

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

В.И. Вальков¹, А.В. Головчан^{1,2}, Д.В. Варюхин¹, Т.С. Сиваченко¹

ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ОДНООСНОМ СЖАТИИ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ $Fe_{a-x}Mn_xAs$

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

²Донецкий национальный университет
ул. Университетская, 24, г. Донецк, 83055, Украина

Статья поступила в редакцию 5 октября 2012 года

*В рамках модельного подхода, использующего полученную из *ab initio* расчетов информацию о числе *d*-электронов и форме плотности их электронных состояний, рассмотрены механизмы стабилизации неколлинеарных магнитоупорядоченных фаз, наблюдаемых в системе $Fe_{2-x}Mn_xAs$ внутри интервала $1.19 \leq x \leq 1.365$. На примере стехиометрического ($a = 2.0$) сплава с $x = 1.31$ показано, что барические особенности индуцированных магнитным полем переходов порядок–порядок связаны с характером перенормировок электронной структуры под давлением.*

Ключевые слова: антиферромагнетики, ферримагнетики, электронная структура, плотность электронных состояний

*У рамках модельного підходу, що застосовує отриману з *ab initio* розрахунків інформацію про кількість *d*-електронів і форму густини їхніх електронних станів, розглянуто механізми стабілізації неколінеарних магнітоупорядкованих фаз, які спостерігаються в системі $Fe_{2-x}Mn_xAs$ усередині інтервалу $1.19 \leq x \leq 1.365$. На прикладі стехіометричного ($a = 2.0$) сплаву з $x = 1.31$ показано, що баричні особливості індукованих магнітним полем переходів порядок–порядок пов'язані з характером перенормувань електронної структури під тиском.*

Ключові слова: антиферомагнетики, феримагнетики, електронна структура, густина електронних станів

Введение

Использование особенностей намагничивания материалов для технических приложений наиболее эффективно при наличии в них спонтанных магнитных фазовых переходов первого рода. В этом случае усиленные суперпозицией внутренних и внешних факторов магнитокалорические, магниторезистивные и магнитоэлектрические эффекты, сопровождающие

намагничивание, называют гигантскими [1]. При всем разнообразии этих материалов от редкоземельных металлов [2], манганитов [3] до проводящих пниктидов 3-*d*-переходных элементов [4] можно выделить важнейшее для реализации гигантских эффектов общее свойство – сильное взаимодействие между спин-поляризованной электронной и фононной системами. Такое взаимодействие ответственно за магнитострикцию, которая осуществляет связь между спиновым состоянием электронной системы и кристаллической решеткой. При этом магнитострикция становится причиной не только изменения симметрии кристаллической структуры и рода магнитного превращения порядок–беспорядок от типичного второго к первому [5,6], но и необратимых процессов – гистерезисных явлений, сопровождающих такие переходы по температуре, давлению и магнитному полю [7].

В прикладном использовании это приводит к дополнительным энергетическим потерям и снижению КПД работающих устройств. Поэтому важной является возможность управления формированием магнитострикции, что в многокомпонентных пниктидах 3-*d*-переходных элементов достигается за счет перераспределения электронной спиновой плотности путем изменения соотношения между компонентами [8]. Исследованию такого перераспределения, возникающего при одноосном сжатии в системе $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ с тетрагональной кристаллической решеткой *C*38 (группа симметрии *P4/nmm*), посвящена данная работа.

Результаты

Температурно-индуцированные магнитные фазовые переходы слабый неколлинеарный ферримагнетизм–антиферромагнетизм (LFI–AF), обнаруженные в сплавах системы $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$ при $1.95 \leq a \leq 2.35$, $1.29 \leq x \leq 1.52$, сопровождаются резким изменением намагниченности и анизотропной магнитострикцией (рис. 1).

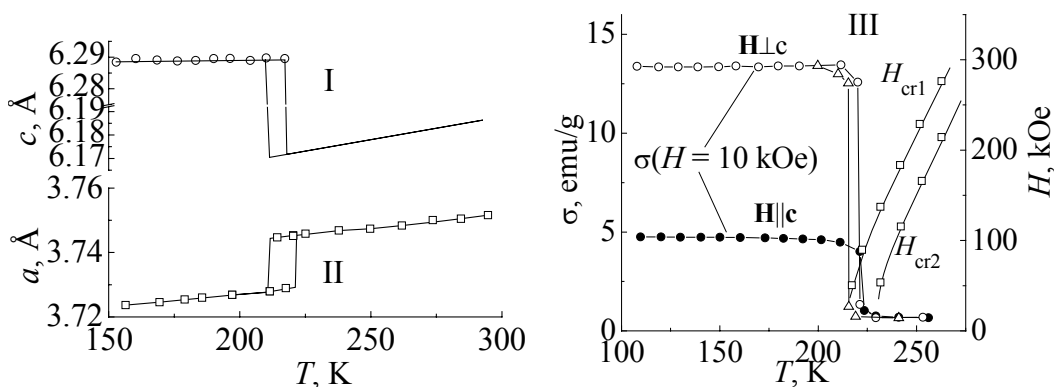


Рис. 1. Температурные зависимости параметров решетки *a* (I), *c* (II), намагниченности σ и критических полей H_{cr1} , H_{cr2} (III) для монокристаллического образца $\text{Fe}_{0.75}\text{Mn}_{1.25}\text{As}$ [9]

Как видно из рисунка, значительное уменьшение параметра c ($\Delta c/c_{AF} = -1.8\%$) сопровождается увеличением параметра a ($\Delta a/a_{AF} = 0.43\%$) и уменьшением объема ($\Delta V/V_{AF} = -0.94\%$), поэтому одноосное сжатие вдоль этих осей должно по-разному влиять на стабильность магнитоупорядоченных состояний и электронную структуру d -состояний. Экспериментальные исследования барических воздействий на магнитокалорическую систему $Fe_{a-x}Mn_xAs$ ($1.95 \leq a \leq 2.35$, $1.29 \leq x \leq 1.52$) подтвердили это и показали различную зависимость спонтанных магнитных фазовых переходов (LFI–AF) от различных видов гидростатического и одноосного давлений [9] (рис. 2). Индуцированные магнитным полем переходы AF–LFI, которые согласно рис. 1 можно наблюдать при температурах выше температуры исчезновения слабоферримагнитной фазы (T_{s2}), также по-разному смещаются в поле (рис. 3).

При интерпретации экспериментальных результатов мы предполагали, что само существование неколлинеарной ферримагнитной фазы LFI₁ и ее устойчивость по отношению к внешним воздействиям определяются характером изменений плотности электронных состояний и электронного заполнения d -зоны.

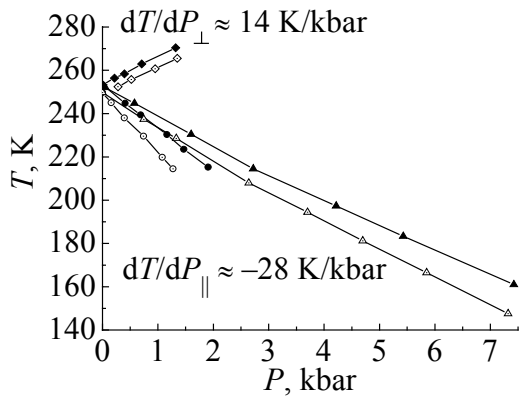


Рис. 2. Зависимости температуры возникновения (исчезновения) $T_{s1}(T_{s2})$ ферримагнитной (LFI) фазы $Fe_{0.935}Mn_{1.215}As$ ($a = 2.15$) от различных типов сжатия образца: $P = P_g$ – гидростатическое, $P||c$ – одноосное вдоль тетрагональной оси c ; $P\perp c$ – одноосное перпендикулярно этой оси; $\circ - T_{s1}$, $\bullet - T_{s2}$ ($P||c$); $\Delta - T_{s1}$, $\blacktriangle - T_{s2}$ ($P = P_g$); $\diamond - T_{s1}$, $\blacklozenge - T_{s2}$ ($P\perp c$)

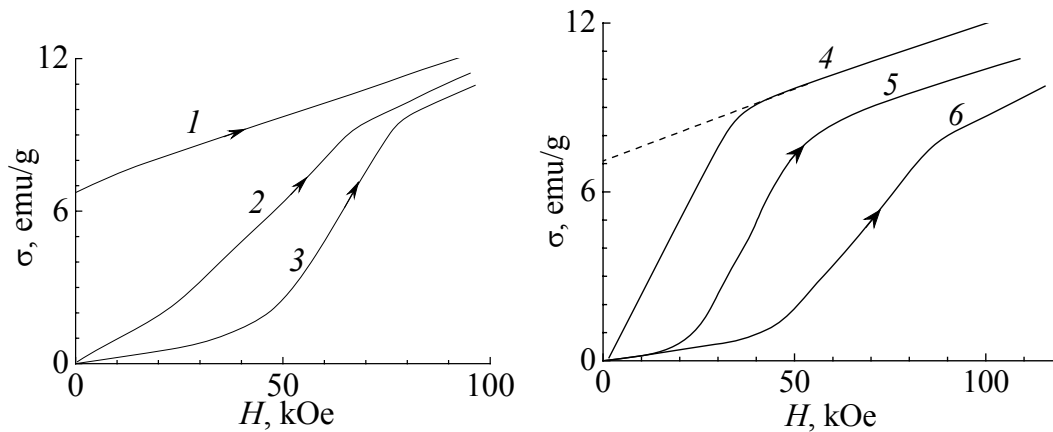


Рис. 3. Полевые зависимости намагничивания монокристаллического образца $Fe_{0.786}Mn_{1.414}As$ ($a = 2.2$) перпендикулярно (a) и вдоль (b) тетрагональной оси ($C||Z$) при воздействии одноосного давления (P , kbar: 1, 3, 4, 5 – 0.001; 2 – 0.52; 6 – 0.48) и температуры (T , К: 1 – 321; 2, 3 – 343; 4 – 313; 5, 6 – 331 [7]); 1, 4 – исходное слабоферримагнитное состояние; 2, 3, 5, 6 – антиферромагнитное состояние

Для исследования этих характеристик были проведены *ab initio* расчеты, для чего использовался полностью релятивистский метод Корринги–Кона–Ростокера (пакет программ SPRKKR [10]). В этом пакете расчет электронной структуры проводили в приближении когерентного потенциала для модели неупорядоченного сплава: предполагалось, что атомы Fe_I и Mn_I распределены хаотически по тетраэдрическим позициям. Постоянные кристаллической решетки для системы Fe_{2-x}Mn_xAs взяты из работы [11].

Из результатов предыдущих *ab initio* расчетов электронной структуры коллинеарных магнитоупорядоченных состояний, проведенных в [12], следует, что, например, для $x = 1.29$ наименьшей энергией обладает антиферромагнитное состояние AF1-1 ($E(\text{AF1-1}) - E(\text{FM}) = -0.00309 \text{ Ry}$). Ближайшее по энергии состояние со спонтанной намагниченностью (ферримагнитное типа FIM-I) находится значительно выше по энергии ($E(\text{FIM-I}) - E(\text{FM}) = -0.0006 \text{ Ry}$). Таким образом, возникновение спонтанной намагниченности в системе Fe_{2-x}Mn_xAs, вероятнее всего, обусловлено стабилизацией неколлинеарного (скошенного) ферримагнитного состояния. В скошенной или неколлинеарной ферримагнитной фазе LF_{I1} в узком интервале содержания Mn ($1.19 \leq x \leq 1.365$) сосуществуют антиферромагнитные и ферримагнитные характеристики этого соединения. К антиферромагнитным характеристикам можно отнести изменение направления суммарного магнитного момента кристаллографической ячейки на противоположное при смещении вдоль тетрагональной оси на период c . Можно полагать, что эти свойства сохраняются от исходных антиферромагнитных соединений Fe₂As, MnFeAs, Mn₂As с удвоенным периодом магнитной ячейки. Существование некомпенсированного макроскопического магнитного момента вдоль выделенного направления можно отнести к ферримагнитным характеристикам, приобретенным в результате конкуренции d -состояний Fe_I и Mn_I, хаотически распределенных по тетраэдрическим позициям в соединениях с $x > 1$.

Предполагается, что выигрыш в энергии слабоферримагнитного состояния LF_{I1} по сравнению с AF1-1 возникает в результате конкуренции кинетической и обменной энергий d -электронов, которые по-разному зависят от формы плотности электронных состояний и степени заполнения магнитоактивной зоны.

На рис. 4 приведены плотности d -электронных состояний как функции энергии для немагнитной фазы $\text{DOS}_{dNM}(E)$ в интервале $1.15 \leq x \leq 1.45$. Эти зависимости рассчитаны при условии $M(\text{Fe}_I) = M(\text{Mn}_I) = M(\text{Mn}_{II}) = M(\text{As}) = 0$ ($M(A)$ – магнитный момент A -го атома) и дают общее представление о форме функций $\text{DOS}_{dNM}(E)$.

Ab initio расчеты электронной структуры Fe_{0.69}Mn_{1.31}As для различных вариантов сжатия элементарной ячейки [8,12] позволяют построить зависимости параметров электронной структуры в немагнитной фазе как функции относительных объемных деформаций $\omega = (V - V_0)/V_0$ (см. рис. 6).

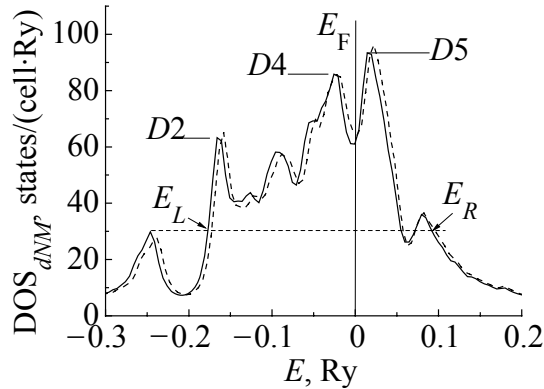


Рис. 4. Плотности d -электронных состояний некоторых соединений системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ в немагнитной фазе, приведенные к единому уровню Ферми: — — $x = 1.15$, --- — $x = 1.45$. Символами E_i , D_j отмечены характерные величины зависимости $\text{DOS}(E)$

При этом предполагается, что всестороннему сжатию соответствует пропорциональное уменьшение параметров ячейки; сжатие вдоль тетрагональной оси ($P \parallel c$) моделировалось так, чтобы уменьшение параметра c сопровождалось увеличением параметра a при результирующем уменьшении объема; одноосное давление в базисной плоскости ($P \perp c$) моделировалось как равномерное уменьшение параметра a при увеличении параметра c и общем увеличении объема ячейки.

В этом случае можно выделить наиболее общие закономерности изменения структуры немагнитной плотности электронных состояний и степени электронного заполнения как реакции на соответствующие типы деформации. Однородное или гидростатическое сжатия ($c/a = \text{const}$, $\omega < 0$) приводят к слабому уменьшению заселенности d -зоны N_d , увеличению параметров ΔE_{occup} , ΔE_{empt} , эффективной ширины d -зоны (ΔE) и уменьшению высоты пиков $D2$, $D5$ (рис. 5,а). Сжатие вдоль оси c сильнее уменьшает заселенность d -зоны, сужает область заполненных ($d\Delta E_{\text{occup}}/d|\omega| < 0$) и расширяет область пустых ($d\Delta E_{\text{empt}}/d|\omega| > 0$) состояний при общем увеличении ширины зоны ΔE (рис. 5,б). Одноосная деформация ($P \perp c$), которая приводит к увеличению объема ячейки ($\omega > 0$), сужает область пустых ($d\Delta E_{\text{empt}}/d\omega < 0$) при увеличении ширины области занятых ($d\Delta E_{\text{occup}}/d\omega > 0$) состояний таким образом, что эффективная ширина d -зоны сужается ($d\Delta E/d\omega < 0$). Это сопровождается также увеличением высот пиков $D2$, $D5$ и заселенности d -зоны N_d (рис. 5,в).

Таким образом, изменения выделенных параметров электронной системы вследствие вариации химического состава или межатомных расстояний могут лежать в основе механизма изменения стабильности магнитоупорядоченных фаз. Особенности проявления каждого из двух факторов (формы плотности электронных состояний и числа d -электронов) удобно анализировать на качественной модели. В качестве такой модели использовали двухузельную модель коллективизированных электронов [8], где в качестве параметров использовали величину внутриатомного обменного взаимодействия J и число d -электронов на состояние $n(x, \omega) = N_{dNM}(x, \omega)/20$, которые вычисляли непосредственно по данным *ab initio* расчетов электронной структуры системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ для различных типов сжатия элементарной ячейки ω .

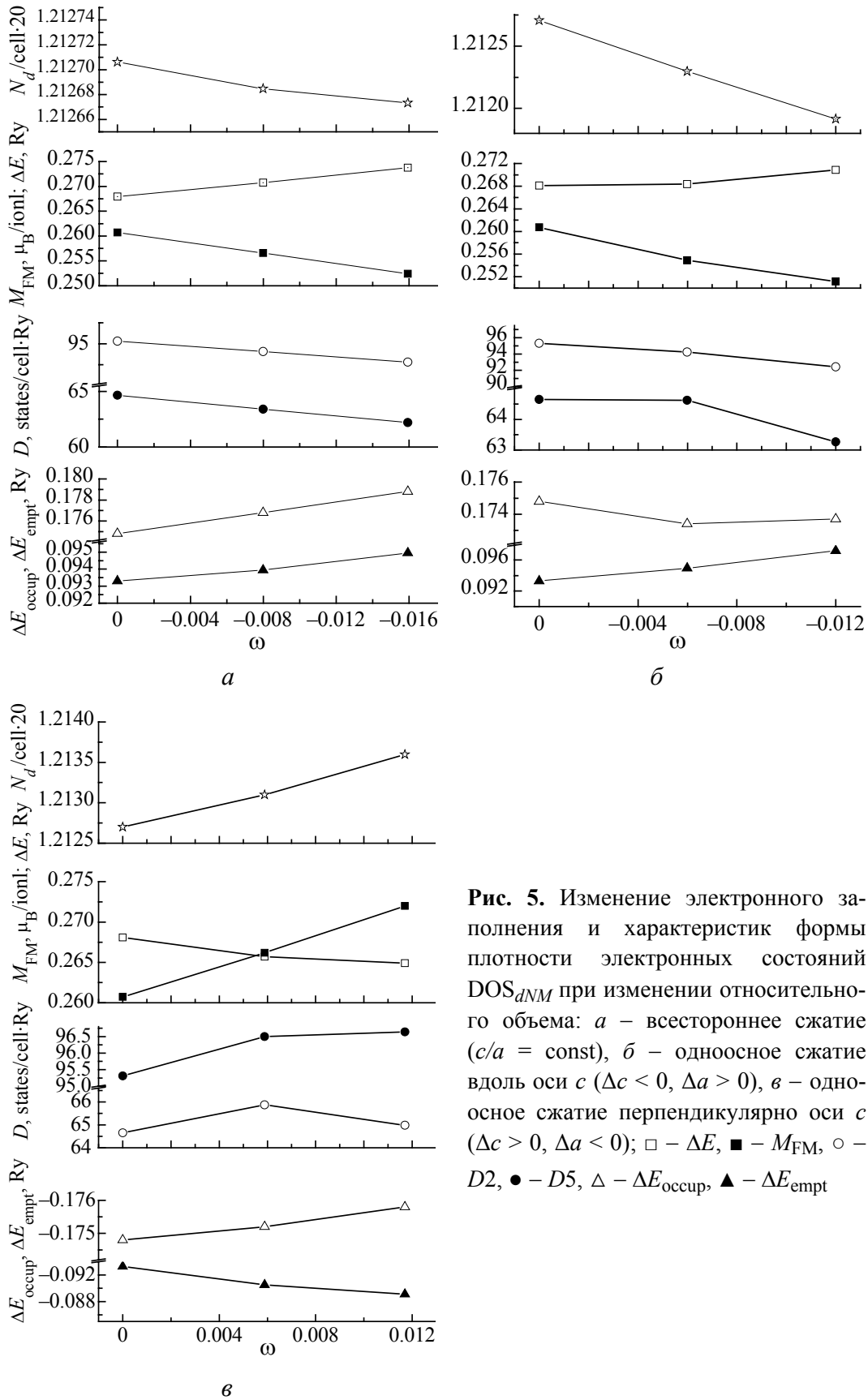


Рис. 5. Изменение электронного заполнения и характеристик формы плотности электронных состояний DOS_{dNM} при изменении относительного объема: *а* – всестороннее сжатие ($c/a = \text{const}$), *б* – одноосное сжатие вдоль оси *c* ($\Delta c < 0, \Delta a > 0$), *в* – одноосное сжатие перпендикулярно оси *c* ($\Delta c > 0, \Delta a < 0$); \square – ΔE , \blacksquare – M_{FM} , \circ – $D2$, \bullet – $D5$, \triangle – ΔE_{occup} , \blacktriangle – ΔE_{empt}

При модельном описании барических эффектов рассчитывали кривые намагничивания при использовании модельной плотности электронных состояний в немагнитной фазе $G_{NM}(E)$, которая по форме была идентична функции $DOS_{dNM}(E)$ (см. рис. 4). При заданном числе n ($x = 1.31$, ω) этого достигали подбором модельных параметров ε_L , ε_R , g_2 , g_4 , g_5 , сопоставляемых с величинами E_{occup} , E_{empt} , D_2 , D_5 , для относительных объемных деформаций ω различного типа (см. рис. 5). В качестве дополнительного контрольного результата сопоставляли модельные зависимости $m_{FM}(\omega)$ с зависимостями $M_{FM}(\omega)$, рассчитанными из первых принципов в [8] для соединения $Fe_{0.69}Mn_{1.31}As$ в ферромагнитной фазе FM.

Результаты расчетов приведены на рис. 6. Как видно из рисунка, модельные кривые качественно воспроизводят результаты воздействия как всестороннего, так и одноосных сжатий. В полном согласии с экспериментальными данными всестороннее сжатие и сжатие вдоль тетрагональной оси c оказывают дестабилизирующее воздействие на LFm_1 , LFm_2 и Fm [9]. Количественное различие между воздействием одноосного ($P||c$) и всестороннего сжатий проявляется в большем (при равных относительных деформациях)

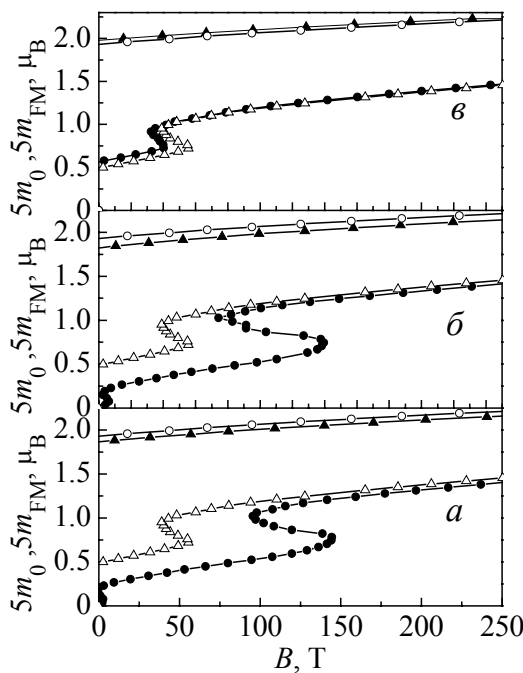


Рис. 6. Модельные кривые намагничивания в нормальном ($\Delta - m_{FM}$, $\omega = 0$; $\circ - m_0$, $\omega = 0$) и деформированном ($\bullet - m_0$, $|\omega| > 0$; $\blacktriangle - m_{FM}$, $|\omega| > 0$) состояниях при $n = 1.2128$ ($x = 1.31$): a – сжатие $\perp c$, $\omega = +0.588\%$; \bar{b} – сжатие $\parallel c$, $\omega = -0.6\%$; b – всестороннее сжатие, $\omega = -0.8\%$; \bar{b} , b сопоставляются с кривыми $b, 2$ на рис. 3

смещении спонтанных и индуцированных магнитным полем переходов $AF-LFm_1-LFm_2$ в область больших полей и более значительным изменением магнитного момента FM-фазы [8]. Согласно модельным представлениям эти различия обусловлены разными факторами. При всестороннем сжатии ($\omega = -0.8\%$, рис. 6, a), которое моделируется увеличением параметров ε_R , $|\varepsilon_L|$ и уменьшением g_2 , g_4 , g_5 , n , стабилизирующее уширение области пустых состояний ΔE_{empt} , частично компенсируется стабилизирующим расширением области занятых состояний ΔE_{occup} (рис. 5, a). Сжатие вдоль тетрагональной оси ($\omega = -0.6\%$, рис. 6, \bar{b}) моделируется более значительным увеличением ε_R при одновременном уменьшении параметров n , $|\varepsilon_L|$ и g_4 в соответствии с рис. 5, \bar{b} . Это приводит к более существенным смещениям всех состояний в область больших напряженностей магнитного

поля. Значения величин $m_{FM}(B)$ при этом в полном соответствии с расчетами из первых принципов [8] находятся существенно ниже аналогичных величин для $\omega = 0$. Кривые $m_0(B)$ сопоставляются с экспериментальными зависимостями на рис. 3,б, где воздействие одноосного давления вдоль тетрагональной оси c приводит к смещению слабоферромагнитной фазы LFi_1 в область больших магнитных полей.

В отличие от двух предыдущих случаев сжатие в перпендикулярном к тетрагональной оси направлении приводит к стабилизации состояний LFm_1 , LFm_2 , Fm и проявляется в увеличении спонтанных магнитных моментов m_{10} , m_{Fm0} состояний LFm_1 , Fm и смещении индуцированных переходов LFm_1-LFm_2 в область меньших магнитных полей (рис. 6,в). Подобное поведение, согласующееся с рассчитанными из первых принципов зависимостями $M_{FM}(\omega)$ [8] и экспериментальными результатами (см. рис. 3,а), моделируется уменьшением ϵ_R и увеличением n , g^4 и $|\epsilon_L|$ при уменьшении их суммы $\Delta\epsilon = |\epsilon_L| + \epsilon_R$ в соответствии с рис. 5,в.

Таким образом, особенности поведения спонтанных и индуцированных магнитным полем переходов порядок–порядок под давлением связаны с характером барических перенормировок электронной заселенности d -зон и параметров формы плотности электронных состояний. Согласно этому выводу управление магнитными свойствами исследуемой системы можно осуществлять изменением электронной заселенности d -зоны и вариацией характеристик плотности электронных состояний путем подбора соответствующих легирующих элементов.

Работа выполнена в рамках конкурсного проекта ДФФДУ-БРФФД № Ф41.1/038, Ф54.1/003. Расчеты электронной структуры выполнены при поддержке академической грид-программы НАН Украины, проект № 232.

1. *A. de Campos, D.L. Rocco, A.M.G. Carvalho, L. Caron, A.A. Coelho, S. Gama, L.M. da Silva, F.C.G. Gandra, A.O. dos Santos, L.P. Cardoso, P.J. von Ranke, and N.A. de Oliveira*, Nature Materials **5**, 802 (2006).
2. *К. Тејлор, М. Дарби*, Физика редкоземельных соединений, Мир, Москва (1974).
3. *Manh-Huong Phan, Seong-Cho Yu*, J. Magn. Magn. Mater. **308**, 325 (2007).
4. *A. Koumina, M. Bacmann, D. Fruchart et al.*, Moroccan Journal of Condensed Matter **5**, 117 (2004).
5. *C.P. Bean, D.S. Rodbell*, Phys. Rev. **126**, 104 (1962).
6. *В.И. Вальков, Э.А. Завадский, Е.Г. Галкина*, ФТТ **20**, 949 (1978).
7. *С.К. Асадов, Э.А. Завадский, В.И. Каменев, Е.Р. Stefanovskii, А.Л. Сукстанский, Б.М. Тодрис*, ФТТ **42**, 1649 (2000).
8. *В.И. Вальков, А.В. Головчан, В.П. Дьяконов, Н. Szymczak*, ФНТ **37**, 397 (2011).
9. *С.А. Бужинский, В.И. Вальков, Н.А. Романова*, ФТТ **33**, 1936 (1991).
10. *The Munich SPR-KKR package, version 3.6*, H. Ebert et al, <http://olymp.cup.uni-muenchen.de/ak/ebert/SPRKKR>; H. Ebert, in: Electronic Structure and Physical

Properties of Solids, H. Dreysse (ed.), Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin (2000), vol. 535, p. 191.

11. L. Hollan, Ann. Chim. **1**, 437 (1966).

12. В.И. Вальков, А.В. Головчан, ФНТ **34**, 53 (2008).

V.I. Valkov, A.V. Golovchan, D.V. Varyukhin, T.S. Sivachenko

CHANGES IN THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$ SYSTEM ALLOYS UNDER UNIAXIAL COMPRESSION

On the basis of *ab initio* calculations using a fully relativistic KKR method to study changes in the control panel, electronic density of states is considered, arising under uniaxial compression of alloys of the $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ system with P4/nmm symmetry group, where spontaneous and magnetic field induced transitions of AF to the non-collinear LFi₁, LFi₂ phases are observed. From the results of *ab initio* calculations, the most general regularities of changes in the structure of non-magnetic density of electronic states and the degree of electron filling of N_d as a reaction to the corresponding types of deformation were singled out. The uniform or hydrostatic compression ($c/a = \text{const}$, $\omega < 0$) result in a slight decrease in the population of the d -band N_d , an increase in the effective width of the filled and empty part of the d -band $\Delta E = \Delta E_{\text{filled}} + \Delta E_{\text{empty}}$. Compression ($P \parallel c$) along the tetragonal axis stronger reduces the population of the d -band, narrows the region of the filled states and expands the area of the empty states in a general increase in the band width ΔE . Uniaxial deformation ($P \perp c$), resulting in an increase in the relative volume of the cell ($\omega > 0$), narrows the field of the empty states while increasing the width of the occupied states in such a way that the effective width of the d -band narrows with increasing population of the d -band. The features of the effect of each of two factors (the form of the density of electronic states and the number of d -electrons) on the stability of magnetically ordered states was analyzed in the framework of a two-site model of itinerant electrons. The parameters used in the model were the value of the intra-exchange interaction J and the number of d -electrons per a state that were directly evaluated according to *ab initio* calculations of the electronic structure of $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ for different types of compression of an elementary cell ω . In full agreement with the experimental data, it was demonstrated that hydrostatic compression and compression along the tetragonal axis have a destabilizing effect on the angular phases LFi₁, LFi₂, and compression in the direction perpendicular to the tetragonal axis direction results in stabilization of LFi₁, LFi₂ states in the course of spontaneous and magnetic field induced transitions of AF–LFi₁–LFi₂.

Keywords: antiferromagnetics, ferrimagnetics, electronic structure, density of electronic states

Fig. 1. Temperature dependences of lattice parameters a , c , magnetization σ and critical fields $H_{\text{cr}1}$, $H_{\text{cr}2}$ for the single-crystal $\text{Fe}_{0.75}\text{Mn}_{1.25}\text{As}$ sample [9]

Fig. 2. Onset temperature $T_{s1}(T_{s2})$ of ferrimagnetic (LFi) phase of the $\text{Fe}_{0.935}\text{Mn}_{1.215}\text{As}$ sample ($a = 2.15$) at different types of compression: $P = P_g$ – hydrostatic compression, $P \parallel c$ – uniaxial compression along the tetragonal axis c ; $P \perp c$ – uniaxial compression perpendicular to this axis; \circ – T_{s1} , \bullet – T_{s2} ($P \parallel c$); Δ – T_{s1} , \blacktriangle – T_{s2} ($P = P_g$); \diamond – T_{s1} , \blacklozenge – T_{s2} ($P \perp c$)

Fig. 3. Field dependences of magnetization of the single-crystal $\text{Fe}_{0.786}\text{Mn}_{1.414}\text{As}$ sample ($a = 2.2$) perpendicular to the tetragonal axis ($C||Z$) (a) and along the axis (b) under uniaxial compression (P , kbar: 1, 3, 4, 5 – 0.001; 2 – 0.52; 6 – 0.48) and at the temperature (T , K: 1 – 321; 2, 3 – 343; 4 – 313; 5, 6 – 331 [7]); 1, 4 – the initial weakly ferrimagnetic state; 2, 3, 5, 6 – antiferromagnetic state

Fig. 4. Densities of the d -electron states of some compounds of the $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ system in the non-magnetic phase, reduced to the single Fermi level: — — $x = 1.15$, --- — $x = 1.45$. Symbols E_i, D_j mark the characteristic values of $\text{DOS}(E)$

Fig. 5. Relative volume dependence of electron filling and characteristics of the form of the density of electron states DOS_{dNM} : a – uniform compression ($c/a = \text{const}$); b – uniaxial compression along c axis ($\Delta c < 0, \Delta a > 0$); v – uniaxial compression perpendicular to c axis ($\Delta c > 0, \Delta a < 0$); \square – ΔE , \blacksquare – M_{FM} , \circ – $D2$, \bullet – $D5$, \blacktriangle – ΔE_{occup} , \triangle – ΔE_{empt}

Fig. 6. Model curves of magnetization in the normal state (\triangle – $m_{\text{FM}}, \omega = 0$; \circ – $m_0, \omega = 0$) and in the deformed state (\bullet – $m_0, |\omega| > 0$; \blacktriangle – $m_{\text{FM}}, |\omega| > 0$) at $n = 1.2128$ ($x = 1.31$): a – compression $\perp c, \omega = +0.588\%$; b – compression $\parallel c, \omega = -0.6\%$; v – uniform compression, $\omega = -0.8\%$; b, v are related to curves 6, 2 in Fig. 3