

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

В.И. Вальков<sup>1</sup>, И.Ф. Грибанов<sup>1</sup>, Е.А. Дворников<sup>1</sup>, А.П. Сиваченко<sup>1</sup>,  
Б.М. Тодрис<sup>1</sup>, А.В. Головчан<sup>1</sup>, В.И. Митюк<sup>2</sup>

## НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПОРЯДОК–ПОРЯДОК В НЕКОТОРЫХ МАРГАНЕЦ-КОБАЛЬТОВЫХ СИЛИЦИДАХ С ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ ТИПА $Co_2P$

<sup>1</sup>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

<sup>2</sup>НПЦ НАН Беларуси по материаловедению  
ул. П. Бровки, 19, г. Минск, 220072, Беларусь

Статья поступила в редакцию 6 мая 2009 года

*Исследовано влияние давления, температуры и сильного магнитного поля на устойчивость низкотемпературной (НТ) геликоидальной фазы и особенности спонтанного и индуцированного магнитным полем превращения между геликоидальным и ферромагнитным (FM) состояниями в магнитокалорических сплавах  $Mn_{2-x}Co_xSi$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) и  $MnCo_{1-y}Fe_ySi$  ( $0 \leq y \leq 0.2$ ). Рассчитаны из первых принципов электронные структуры и магнитные характеристики этих сплавов и проведено их сравнение с экспериментом. На базе полученных результатов предложен механизм температурно-индуцированных переходов порядок–порядок в рассмотренных силицидах, основанный на инверсии энергетического дисбаланса между спиральным и FM-состояниями вследствие спин-флуктуационной перенормировки исходной НТ-структуры плотности электронных состояний.*

**Ключевые слова:** индуцированные фазовые переходы, магнитные фазовые переходы под давлением, плотность электронных состояний

### Введение

Магнитные фазовые переходы порядок–порядок, наблюдаемые при понижении температуры в сплавах  $Mn_{2-x}Co_xSi$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) и  $MnCo_{1-y}Fe_ySi$  ( $0 \leq y \leq 0.2$ ), приводят к стабилизации НТ магнитоупорядоченной фазы, не обладающей спонтанной намагниченностью [1]. Естественно предположить, что магнитная структура НТ-фазы аналогична длиннопериодической двойной спиральной структуре (SS), реализующейся в процессе спонтанного перехода из FM-состояния в базовом соединении  $MnCoSi$  при его охлаждении [2]. Температура перехода FM–SS зависит от внешних условий (давления, легирования, метода

приготовления образцов) и может быть приближена к комнатной температуре [3]. Обратное превращение из спирального в FM-состояние можно индуцировать магнитным полем, причем индуцированные переходы сопровождаются большим магнитокалорическим эффектом (в частности, большим скачком магнитной энтропии), и их критические поля вблизи точки перехода SS–FM относительно невелики [3]. Перечисленные особенности магнитного превращения порядок–порядок в сплавах на основе MnCoSi делают эти сплавы привлекательными и перспективными с точки зрения магнитокалорических приложений, в частности создания магнитных рефрижераторов для работы в области комнатной температуры [3]. В настоящей работе исследовано влияние замещения атомов Co на атомы Mn и Fe в MnCoSi, а также внешнего давления, температуры и магнитного поля на устойчивость НТ-фазы, что дает информацию, необходимую для выяснения механизма переходов порядок–порядок в этих сплавах и может быть полезно для оптимизации их магнитокалорических характеристик.

### 1. Методики приготовления и измерения образцов

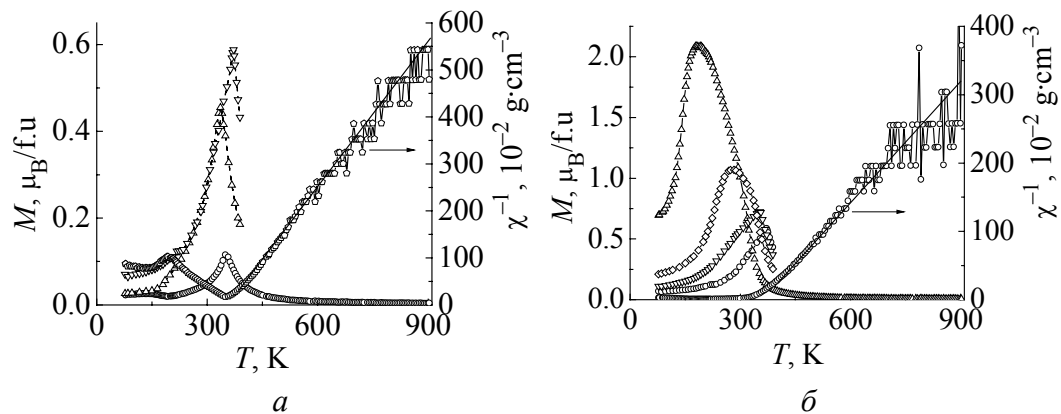
Традиционно поликристаллические образцы сплавов на основе MnCoSi с различными легирующими добавками изготавливаются методом прямого плавления исходных компонент с последующим отжигом при различных температурах и закалкой или медленным охлаждением [3,4]. При этом отмечено, что в зависимости от длительности охлаждения, значений температуры отжига и закалки величины намагниченности насыщения и температуры перехода в антиферромагнитное состояние могут значительно изменяться. Мы подбирали соответствующие режимы таким образом, чтобы приблизить температуру перехода порядок–порядок (SS–FM) к комнатной температуре, что важно для практического использования магнитокалорического эффекта, сопровождающего такие переходы [3]. После двойной переплавки растертые в порошок образцы помещали в кварцевые ампулы, которые после откачки воздуха и запайки нагревали до температуры 950°C, выдерживали 60 h и медленно (со скоростью 12 deg/h) охлаждали до комнатной температуры.

Магнитные свойства изучали посредством измерения температурных зависимостей намагниченности  $M$ , магнитной восприимчивости  $\chi$  и полевых зависимостей намагниченности  $M(H)$  при разных температурах. Температурные зависимости намагниченности измеряли в постоянных магнитных полях на оригинальных установках. Для НТ-измерений в области  $77 \text{ K} \leq T \leq 350 \text{ K}$  в магнитном поле  $H$  до 10 kOe использовали маятниковые весы типа Доменикали. Высокотемпературные измерения магнитной восприимчивости до 800 K в магнитном поле до 8.6 kOe проводили на компьютеризированных фарадеевских весах [5]. Полевые зависимости намагниченности измеряли в импульсном магнитном поле напряженностью до 300 kOe с помощью индукционного магнитометра, аналогичного описанному в [6]. Образец с микросолоноидом находился внутри контейнера высокого давления, заполненного газообразным гелием. Сжатие гелия до 2 kbar осуществляли газовым компрессором [6]. Для понижения температуры образца от 300 до 17 K сосуд

высокого давления помещали в выносную ячейку гелиевого детандера. Рентгеновские измерения зафиксировали однородную орторомбическую кристаллическую структуру  $\text{Co}_2\text{P}$  только для  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$ . В сплавах  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  наряду с орторомбической фазой обнаружено присутствие другой фазы.

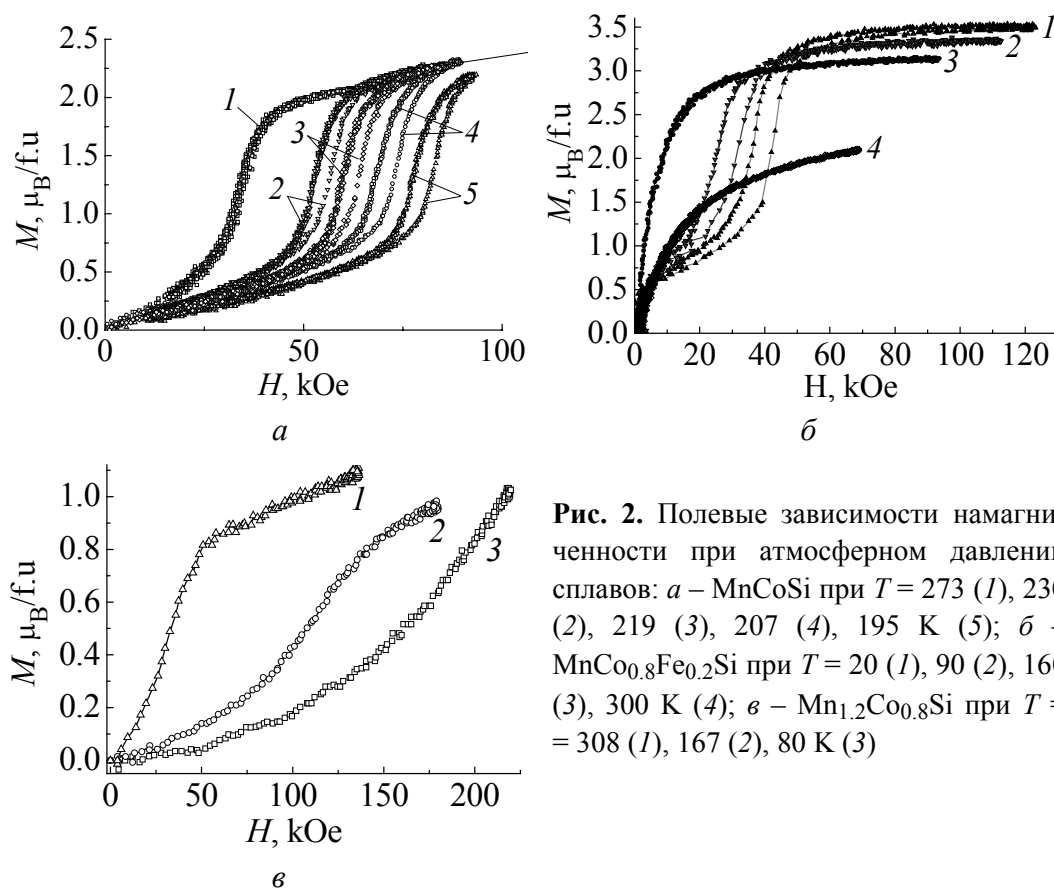
## 2. Результаты измерений

Представление о границах устойчивости FM-фазы по температуре при атмосферном давлении в системах  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$  и  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  дает рис. 1. Здесь же приведены температурные зависимости обратной парамагнитной восприимчивости для  $\text{Mn}_{1.2}\text{Co}_{0.8}\text{Si}$  и  $\text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$ , из которых определены значения парамагнитных магнитных моментов  $\mu_{pm}$  для этих силицидов. В обоих случаях эти величины существенно превосходят значения магнитных моментов, соответствующих намагниченности максимумов на зависимостях  $M(T)$ , обусловленных возникновением FM-фазы.



**Рис. 1.** Температурные зависимости намагниченности  $M$  при  $H = 9.7$  kOe и обратной восприимчивости  $\chi^{-1}$  при  $H = 8.6$  kOe сплавов систем  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$  (а) и  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  (б):  $\circ - x = 0.8$ ,  $\Delta - 0.9$ ,  $\nabla - 1.0$ ;  $\circ - y = 0$ ,  $\Delta - 0.05$ ,  $\nabla - 0.1$ ,  $\diamond - 0.2$

Зависимости намагниченности от напряженности импульсного магнитного поля  $M(H)$  при низких температурах для  $\text{MnCoSi}$  и  $\text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$  (рис. 2, а, б) демонстрируют ярко выраженные магнитные превращения первого рода с характерными для них особенностями. Эти особенности включают наличие полевого гистерезиса и двух разделенных (по полю) фаз, каждая из которых отличается величиной намагниченности и характером намагничивания. Одна из них – исходная смешанная (SS + FM) фаза в  $\text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$  (рис. 2, б) или чисто спиральная (SS) фаза в отожженном  $\text{MnCoSi}$  (рис. 2, а), другая – индуцированная «условно ферромагнитная». В обоих случаях индуцированный переход осуществляется в относительно узком диапазоне магнитных полей. Альтернативный процесс намагничивания наблюдается в  $\text{Mn}_{1.2}\text{Co}_{0.8}\text{Si}$  (рис. 2, в), где индуцированный магнитным полем переход сглажен и отсутствует четкая полевая граница раздела между исходной и



**Рис. 2.** Полевые зависимости намагниченности при атмосферном давлении сплавов: *a* – MnCoSi при  $T = 273$  (1), 230 (2), 219 (3), 207 (4), 195 К (5); *б* – MnCo<sub>0.8</sub>Fe<sub>0.2</sub>Si при  $T = 20$  (1), 90 (2), 160 (3), 300 К (4); *в* – Mn<sub>1.2</sub>Co<sub>0.8</sub>Si при  $T = 308$  (1), 167 (2), 80 К (3)

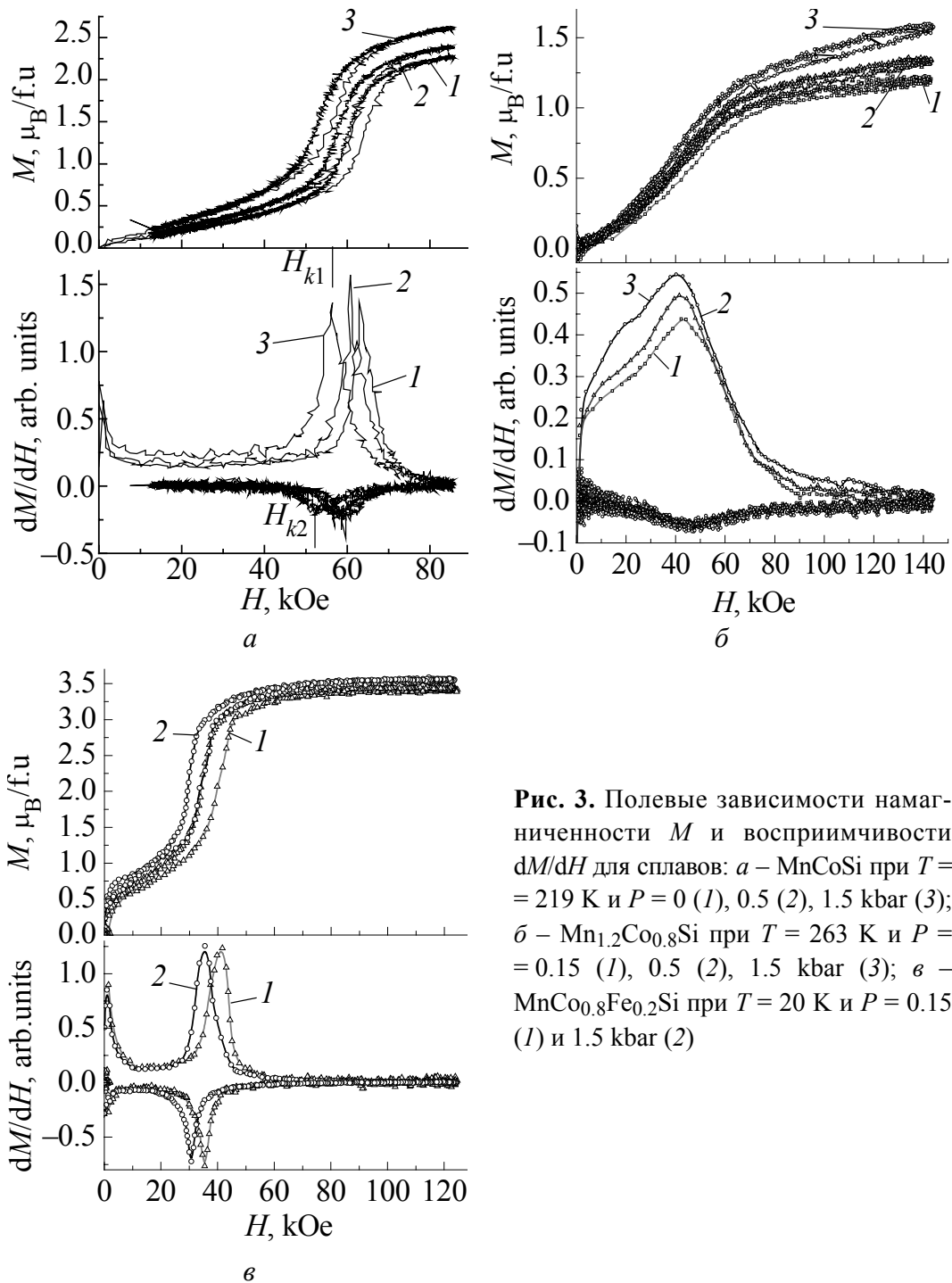
индуцированной фазы, т.е. этот переход относится к классу размытых фазовых переходов. Все  $H$ – $T$ -диаграммы исследованных сплавов характеризуются снижением критических полей индуцирования при увеличении температуры. Критические поля определяли как пиковые значения зависимости  $\partial M(H)/\partial H$  (рис. 3).

Под действием гидростатического давления значения критических полей уменьшаются, а величина намагниченности насыщения индуцированной фазы увеличивается в MnCoSi, Mn<sub>1.2</sub>Co<sub>0.8</sub>Si и практически не изменяется в MnCo<sub>0.8</sub>Fe<sub>0.2</sub>Si (рис. 3).

### 3. Анализ результатов

Анализ результатов включает в себя ряд вопросов, важных как в фундаментальном плане, так и в плане практического применения магнитокалорического эффекта:

- 1) к какому типу магнетизма (коллективизированного или локализованного) относятся исследуемые сплавы;
- 2) являются ли индуцированные магнитным полем состояния коллинеарными FM-структурами;
- 3) чем обусловлено барическое возрастание намагниченности насыщения индуцированной магнитным полем фазы;

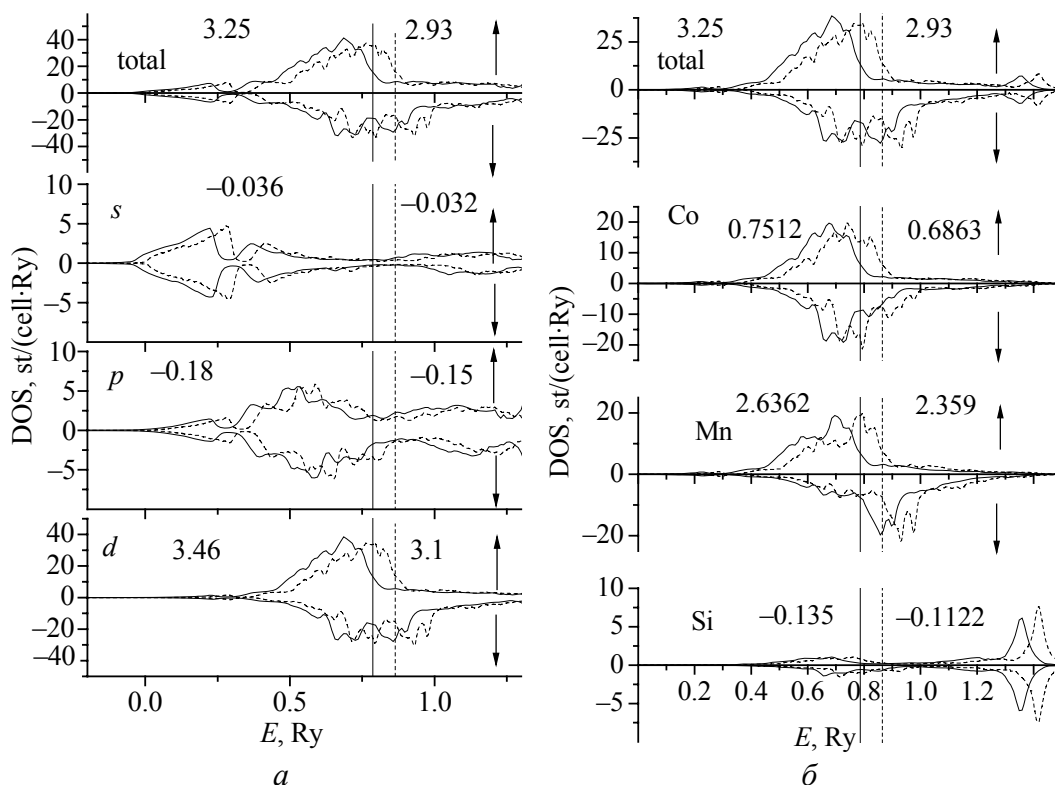


**Рис. 3.** Полевые зависимости намагниченности  $M$  и восприимчивости  $dM/dH$  для сплавов: *a* –  $\text{MnCoSi}$  при  $T = 219$  К и  $P = 0$  (1), 0.5 (2), 1.5 kbar (3); *б* –  $\text{Mn}_{1.2}\text{Co}_{0.8}\text{Si}$  при  $T = 263$  К и  $P = 0.15$  (1), 0.5 (2), 1.5 kbar (3); *в* –  $\text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$  при  $T = 20$  К и  $P = 0.15$  (1) и 1.5 kbar (2)

4) каков возможный механизм температурно-индуцированных переходов порядок–порядок.

При анализе настоящих экспериментальных исследований мы опирались на результаты расчетов из первых принципов немагнитной и FM-плотности электронных состояний для  $\text{MnCoSi}$  методами, описанными в [7].

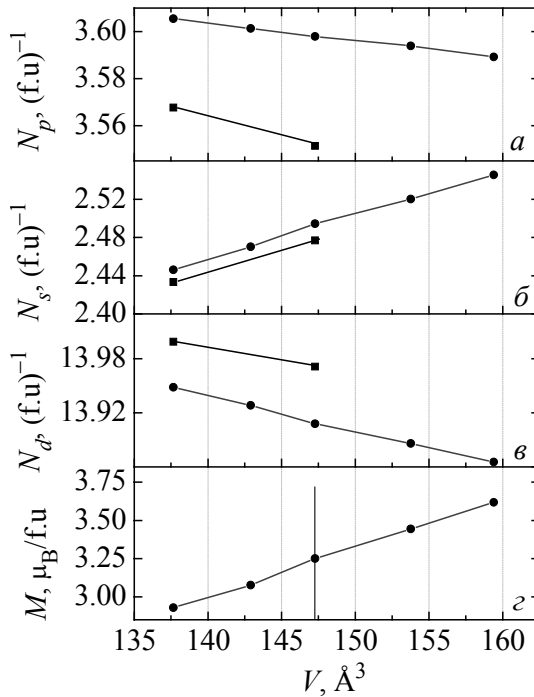
I. Как видно из зависимости FM-парциальных плотностей электронных состояний от энергии –  $\text{DOS}_f(E)$  (рис. 4,*a*), это соединение является проводящим



**Рис. 4.** Полный (total) и парциальные вклады в ферромагнитную плотность электронных состояний DOS в MnCoSi для нормальной (сплошные линии) и гидростатически сжатой при  $\Delta V/V = -7\%$  (пунктирные линии) элементарной ячейки. Числами обозначены парциальные вклады в величины магнитных моментов от  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -состояний (а) и атомов Mn, Co, Si (б) для нормальной (слева) и сжатой (справа) ячейки. Уровни Ферми обозначены вертикальными линиями

магнетиком, и наибольший вклад в проводимость дают  $d$ -состояния, поскольку на уровне Ферми  $E_F$   $\text{DOS}_d(E_F) > \text{DOS}_p(E_F) > \text{DOS}_s(E_F)$ . Эти же состояния подвержены наибольшему FM-расщеплению по энергии спиновых подзон, что приводит к значительному несимметричному электронному заполнению спиновых зон ( $\uparrow$ ), ( $\downarrow$ ) и, как следствие, наибольшему вкладу  $d$ -состояний в магнитный момент системы (рис. 4,а).

II. Парциальные плотности электронных состояний исходных элементов и величина соответствующих им локальных магнитных моментов приведены на рис. 4,б, а значения полных рассчитанных и эффективных (полученных из закона Кюри–Вейсса) FM-моментов – в таблице. Из рисунка видно, что локальный магнитный момент марганца ( $\mu_{\text{Mn}} = 2.64\mu_B/\text{f.u.}$ ) дает наибольший вклад в полный FM-момент ( $\mu = 3.25\mu_B/\text{f.u.}$ ) сплава MnCoSi. Значение этой величины ниже эффективного парамагнитного момента ( $\mu_{pm} = 4.2\mu_B/\text{f.u.}$ ) [2], но превышает экспериментальные значения магнитного момента ( $M \approx 2.2\mu_B/\text{f.u.}$ ), определенного при атмосферном давлении из намагниченности насыщения индуцированной магнитным полем фазы в



**Рис. 5.** Изменение электронного заполнения  $N$  зон  $p$  (а),  $s$  (б),  $d$  (в) и магнитного момента  $M$  (г) при изменении объема элементарной ячейки  $V$  в ферромагнитном (■) и немагнитном (●) состояниях. Вертикальная линия соответствует объему элементарной ячейки при атмосферном давлении

принципиальное качественное несоответствие. Действительно, как следует из рис. 3,а,б, увеличение давления приводит к возрастанию намагниченности насыщения индуцированной фазы, при том что расчетное значение величины FM-момента  $\mu$  линейно уменьшается при сжатии элементарной ячейки (рис. 5). Таким образом, стабилизирующее воздействие давления для индуцированной и спонтанной высокотемпературных фаз [8] не согласуется с результатами *ab initio* расчетов FM-поляризованной электронной структуры MnCoSi.

поле 85 kOe (рис. 2, рис. 3,а). Еще большее несоответствие наблюдается для  $Mn_{1.2}Co_{0.8}Si$  при сравнении значения парамагнитного момента ( $\mu_{pm} = 3.38\mu_B/f.u.$ ) и магнитного момента индуцированной фазы в поле 140 kOe ( $M = 1.2\mu_B/f.u.$ ) (рис. 3,б). Напротив, в  $MnCo_{0.8}Fe_{0.2}Si$  намагниченность насыщения индуцированной фазы  $M \approx 3.5\mu_B/f.u.$  (рис. 3,в) практически соответствует расчетному значению магнитного момента для FM-структуры ( $M = 3.28\mu_B/f.u.$ ), который существенно меньше эффективного парамагнитного значения ( $\mu_{pm} = 4.58\mu_B/f.u.$ ). Однако если эти расхождения носят количественный характер, то различие между барической зависимостью намагниченности насыщения индуцированной магнитным полем фазы (рис. 3) и зависимостью расчетной величины FM-момента от сжатия решетки (рис. 5) указывает на

Таблица

Сплав	Магнитный момент, $\mu_B/f.u.$	
	рассчитанный (ферромагнитный)	эффективный (закон Кюри–Вейсса)
MnCoSi	3.25	4.2
$Mn_{1.2}Co_{0.8}Si$	2.9	3.38
$MnCo_{0.8}Fe_{0.2}Si$	3.28	4.58

III. На наш взгляд, подобное расхождение связано с тем, что индуцированные магнитным полем переходы порядок–порядок в исследуемом нами образце не приводят к полному исчезновению антиферромагнитной компоненты полного магнитного момента, и поэтому наблюдаемая намагниченность насыщения соответствует фазе сосуществования ферромагнетизма и антиферромагнетизма, а не коллинеарной FM-структуры, для которой рассчитывался FM-момент. Отсюда следует, что возрастание электронного заполнения  $d$ -зоны (рис. 5), сопутствующее трансформации структуры плотности состояний при сжатии образца (рис. 6,в), приводит к увеличению FM-вклада фазы сосуществования (эксперимент, рис. 3,а,б) и, напротив, должно уменьшать магнитный момент коллинеарной FM-фазы (*ab initio* расчет). Подобная ситуация имеет место в системе  $Mn_{2-x}Fe_xAs_{0.5}P_{0.5}$  в области  $0.5 < x < 0.7$ , где сжатие решетки подавляет FM-фазу, однако стабилизирует индуцированную магнитным полем фазу сосуществования ферромагнетизма и антиферромагнетизма [9].

Сказанное объясняет практическое отсутствие барического возрастания намагниченности насыщения индуцированной фазы в  $MnCo_{0.8}Fe_{0.2}Si$  (см. рис. 3,в), поскольку эта фаза, по-видимому, является коллинеарным ферромагнетиком, магнитный момент насыщения которой в поле 100 kOe ( $M \approx 3.5\mu_B / f.u$ ) близок к расчетному значению ( $\mu = 3.28\mu_B / f.u$ ) для коллинеарной FM-структуры.

IV. Температурно-индуцированные переходы порядок–порядок могут возникать как результат конкурирующих тенденций, порождаемых температурными флуктуациями спиновой плотности. Возрастание амплитуды этих флуктуаций приводит не только к уменьшению локальной намагниченности, но и к существенному изменению исходной структуры плотности электронных состояний. Результатом этого может стать инверсия энергетического дисбаланса [10] между двумя потенциально возможными магнитными структурами (антиферромагнитной и ферромагнитной), прежде чем наступит полный магнитный беспорядок.

Отметим в заключение, что температурное расширение кристаллической решетки и связанный с ним магнитоэлектрический вклад в механизм переходов порядок–порядок в нашем случае не играет существенной роли, поскольку объем кристаллохимической ячейки в исследуемых сплавах в антиферромагнитном состоянии больше, чем в ферромагнитном [3], т.е. имеет место обратная (в сравнении с тепловым расширением) тенденция в изменении параметров решетки в процессе магнитного фазового перехода между этими состояниями.

Работа выполнена в рамках конкурсного проекта ДФФД-БРФФД № 29.1/016.



1. C.B. Shoemaker, D.P. Shoemaker, Acta Crystal. **18**, 900 (1965).
2. S. Nizol, H. Binczycka, A. Szytula, J. Todorovic, R. Fruchart, J.P. Senateur, D. Fruchart, Phys. Status Solidi **A45**, 591 (1978).
3. K.G. Sandeman, R. Daou, S. Ozcan, J.H. Durrell, N.D. Mathur, D.J. Fray, Phys. Rev. **B74**, 224436 (2006).
4. H. Binczycka, A. Szytula, J. Todorovic, T. Zaleski, A. Zieba, Phys. Status Solidi **A35**, K69 (1976).
5. Г.И. Маковецкий, А.И. Галяс, К.И. Янушкевич, В.Н. Шамбалеv, А.К. Богуш, Изв. НАНБ. Сер. физ.-техн. наук № 3, 10 (2000).
6. А.Ф. Вуль, Б.М. Тодрис, ПТЭ № 5, 208 (1989).
7. А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, Ю.Д. Заворотнев, Л.И. Медведева, Изв. РАН. Сер. физ. **72**, 1392 (2008).
8. Л.И. Медведева, УФЖ **24**, 1752 (1979).
9. 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).
10. В.И. Вальков, А.В. Головчан, ФНТ **33**, 1109 (2007).

*В.И. Вальков, И.Ф. Грибанов, С.О. Дворніков, О.П. Сиваченко, Б.М. Тодрис, О.В. Головчан, В.И. Міт'юк*

#### НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ПЕРЕХОДИ ПОРЯДОК–ПОРЯДОК У ДЕЯКИХ СИЛІЦІДАХ МАРГАНЦЮ З ОРТОРОМБІЧНОЮ КРИСТАЛІЧНОЮ СТРУКТУРОЮ ТИПУ $\text{Co}_2\text{P}$

Досліджено вплив тиску, температури і сильного магнітного поля на стійкість низькотемпературної (НТ) гелікоїдальної фази та особливості спонтанного і індукваного магнітним полем перетворення між гелікоїдальним і феромагнітним (FM) станами у магнітокалоричних сплавах  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) і  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  ( $0 \leq y \leq 0.2$ ). З перших принципів розраховано електронні структури і магнітні характеристики цих сплавів і проведено їх порівняння з експериментом. На базі отриманих результатів запропоновано механізм температурно-індукованих переходів порядок–порядок у розглянутих силіцидах, заснований на інверсії енергетичного дисбалансу між спіральним і FM-станами внаслідок спин-флуктуаційного перенормування первинної НТ-структури густини електронних станів.

**Ключові слова:** індуквані фазові перетворення, магнітні фазові перетворення під тиском, щільність електронних станів

*V.I. Valkov, I.F. Griбанov, E.A. Dvornikov, A.P. Sivachenko, B.M. Todris, A.V. Golovchan, V.I. Mitsiuk*

#### LOW TEMPERATURE ORDER–ORDER PHASE TRANSITIONS IN SOME MANGANESE-COBALT SILICIDES WITH ORTHORHOMBIC CRYSTAL STRUCTURE OF $\text{Co}_2\text{P}$ TYPE

Influence of pressure, temperature and a high magnetic field on stability of low-temperature (LT) helicoidal phase and peculiarities of the phase transition between heli-

colidal and ferromagnetic (FM) phases induced by magnetic field in magnetocaloric alloys  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) and  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  ( $0 \leq y \leq 0.2$ ) is investigated. Electronic structures and magnetic characteristics of the alloys are calculated from the first principles and their comparison with experiment is done. On the basis of the obtained results a mechanism is proposed for the temperature-induced order–order phase transitions in the considered silicides, based on inversion of power disbalance between spiral and FM states due to spin-fluctuation renormalization of the initial LT density of electronic states.

**Keywords:** induced phase transitions, magnetic phase transitions under external pressure, density of electronic states

**Fig. 1.** Temperature dependences of magnetization  $M$  for  $H = 9.7$  kOe and of reversible susceptibility  $\chi^{-1}$  for  $H = 8.6$  kOe of the  $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_x\text{Si}$  ( $a$ ) and  $\text{MnCo}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$  ( $b$ ) system alloys:  $\circ - x = 0.8$ ,  $\Delta - 0.9$ ,  $\nabla - 1.0$ ;  $\circ - y = 0$ ,  $\Delta - 0.05$ ,  $\nabla - 0.1$ ,  $\diamond - 0.2$

**Fig. 2.** Field dependences of magnetization under atmospheric pressure for the alloys:  $a - \text{MnCoSi}$ ,  $T = 273$  (1), 230 (2), 219 (3), 207 (4), 195 K (5);  $b - \text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$  for  $T = 20$  (1), 90 (2), 160 (3), 300 K (4);  $c - \text{Mn}_{1.2}\text{Co}_{0.8}\text{Si}$  for  $T = 308$  (1), 167 (2), 80 K (3)

**Fig. 3.** Field dependences of magnetization  $M$  and susceptibility  $dM/dH$  for the alloys:  $a - \text{MnCoSi}$ ,  $T = 219$  K and  $P = 0$  (1), 0.5 (2), 1.5 kbar (3);  $b - \text{Mn}_{1.2}\text{Co}_{0.8}\text{Si}$  for  $T = 263$  K and  $P = 0.15$  (1), 0.5 (2), 1.5 kbar (3);  $c - \text{MnCo}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Si}$  for  $T = 20$  K and  $P = 0.15$  (1) and 1.5 kbar (2)

**Fig. 4.** Total and partial contributions to ferromagnetic density of electronic states of  $\text{MnCoSi}$  for normal (solid lines) and hydrostatically compressed at  $\Delta V/V = -7\%$  (dotted lines) unit cell. The numerals stand for partial contributions to magnetic-moment values from  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -states ( $a$ ) and atoms Mn, Co, Si ( $b$ ) for normal (to the left) and compressed (to the right) cells. The Fermi levels are shown by vertical lines

**Fig. 5.** Changes in electron filling  $N$  of bands  $p$  ( $a$ ),  $s$  ( $b$ ),  $d$  ( $c$ ) and in magnetic moment  $M$  ( $d$ ) with changes in unit-cell volume  $V$  in ferromagnetic (■) and nonmagnetic (●) states. The vertical line corresponds to unit-cell volume under atmospheric pressure