

PACS: 71.20.Be, 75.50.Ee, 75.50.Gg, 75.10.Lp, 75.30.Kz

В.И. Вальков, Д.В. Варюхин, А.В. Головчан

ОСОБЕННОСТИ БАРИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ
НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ ФАЗ
В СИСТЕМЕ $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$

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

Проведено экспериментальное и теоретическое исследование фазовой диаграммы системы $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$ под давлением. Обнаружено, что спонтанная и индуцированная магнитным полем низкотемпературная фаза в области $0.5 \leq x < 0.8$ не претерпевает значительных изменений при действии гидростатического давления до 2 kbar. На основе ab initio расчетов электронной структуры сплавов $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$ установлено изменение степени электронного заполнения d-зоны при возникновении ферромагнитной (FM) поляризации и сжатия кристаллической решетки. Предложена модель, позволяющая учесть основные черты антиферромагнитной (AF) и скошенной ферромагнитной (сFM) структур. В качестве параметров модели выступают степень заполнения d-зоны, немагнитная зависящая от объема плотность электронных состояний и внутриатомный обменный интеграл. Их величины скоррелированы с данными расчетов электронной структуры из первых принципов. В рамках модели показано, что устойчивость магнитных характеристик сFM-структуры по отношению к давлению возникает вследствие увеличения числа электронов в магнитоактивной зоне при уменьшении объема элементарной ячейки.

Введение

Ab initio расчеты FM спин-поляризованной электронной структуры сплавов $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$ при различных степенях сжатия кристаллической решетки $M_0(\Delta V/V)$ показали, что в области $0.5 \leq x \leq 0.7$ можно ожидать заметного изменения магнитных свойств при воздействии даже небольших гидростатических давлений. Однако экспериментальные изотермы намагничивания этих образцов $M_0(H)$, температуры спонтанных переходов в AF-фазу и величины критических полей для индуцированных магнитным полем переходов, измеренные под давлением $P \leq 2$ kbar, не показывают заметных отличий от своих аналогов при атмосферном давлении.

Анализ причин такого расхождения на основе модельных представлений и данных расчетов из первых принципов показал, что в сплавах системы $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ при $x < 0.8$ спонтанные и индуцированные магнитным полем магнитоупорядоченные фазы не являются ферромагнитными, а представляют собой скошенные структуры и их барическая устойчивость обусловлена увеличением заполнения магнитоактивной d -зоны при увеличении давления.

1. Результаты расчетов из первых принципов под давлением

Сопоставление рассчитанных $M_0(x)$ и экспериментальных $M_0^{\text{exp}}(x)$ зависимостей магнитного момента в расчете на элементарную ячейку (рис. 1) при атмосферном давлении показало, что их хорошее согласие наблюдается только в области $0.8 \leq x \leq 1.0$. Поэтому можно предположить, что FM-состояние реализуется только в сплавах с $x \geq 0.8$. При меньших концентрациях железа экспериментальные и теоретические зависимости магнитного момента $M(x)$ качественно различаются: теоретическая $M_0(x)$ при уменьшении x продолжает возрастать, а экспериментальная $M_0^{\text{exp}}(x)$ – понижаться. Анализ этого противоречия, проведенный в [1], привел к выводу о том, что магнитная структура спонтанной ($0 < x < 0.8$) и индуцированной магнитным полем ($x \leq 0.5$) низкотемпературной фазы представляет собой c FM-структуру. Намагниченность данной фазы определяется FM-компонентой полного магнитного момента системы m , которая конкурирует с AF-компонентой l . При этом зависимость m от концентрации железа при различных давлениях $m(x, P)$ может качественно отличаться от аналогичных зависимостей полного магнитного момента $M_0(x, P)$ (рис. 1), вычисленного для коллинеарного ферромагнетика.

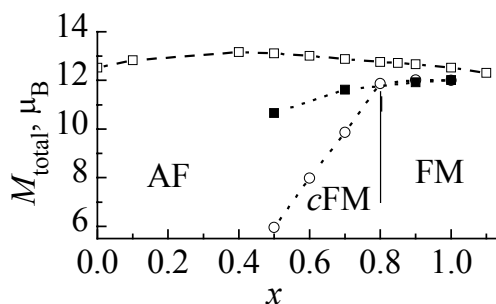


Рис. 1. Зависимости экспериментальных M_{exp} (\circ) и расчетных M_0 (\square , \blacksquare) значений магнитного момента в расчете на элементарную ячейку от содержания железа. Параметры ячейки для всех x одинаковы и соответствуют экспериментальным для $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ при $\Delta V/V$, %: \square – 0, \blacksquare – (–5)

Можно предположить, что сохранение стабильной намагниченности низкотемпературной c FM-фазы связано с подстройкой электронной структуры к сжатию решетки. Основным количественным показателем этого процесса является барическое повышение степени электронного заполнения магнитоактивной зоны $N_d^{NM}(x)$ (рис. 2), сопровождающее увеличение ширины основного пика плотности электронных состояний при сжатии кристалла. Как показал детальный анализ [1,2] парциальных вкладов в плотность электрон-

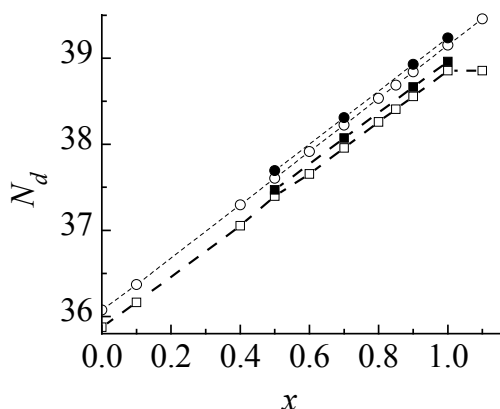


Рис. 2. Зависимость числа d -электронов от содержания Fe в ферромагнитной (\square , \blacksquare) и немагнитной (\circ , \bullet) фазах для сжатой ($\Delta V/V = -0.05$, зачерненные символы) и недеформированной (светлые символы) решетки. Параметры ячейки для всех x одинаковы и соответствуют $x = 0.5$

тур с магнитными ячейками, не совпадающими с кристаллохимической ячейкой. Подобные расчеты четырехкомпонентного неупорядоченного сплава с элементарной ячейкой, содержащей три формульные единицы с четырьмя неэквивалентными позициями для атомов, при наших технических возможностях не могли быть осуществлены. Поэтому для выяснения роли реакции электронной структуры на процесс стабилизации магнитоупорядоченных состояний системы $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ под давлением мы использовали модельный подход, развитый в [1,3]. Такой подход, обобщенный на случай конечных давлений [2], напрямую позволил учесть влияние изменения величин N_d на устойчивость скошенной структуры при воздействии гидростатического сжатия.

2. Модельное описание скошенной фазы

Согласно [1] в модельном подходе в качестве элементарной ячейки рассматривается ячейка с удвоенным вдоль оси y периодом (что соответствует направлению волнового вектора AF-структуры, обнаруженной в родственной системе $\text{MnFeP}_{1-y}\text{As}_y$ [4]). При этом каждой исходной кристаллохимической ячейке, содержащей 9 атомов в элементарной ячейке, ставится в соответствие один магнитоактивный узел α , на котором электрон может находиться в двух состояниях: «спин вверх» и «спин вниз». Тогда в модельной ячейке, включающей два формально-различных узла ($\alpha \in a, b$), FM- и AF-поляризации электронного спектра можно описать неприводимыми векторами ферромагнетизма $\langle \mathbf{F} \rangle$ и антиферромагнетизма $\langle \mathbf{L} \rangle \parallel \langle \mathbf{F} \rangle$ или $\langle \mathbf{L} \rangle \perp \langle \mathbf{F} \rangle$. Эти векторы, определяющие взаимную ориентацию магнитных моментов в

ных состояний, рост числа занятых d -состояний в результате сжатия решетки ($N_{d,P>0}^{NM} > N_{d,P=0}^{NM}$) (рис. 2) обусловлен таким смещением по энергии центров перекрывающихся s -, p -, d -зон, которое приводит к энергетической выгоды перехода части электронов из s -, p -зон в магнитоактивную d -зону. Однако на вопрос, является ли возрастание параметра N_d в действительности причиной компенсации воздействия гидростатического сжатия на магнитные свойства состояний системы $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$, можно будет ответить только после проведения расчетов из первых принципов по влиянию сжатия решетки на различные типы неферромагнитных струк-

позициях a и b , соответствуют термодинамическим средним операторов F_j и L_j . Гамильтониан для такой модельной системы можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}} + \hat{H}_{\text{ex}}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=+,-} \sum_k \gamma_k \left(a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} \right) + \sum_{\sigma=+,-} \sum_k t_k \left(a_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \right), \quad (2a)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_j \frac{u}{4} (n_{aj} + n_{bj}) - \tilde{J} \sum_j (\hat{S}_{aj}^2 + \hat{S}_{bj}^2) \equiv \sum_{j=1}^{N_0} \frac{u}{4} (n_{aj} + n_{bj}) - \frac{\tilde{J}}{2} \sum_{j=1}^{N_0} (\hat{F}_j^2 + \hat{L}_j^2), \quad (2b)$$

$$\hat{H}_{\text{ex}} = H_{0z} \sum_j \hat{F}_{jz} + \sum_v H_v \sum_j \hat{L}_{jv}. \quad (2b)$$

Здесь $a_{k\sigma}$, $b_{k\sigma}$ – фурье-компоненты операторов уничтожения электронов в позициях a , b соответственно; $\alpha \in a, b$, n_{ai} , n_{bi} , S_{ai} , S_{bi} – операторы зарядовой и спиновой плотности в соответствующих позициях i -й ячейки, описываемые операторами рождения (уничтожения) электронов $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$), $b_{i\sigma}^+$ ($b_{i\sigma}$); \tilde{J} – эффективный внутриатомный обменный интеграл; $\hat{F}_j = S_{aj} + S_{bj}$, $\hat{L}_j = S_{aj} - S_{bj}$, $v \in x, y, z$, γ_k и t_k – фурье-компоненты интегралов переноса электронов между одинаковыми (aa , bb) и формально-различными (ab) позициями соответственно.

В присутствии однородного H_{0z} и альтернированных H_v полей средние значения операторов ферромагнитной $\langle F_{jz} \rangle \equiv F$ и антиферромагнитной $\langle L_{jv} \rangle \equiv L_v$ мод отличны от нуля. Менее очевидным является сохранение конечных значений этих величин при отсутствии внешних полей. Если это происходит, то система спонтанно проявляет FM- и AF-свойства. Именно такое состояние, на наш взгляд, реализуется в системе $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ при спонтанных низкотемпературных переходах первого рода из AF- в слабоферромагнитную фазу для $x < 0.8$. Используя метод функционального интегрирования (приложение), термодинамический потенциал электронной системы, описываемой гамильтонианом (1), при учете упругой энергии решетки можно вычислить и привести к виду (П5) [3]:

$$\tilde{F}(\xi, \eta, \omega) = E(\xi, \eta) + J (\xi - h/J)^2 + J\eta^2 + \omega^2 / 2\chi + p(\omega + 1), \quad (3)$$

где $h = H_{0z}/W$, $J = \tilde{J}/W$, p – безразмерное давление, χ – объемная сжимаемость, $\omega = (V - V_0)/V_0$ – относительное изменение объема V , $2N_0$ – число магнитоактивных атомов, $E(\xi, \eta)$ – энергия спин-поляризованных электронов, зависящая от начальной заселенности $n_0(x)$ магнитоактивной зоны с эффективной шириной W . Энергия $E(\xi, \eta)$ (П2) при определенных условиях (П10) может быть вычислена при введении зависящей от объема немагнитной плотности электронных состояний $g(\varepsilon, \alpha\omega)$ (П10). Однородные фурье-компоненты флуктуирующих обменных полей ξ , η (П1), выступающие в роли параметров порядка, связаны со средними значениями фурье-

компонент операторов $\langle F_{0z} \rangle = F$ и $\langle L_{0x} \rangle = L$ соотношениями $m = F/2N_0 = -\left(\xi - \frac{h_z}{J}\right)$, $l = L/2N_0 = -\eta$. Для учета перехода части s -электронов в магнитоактивную d -зону при сжатии решетки была введена зависимость числа электронов от объема: $n(\omega) = n_0(x) + a\omega$. Решения уравнений состояния $\partial \tilde{F} / \partial \xi = 0$, $\partial \tilde{F} / \partial \eta = 0$, $\partial \tilde{F} / \partial \omega = 0$, дополненных уравнением для химического потенциала (П12), ищутся для конкретного сплава системы $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$ при не зависящей от x «затравочной» плотности электронных состояний $g_0(\varepsilon)$, постоянных параметрах J , α и заданных для каждого x начальных значениях $n_0(x)$. Величины $n_0(x)$ и зависимости $g_0(\varepsilon)$ могут быть приведены к величинам, рассчитанным *ab initio* для немагнитного состояния сплава с концентрацией железа x . В этом случае решения уравнения состояния позволяют получить удовлетворительное согласие между экспериментальной (см. рис. 1) и расчетной (рис. 3) зависимостями намагниченности от концентрации. Находит свое объяснение и барическая устойчивость спонтанной (рис. 4) и индуцированной магнитным полем (рис. 5) намагниченности. На рис. 5 приведены расчетные зависимости намагниченности M и компоненты вектора антиферромагнетизма L модели для случая перехода части электронов из магнитоактивной зоны при сжатии решетки (б) и для случая отсутствия такого перехода (в). Как видно, учет зависимости числа электронов в магнитоактивной зоне от объема качественно

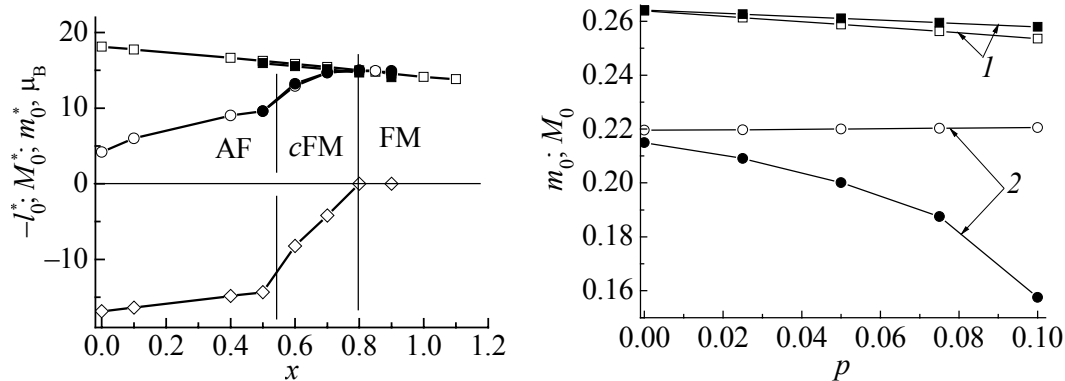


Рис. 3. Изменение модельной (M, l) - x диаграммы состояний при $p = 0$ (незачерненные символы) и $p = 0.05$ (зачерненные): \square , \blacksquare – намагниченность насыщения M_0 ; \circ , \bullet – намагниченность индуцируемой cFM-фазы m_0 ; \diamond – компонента вектора антиферромагнетизма l . Значения величин m_0 в области стабильности AF-фазы ($x \leq 0.5$) получены из экстраполяции кривых $m(h)$ к нулевому полю

Рис. 4. Расчетные барические зависимости магнитного момента для $n_0 = 1.2638$ ($x = 0.6$) в метастабильном FM- (кривые 1) и cFM- (кривые 2) состояниях при различных значениях параметра a : \circ , \square – (-0.06) ; \bullet , \blacksquare – 0

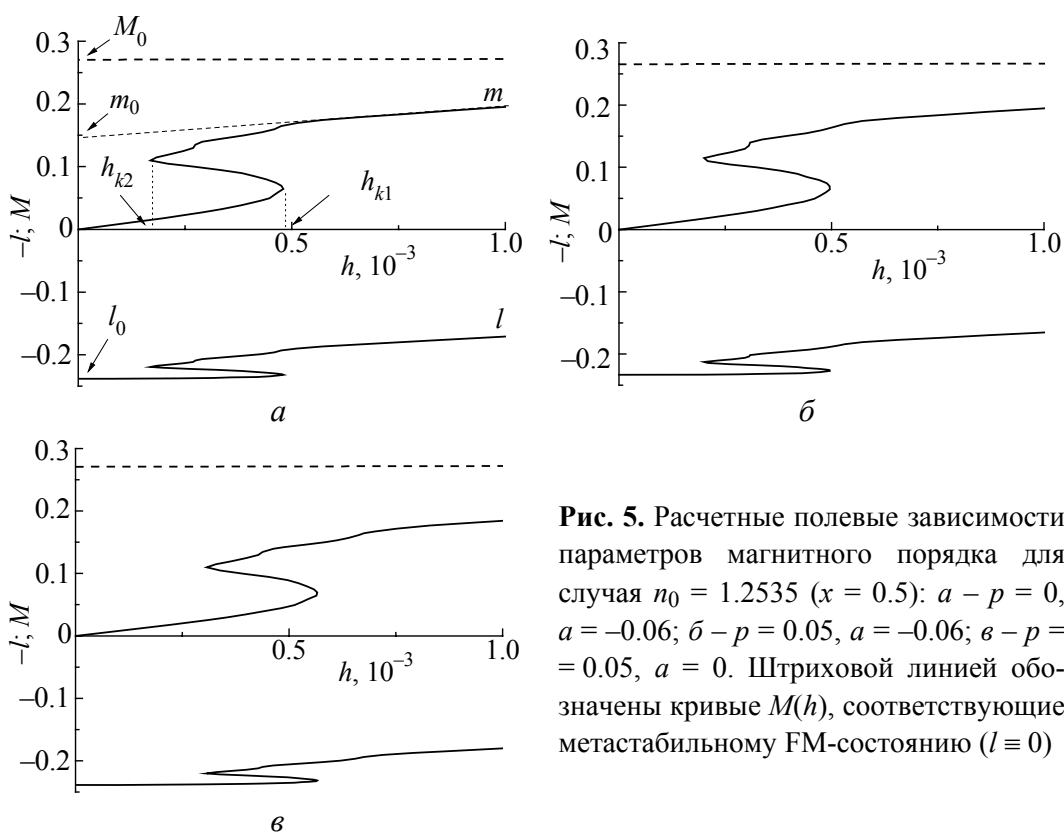


Рис. 5. Расчетные полевые зависимости параметров магнитного порядка для случая $n_0 = 1.2535$ ($x = 0.5$): $a - p = 0$, $a = -0.06$; $б - p = 0.05$, $a = -0.06$; $в - p = 0.05$, $a = 0$. Штриховой линией обозначены кривые $M(h)$, соответствующие метастабильному FM-состоянию ($l \equiv 0$)

соответствует наблюдаемой экспериментально [2,5] устойчивости намагниченности системы к внешнему давлению.

3. Заключение

Использование комбинированного модельного подхода позволило прийти к следующим выводам.

1. Изменение магнитных свойств системы $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$ при уменьшении концентрации железа от 1 до 0 обусловлено изменением различных типов магнитного порядка от FM при $x > 0.8$ ($N_d(x) > 38.533$), через c FM-структуру при $0.5 < x < 0.8$ ($37.706 < N_d(x) < 38.533$) до AF при $x < 0.5$ ($N_d(x) < 37.706$). При этом в области $x < 0.8$ FM-структура является метастабильной, а энергетическая стабилизация c FM- и AF-структур происходит без качественных изменений в исходной немагнитной плотности электронных состояний и является следствием только изменения числа d -электронов $N_d(x)$ в кристалле.

2. Барическая устойчивость фазы c FM и фазовые переходы между нею и AF-фазой обусловлены конкуренцией между расширением магнитоактивной d -зоны под действием давления и увеличением заселенности вследствие смещения ее центра по отношению к s -, p -зонам.

В заключение заметим, что возможность использования вычисленных из первых принципов интегральных характеристик электронного спектра для исследуемых сплавов может, на наш взгляд, служить оправданием модельного подхода и ряда сделанных нами упрощений.

Приложение

В статическом пределе при использовании преобразования Стратоновича–Хаббарда $\exp[a\hat{F}^2] \equiv (\alpha/\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp[-a\xi^2 - 2a\xi\hat{F}]$ свободная энергия системы с гамильтонианом (1) при низких температурах, когда можно пренебречь флуктуациями обменных полей ($\xi_{q \neq 0}, \eta_{q \neq 0}$), может быть представлена в виде функционального интеграла только по компонентам однородных полей [3]:

$$F = -\beta^{-1} \ln \int \prod_{q, \alpha, \alpha'} d\eta_{q=0, \nu} d\xi_{q=0, z} \exp(-\beta \Psi\{\eta_{0\nu}, \xi_{0\nu}\}) + \mu N, \quad (\text{П1})$$

$$\Psi(\xi, \eta) = \Psi_0 + \Psi_1, \quad \Psi_1(\xi, \eta) = -\beta^{-1} \ln Tr \exp(-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})), \quad (\text{П2})$$

$$\Psi_0(\xi, \eta) = N_0 \frac{\tilde{J}}{2} \left\{ \left(\xi_{q=0, z} - \frac{H_0}{\tilde{J}} \right)^2 + \sum_{\nu \in x, y, z} \left(\eta_{q=0, \nu} - \frac{H_\nu}{\tilde{J}} \right)^2 \right\}, \quad (\text{П3})$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\tilde{J} \left(\xi_{q=0, z} \hat{F}_{q=0, z} + \sum_{\nu} \eta_{q=0, \nu} \hat{L}_{q=0, \nu} \right), \quad (\text{П4})$$

где фурье-компоненты операторов спиновой плотности $\hat{F}_{q=0, z}, \hat{L}_{q=0, \nu}$ определяются через операторы рождения и уничтожения электронов $a_{k\sigma}^+$ ($a_{k\pm\sigma}$), $b_{k\sigma}^+$ ($b_{k\pm\sigma}$) известными соотношениями [3]; $\hat{H}_0 = \hat{H}_0 - \mu N$, μ – химический потенциал, $N(2N_0)$ – полное число электронов (атомов).

В этом случае $\Psi_1(\xi, \eta)$ легко вычисляется и после взятия интегралов методом перевала безразмерное выражение свободной энергии в расчете на атом $\tilde{F} = F/(2N_0W)$ в пределе $T \rightarrow 0$, $H_y = 0$ при учете упругой энергии и энергии внешнего «безразмерного» давления $p = \frac{PV_0}{W}$ приобретает вид

$$\tilde{F} = E(\xi, \eta) + J \left(\xi - h/J \right)^2 + J \left[\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2 \right] + \omega^2/2\chi + p(\omega + 1), \quad (\text{П5})$$

$$E(\xi, \eta) = \frac{V_0}{16\pi^3} \sum_{m=1}^4 \int d^3k \left[\{ (E_m(k, \xi, \eta) - \mu) \Theta(\mu - E_m(k, \xi, \eta)) \} \right], \quad (\text{П6})$$

где $\Theta(x) = 1, x > 0, \Theta(x) = 0, x < 0$; W – размерный параметр, характеризующий эффективную ширину магнитоактивной зоны в немагнитном состоянии; $h = H_0/W, J = \tilde{J}/W$; χ – безразмерная объемная сжимаемость; $\xi \equiv \xi_0/2, \eta_\nu \equiv \eta_{0\nu}/2$ соответствуют решениям уравнений перевала $\partial\Psi/\partial\xi_0 = 0, \partial\Psi/\partial\eta_{0\nu} = 0$; $E_m(\varepsilon, \xi, \mu)$ – решения секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} \tilde{\gamma}_{k\sigma} - E & -\tilde{J}\left(\eta_x + \frac{\eta_y}{i}\right) & t_k & 0 \\ -\tilde{J}\left(\eta_x - \frac{\eta_y}{i}\right) & \tilde{\gamma}_{k-\sigma} - E & 0 & t_k \\ t_k & 0 & \tilde{\tilde{\gamma}}_{k\sigma} - E & \tilde{J}\left(\eta_x + \frac{\eta_y}{i}\right) \\ 0 & t_k & \tilde{J}\left(\eta_x - \frac{\eta_y}{i}\right) & \tilde{\tilde{\gamma}}_{k-\sigma} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{П7})$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_{k\sigma} &= \gamma_k - (\sigma)\tilde{J}(\xi + \eta_z), \\ \tilde{\tilde{\gamma}}_{k\sigma} &= \gamma_k - (\sigma)\tilde{J}(\xi - \eta_z), \\ \sigma &= 1, \quad -\sigma = -1. \end{aligned}$$

Решение уравнения (П7) имеет вид

$$\begin{aligned} E_{1,2}(k, \xi, \eta) &= \gamma_k \pm \left\{ \tilde{J}^2(\eta_x^2 + \eta_y^2) + \left[\tilde{J}\xi + (t_k^2 + \tilde{J}^2(\eta_z)^2)^{1/2} \right]^2 \right\}^{1/2}, \\ E_{3,4}(k, \xi, \eta) &= \gamma_k \pm \left\{ \tilde{J}^2(\eta_x^2 + \eta_y^2) + \left[\tilde{J}\xi - (t_k^2 + \tilde{J}^2(\eta_z)^2)^{1/2} \right]^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{П8})$$

Из общих решений (П8), описывающих фазу сосуществования ферро- и антиферромагнетизма, можно выделить два симметрично-различных случая: $\xi \neq 0, \eta_z \neq 0, \eta_x = \eta_y = 0$ и $\xi \neq 0, \eta_x \neq 0, \eta_z = \eta_y = 0$. Скошенной структуре cFM, которую мы рассматриваем как альтернативную структурам FM и AF в системе $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$, соответствует второе решение. Если предположить, что $\gamma_k \ll t_k$, и пренебречь γ_k , то в (П8) удастся формально ввести затравочную плотность состояний

$$g_0(\tilde{\varepsilon}) = \frac{V_0}{8\pi^3} \int d^3k \delta(\tilde{\varepsilon} - t_k). \quad (\text{П9})$$

В дальнейшем в качестве $g_0(\tilde{\varepsilon})$ можно использовать рассчитанную из первых принципов немагнитную плотность электронных состояний. Влияние гидростатического давления на электронный спектр учтем через зависимость ширины «затравочной» плотности электронных состояний от относительного изменения объема ω :

$$g(\varepsilon, \omega) = g_0[\varepsilon(1 - \alpha\omega)^{-1}] \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} g_0[\varepsilon(1 - \alpha\omega)^{-1}] d\varepsilon, \quad (\text{П10})$$

где $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}/(W)$, α – постоянная, которая характеризует степень уширения зоны при сжатии решетки, а знаменатель обеспечивает сохранение полного числа состояний в зоне.

Тогда для (П6) имеем

$$E(\xi, \eta) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^4 \int g(\varepsilon, \omega) \Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \xi, \eta)) E_m(\varepsilon, \xi, \eta) d\varepsilon. \quad (\text{П11})$$

Формально выражение (П5) можно рассматривать как неравновесный термодинамический потенциал, зависящий от неравновесных параметров порядка ξ , η_v , равновесные значения которых определяются из уравнений состояния $\partial \tilde{F} / \partial \xi = 0$, $\partial \tilde{F} / \partial \eta_v = 0$, $\partial \tilde{F} / \partial \omega = 0$, совпадающих с уравнениями перевала. При учете только cFM-структуры ($\xi \neq 0$, $\eta_x \equiv \eta \neq 0$) уравнения состояния, дополненные уравнениями для химического потенциала, имеют вид

$$h = \xi + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^4 \int g(\varepsilon, \omega) \partial E_m(\varepsilon, \xi, \eta) / \partial \xi [\Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \xi, \eta))] d\varepsilon, \quad (\text{П12a})$$

$$0 = \eta + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^4 \int g(\varepsilon, \omega) \partial E_m(\varepsilon, \xi, \eta) / \partial \eta [\Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \xi, \eta))] d\varepsilon, \quad (\text{П12б})$$

$$\omega / 2K = -P - \frac{1}{2} \int \partial g(\varepsilon, \omega) / \partial \omega \sum_{m=1}^4 \Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \xi, \eta)) E_m(\varepsilon, \xi, \eta) d\varepsilon, \quad (\text{П12в})$$

$$n(\omega) = \frac{1}{2} \int g_0(\varepsilon, \omega) \sum_{m=1}^4 \Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \xi, \eta)) d\varepsilon, \quad (\text{П12г})$$

где $n(\omega) = n_0(x) + a\omega$ определяет число электронов для равновесного объема ω ; $n_0(x)$ – число электронов для недеформированного ($\omega = 0$) состояния; a – константа, характеризующая зависимость заселенности магнитоактивной зоны от объема.

1. В.И. Вальков, А.В. Головчан, Д.В. Варюхин, ФНТ **34**, 536 (2008).
2. В.И. Вальков, Д.В. Варюхин, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, А.П. Сиваченко, В.И. Каменев, Б.М. Тодрис, ФНТ **34**, 927 (2008).
3. В.И. Вальков, А.В. Головчан, ФНТ **33**, 1109 (2007).
4. M. Wasman, J.-L. Soubeyroux, R. Darrett, D. Fruchart, R. Zach, S. Niziol, R. Fruchart, JMMM **134**, 59 (1994).
5. E. Bruck, J. Kamarad, V. Sechovsky et al., JMMM **310**, e1008 (2007).

V.I. Valkov, D.V. Varyukhin, A.V. Golovchan

FEATURES OF BARIC STABILITY OF THE LOW-TEMPERATURE MAGNETICALLY ORDERED PHASES IN SYSTEM $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$

Experimental and theoretical investigation of the phase diagram of system $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ under pressure has been performed. It has been determined that spontaneous and mag-

netic-field induced low-temperature phase is not much changed for $0.5 \leq x < 0.8$ under the hydrostatic pressure to 2 kbar. By *ab initio* calculations of $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ electronic structure it has been shown that there are changes in the degree of electron filling of the *d*-band under the ferromagnetic (FM) polarization origination and crystal lattice compression. A model taking the main features of antiferromagnetic (AF) and canted ferromagnetic (*c*FM) structures into account has been proposed. The model parameters are the degree of *d*-band filling, nonmagnetic volume-dependent density of electronic states and intratomic exchange integral. Their values have been correlated to the data of electronic structure first-principles calculations. Within the model it is shown that the stability of *c*FM-structure magnetic characteristics with respect to pressure is due to the increase of electron quantity in magnetically active band with unit-cell volume decrease.

Fig. 1. Dependences of experimental M_{exp} (\circ) and calculated M_0 (\square , \blacksquare) values of magnetic moment, in terms of the unit cell, on iron content. For every x , the unit cell parameters are the same and correspond to experimental ones for $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{P}_{0.5}$ for $\Delta V/V$, %: $\square - 0$, $\blacksquare - (-5)$

Fig. 2. Dependence of the quantity of *d*-electrons on Fe concentration in ferromagnetic (\square , \blacksquare) and nonmagnetic (\circ , \bullet) phases for compressed ($\Delta V/V = -0.05$, dark symbols) and undeformed (light symbols) lattice. For every x , the unit cell parameters are the same and correspond to $x = 0.5$

Fig. 3. Changes in the model (M, l)- x diagram of states for $p = 0$ (open symbols) and $p = 0.05$ (dark): \square , \blacksquare – saturation magnetization M_0 ; \circ , \bullet – magnetization of the induced *c*FM-phase m_0 ; \diamond – antiferromagnetism vector component. In the region of AF-phase stability ($x \leq 0.5$), values of m_0 are obtained from extrapolation of curves $m(h)$ to zero field

Fig. 4. Calculated baric dependences of the magnetic moment for $n_0 = 1.2638$ ($x = 0.6$) in metastable FM- (curves 1) and *c*FM-states (curves 2) for different values of parameter a : \circ , $\square - (-0.06)$; \bullet , $\blacksquare - 0$

Fig. 5. Calculated field dependences of the magnetic-order parameters for $n_0 = 1.2535$ ($x = 0.5$): $a - p = 0$, $a = -0.06$; $\bar{\sigma} - p = 0.05$, $a = -0.06$; $\sigma - p = 0.05$, $a = 0$. Dashed lines are curves $M(h)$ corresponding to the metastable FM-state ($l \equiv 0$)