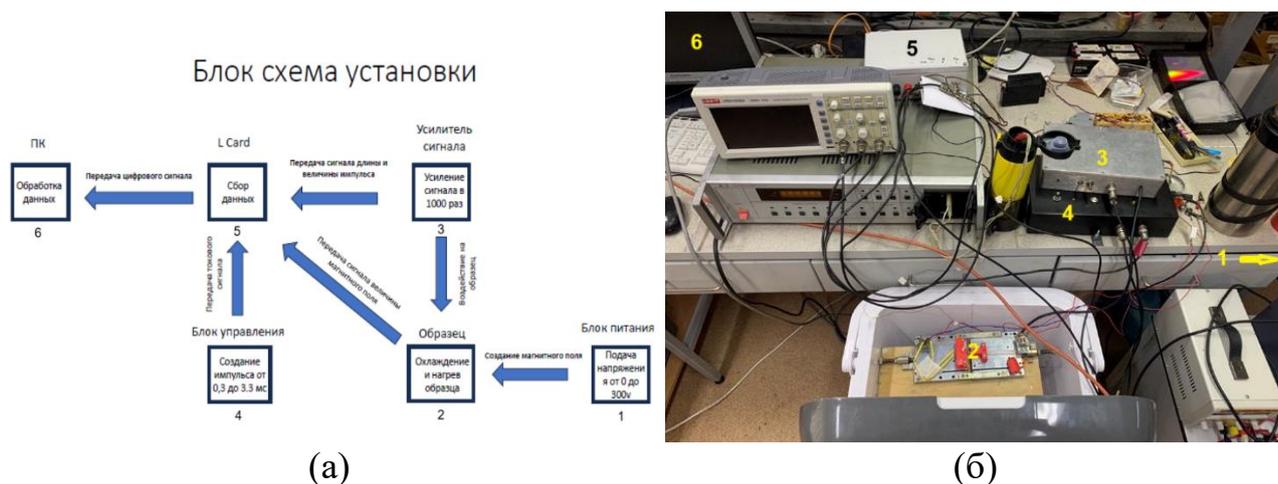


Рис.1. (а) Блок схема и (б) фото экспериментальной установки

Экспериментальная установка (см. Рис. 1) включает блок питания (1) (не указан на фото), который обеспечивает подачу напряжения от 0 до 300 В на катушку, создающую магнитное поле, образец магнитного материала (2) в виде бруска и помещенный на его торце

быстродействующий датчик Холла для измерения магнитного момента и термопару для измерения его температуры. Для поддержания необходимой температуры используется блок термостатирования. Для усиления сигнала от датчика Холла используется операционный малошумящий, быстродействующий усилитель (3). С помощью блока управления (4) происходит генерация прямоугольного импульса магнитного поля с напряжённостью до 1 Тл переменной длительности от 1 сек до 10 мкс. Для снятия и обработки сигнала применяется плата ЦАП/АЦП L-Card (5). Окончательный анализ, обработка и вывод данных производится при помощи ПК (6).

Созданная установка позволяет применить метод определения точки Кюри в сплаве Ni_{50.5}Mn_{33.4}In_{15.6}V_{0.5}. Разработан метод нахождения константы γ уравнения Ландау-Халатникова, показывающей минимальный предел для максимальной скорости фазового перехода.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (проект № 20-19-00745, <https://rscf.ru/project/23-19-45040/>).

Список использованной литературы:

1. De Oliveira N. A., von Ranke P. J. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect //Physics Reports. – 2010. – Т. 489. – №. 4-5. – С. 89-159.
2. Tishin A. M., Spichkin Y. I. Recent progress in magnetocaloric effect: Mechanisms and potential applications //international journal of refrigeration. – 2014. – Т. 37. – С. 223-229.
3. Tishin A. M. et al. A review and new perspectives for the magnetocaloric effect: New materials and local heating and cooling inside the human body //International Journal of Refrigeration. – 2016. – Т. 68. – С. 177-186.
4. Liu J. et al. Giant magnetocaloric effect driven by structural transitions //Nature materials. – 2012. – Т. 11. – №. 7. – С. 620-626.
5. Ram N. R. et al. Review on magnetocaloric effect and materials //Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2018. – Т. 31. – С. 1971-1979.
6. Pankratov N. Y., Tereshina I. S., Nikitin S. A. Magnetocaloric Effect in Rare-Earth Magnets //Physics of Metals and Metallography. – 2023. – Т. 124. – №. 11. – С. 1139-1146.
7. Puri S. Kinetics of phase transitions //Phase Transitions. – 2004. – Т. 77. – №. 5-7. – С. 407-431.
8. Basso V. et al. Hysteresis and phase transition kinetics in magnetocaloric materials //physica status solidi (b). – 2018. – Т. 255. – №. 2. – С. 1700278.
9. Franco V. et al. Magnetocaloric effect: From materials research to refrigeration devices //Progress in Materials Science. – 2018. – Т. 93. – С. 112-232.
10. Reis M. S. Magnetocaloric and barocaloric effects of metal complexes for solid state cooling: Review, trends and perspectives //Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 417. – С. 213357
11. Aliev A. M., et al., J. Al. Com.676, 601–605 (2016).

УДК 537.632

Влияние внешних напряжений на решетки магнитных скирмионов в многослойных нанопленках**Шарафуллин И.Ф.**

д.ф.-м. н., заведующий лабораторией дизайна новых материалов УУНиТ

Абдрахманов Д.И.

младший научный сотрудник лаборатории дизайна новых материалов УУНиТ

Нугуманов А.Г.

младший научный сотрудник лаборатории дизайна новых материалов УУНиТ

Самигуллина А.И.

лаборант – исследователь лаборатории дизайна новых материалов УУНиТ

***Аннотация.** Скирмионы в магнитных пленках представляют собой топологически стабильные спиновые вихревые конфигурации, формирующиеся в основном состоянии как результат конкурирующих взаимодействий (чаще всего это магнитные обменные взаимодействия и взаимодействие Дзялошинского Мория (ВДМ)) и энергия внешних воздействий. Они представляют большой интерес с точки зрения потенциальных применений в устройствах спинтроники. Чаще всего в качестве внешних воздействий рассматривались внешние поля и токи, в данной работе мы рассмотрим влияние магнитоупругой связи на фазу скирмионов и скирмионных решеток под действием механических воздействий, таких как одноосные напряжения.*

Ключевые слова: наноструктуры, скирмионы, магнитоупругие эффекты, фазовые переходы

Effect of external stresses on magnetic skyrmion lattices in multilayer nanofilms**Sharafullin I. F.,**

Doctor of physical and mathematical Sciences, Head of the Laboratory of Design of New Materials, UUST

Abdrakhmanov D.I.,

Junior Researcher of the Laboratory of Design of New Materials, UUST

Nugumanov A.G.

Junior Researcher of the Laboratory of Design of New Materials, UUST

Samigullina A. I.

Assistant Researcher of the Laboratory of Design of New Materials, UUST

***Annotation.** Skyrmions in magnetic films are topologically stable spin vortex configurations formed in the ground state as a result of competing interactions (in particular, most often these are magnetic exchange interactions and the Dzyaloshinsky Moriya interaction (DMI)) and external influences. They are of great interest from the point of view of potential applications in spintronics devices. Most*

often, external fields and currents were considered as external influences; in this work, we will consider the influence of magnetoelastic coupling on these phases of skyrmions and skyrmion lattices under the influence of mechanical influences, such as uniaxial stresses.

Keywords: nanostructures, skyrmions, magnetoelastic effects, phase transitions

В последние годы скирмионы и скирмионные решетки вызывают большой интерес как фундаментальный, так и практический, с точки зрения проявления новых физических эффектов с возможностью их применения в области спинтроники и информационных технологий [1-2]. В работе рассматривается влияние магнитоупругой связи на фазы скирмионов и скирмионных решеток под действием механических воздействий, таких как одноосные напряжения.

Деформации формы скирмиона в тонких пленках объясняются анизотропией параметра Дзялошинского - Мория ($D_x \neq D_y$), что приводит к анизотропному отношению параметра обменного взаимодействия (I) к параметру взаимодействия Дзялошинского-Мория. В данной работе с помощью новой методики моделирования, построенной на основе подвижной геометрии решетки под воздействием напряжения мы численно исследовали деформации скирмионов и влияние поля механических напряжений на характер фазовых переходов. Для расчетов рассматривалась ферромагнитная пленка на треугольной решетке, составленную из правильных треугольников со стороной a (шаг решетки). Треугольные решетки использовались для моделирования скирмионов на тонких пленках [1, 3], в случае антиферромагнитного взаимодействия между соседними узлами данная система геометрически фрустрирована. В обеих моделях (ферро- и антиферро-) отношение I/D динамически искажается и становится зависимой от направления с помощью вновь введенной внутренней степени свободы τ для деформаций и механической силы или напряжения σ . Показано, что реакции двух моделей на деформации решетки отличаются друг от друга в полосовой и фазе скирмионной решетки. Анизотропия параметра Дзялошинского-Мория является первопричиной деформаций скирмионов одноосными механическими напряжениями. Таким образом, метод на основе подвижной геометрии решетки под воздействием напряжения позволяет построить адекватную модель для описания модулированных киральных магнитных возбуждений на тонких пленках, вызванных анизотропией взаимодействия Дзялошинского-Мория, либо анизотропией обменного взаимодействия.

Список использованной литературы:

1. Hog S. E., Sharafullin I. F., Diep H. T., Garbouj H., Debbichi M., Said M. // Journ. of Magn. and Magn. Mater. – 2022. – 563. – 169920.
2. Sharafullin I. F., Kharrasov M. K., Diep H. T. // Physical Review B. – 2019. – 99. – 21. – 214420
3. Hog S. E., Kato F., Koibuchi H., Diep H.T. // Physical Review B. – 2021. –104. – 2. – 024402.