

УДК 538.915

СКИРМИОНЫ И ФЛУКТУАЦИИ СПИНОВЫХ СПИРАЛЕЙ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ С НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОЙ КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

© 2024 г. А. А. Повзнер^{а,*}, А. Г. Волков^а, Т. А. Ноговицына^а

^аУральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, 620002 Россия

*e-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Поступила в редакцию 12.01.2024 г.

После доработки 16.03.2024 г.

Принята к публикации 16.03.2024 г.

Исследованы сильно коррелированные твердые растворы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с нарушенной кубической структурой типа *B20*. В рамках спин-флуктуационной теории и в модели плотности электронных состояний, вытекающей из первопринципных расчетов в рамках обобщенного градиентного приближения с учетом сильных кулоновских корреляций (GGA+U), рассмотрены температурные переходы в сплавах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ (на примере $x = 0.2, 0.3$) со взаимодействием Дзялошинского–Мория. Показано, что в рассмотренных соединениях реализуется “размытый” по температуре магнитный фазовый переход первого рода, при котором имеет место изменение знака параметра межмодовой связи в функционале Гинзбурга–Ландау. Получено, что при таком переходе в ограниченных интервалах температур и внешних магнитных полей возникают скирмионные *A*-фазы, за пределами которых происходят экспериментально наблюдаемые флуктуации магнитных моментов спиновых спиралей. Построены ($h-T$)-диаграммы, на которых указаны область с дальним порядком, флуктуационная и скирмионной фазы, $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ при $x = 0.2$ и 0.3 согласуются с экспериментом.

Ключевые слова: геликоидальный ферромагнетизм, киральность, спиновые флуктуации, флуктуации спиновых спиралей, скирмионы, электронная структура, кристаллическая структура, фазовые переходы, фазовые диаграммы, взаимодействие Дзялошинского–Мория.

DOI: 10.31857/S1028096024080102, EDN: ELDEWZ

ВВЕДЕНИЕ

Моносилициды *3d*-переходных металлов с нарушенной кубической структурой типа *B20*, такие как MnSi [1, 2], $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [3, 4] и $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ [5], относятся к группе веществ, в которых наличие неоднородного обменного и кирального взаимодействия Дзялошинского–Мория (ДМ) [6, 7] приводит к возникновению геликоидальных ферромагнитных спиновых спиралей с периодами, которые примерно на два порядка превышают период кристаллической структуры, и с фиксированными по направлению волновыми векторами.

В области магнитных фазовых переходов в этих материалах в результате нейтронографических экспериментов можно наблюдать промежуточное

(между геликоидальной и парамагнитной фазами) состояние с ближним порядком в спиновой системе, в котором происходят флуктуации спиралей [8, 9]. При приложении внешних магнитных полей в этих материалах возникают скирмионы [10], природа формирования которых остается не выясненной.

В настоящей работе в рамках флуктуационной теории зонного магнетизма исследованы наблюдаемые при коротковолновом рассеянии поляризованных нейтронов ближний порядок в киральной спиновой системе и скирмионы при температурных фазовых переходах первого рода в $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ (на примере составов с $x = 0.2$ и 0.3).

МОДЕЛЬ

Сильно коррелированную электронную систему хиральных магнетиков $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ будем описывать на основе модели Хаббарда, учитывающей зонное движение и внутриатомные кулоновские корреляции [11, 12]. При моделировании внутриатомных корреляций будем принимать во внимание различие внутриатомных кулоновских взаимодействий на узлах кристаллической решетки, занятых атомами Fe или Co, а энергетический спектр зонного движения электронов будем рассматривать на основе результатов первопринципных расчетов в рамках обобщенного градиентного приближения с учетом сильных кулоновских корреляций (GGA+U), учитывающих кристаллическую структуру. Из результатов первопринципных расчетов электронной структуры сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, следует, что уровень Ферми сплавов находится в верхней энергетической зоне, сформированной преимущественно t_0 -состояниями, в которой орбитальным вырождением и взаимодействием Хунда можно пренебречь. На этом основании для расчетов используем гамильтониан модели Хаббарда [12], включающий слагаемые, описывающие зонное движение сильно коррелированных d -электронов в t_0 -орбитальном состоянии, энергетический спектр которых $\epsilon_k^{(\text{GGA})}$ может быть рассчитан в приближении GGA+U. Кроме того, для описания ферромагнитного геликоидального упорядочения, включим в данный гамильтониан слагаемое, описывающее энергию ДМ-взаимодействия, записанное в приближении среднего поля (в силу релятивистской малости этого взаимодействия): $\mathbf{h}_q^{(D)} = [\mathbf{M}_q \times \mathbf{d}_q]$ — среднее поле Дзялошинского, $\mathbf{M}_q (= \langle \mathbf{S}_q \rangle)$ — вектор неоднородной намагниченности на волновом векторе магнитной структуре \mathbf{q} в единицах два магнетона Бора ($2\mu_B$), $\mathbf{d}_q = i\mathbf{d}\mathbf{q}$.

Используя для учета межэлектронных корреляций процедуру преобразований Стратоновича—Хаббарда [13], сведем исходную многочастичную задачу к описанию движения не взаимодействующих между собой d -электронов со спектром $\epsilon_k^{(\text{GGA})}$ во флуктуирующих в пространстве и времени обменном (ξ) и зарядовом (η) полях. В результате статистическую сумму $Z(x, \mathbf{h}_q)$ сильно коррелированных d -электронов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ запишем в виде интеграла от функционала Гинзбурга—Ландау—Бразовского [14, 15] по реальным и мнимым частям этих полей:

$$Z(x, \mathbf{h}_q) = \int (d\xi d\eta) (d\Omega) \times \exp \left\{ - \sum_q \left| \xi_q - \frac{\mathbf{h}_q}{c} \right|^2 - \sum_q |\eta_q|^2 + \Psi(x, \xi, \rho) \right\}. \quad (1)$$

Здесь: $(d\xi d\eta) = d\xi_0 d\eta_0 \prod_{q \neq 0, j=1,2} d\xi_q^{(j)} d\eta_q^{(j)}$ индекс j нумерует реальную и мнимую части стохастических ξ - и η -полей; $(d\Omega) = \prod_{\mathbf{v}} d\Omega_{\mathbf{v}}, d\Omega_{\mathbf{v}}$ — элемент телесного угла в направлении вектора $\xi_{\mathbf{v}}$; $\mathbf{v} = (\mathbf{v}, \tau)$, \mathbf{v} и τ — вектор узла кристаллической решетки, занятый Fe или Co, и мацубаровское время соответственно; $c = (UT)^{1/2}$, $U = (1-x)U_{\text{Fe}} + xU_{\text{Co}}$, U_{Fe} и U_{Co} — кулоновские потенциалы, соответственно, железа и кобальта, а функционал Гинзбурга—Ландау имеет вид:

$$\Psi(x, \xi, \rho) = \sum_q (Ug(x, \mu) + X_q) \left(|\xi_q|^2 - |\rho_q/2|^2 \right) + \kappa(x, \mu) \sum_{\mathbf{v}} \left[(\xi_{\mathbf{v}}^2 - \rho_{\mathbf{v}}^2 / 4)^2 \right], \quad (2)$$

где $g(x, \mu)$ — плотности состояний d -электронов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ при энергии химического потенциала μ , значение которого определяется условием электронейтральности (подробнее см. ниже); $\kappa = U^3 \left(g^{(2)}(\mu) - \frac{g^{(1)2}(\mu)}{g(\mu)} \right)$ — параметр спин-спинового и спин-зарядового межмолекулярных взаимодействий, $g^{(n)}(\epsilon)$ — n -ая производная плотности состояний по энергии (ϵ); среднее поле $\mathbf{h}_q = \mathbf{h}_q^{(D)} + \mathbf{h}\delta_{\mathbf{q},0}$ включает однородное внешнее магнитное поле \mathbf{h} (в единицах $2\mu_B$) и поле Дзялошинского. Величины

$$\xi_{-q} = c \left(\xi_{-q} + (2U)^{-1} (U_{\text{Co}} - U_{\text{Fe}}) \sum_{\mathbf{v}} \delta p_{\mathbf{v}}^{1/2} \xi_{\mathbf{v}} \exp(iq\mathbf{v}) \right)$$

и

$$\rho_{-q} = c \left(\eta_{-q} - (2U)^{-1} (U_{\text{Co}} - U_{\text{Fe}}) \sum_{\mathbf{v}} \delta p_{\mathbf{v}} \frac{\sum_{\sigma} \langle n_{\sigma 0} \rangle \exp(iq\mathbf{v})}{4} \right)$$

— фурье-образы обменного и зарядового полей на узле \mathbf{v} и в представлении мацубаровского τ , описывают как термодинамические эффекты, так и концентрационные флуктуации локальной спиновой и зарядовой плотностей соответственно; $\langle n_{\sigma 0} \rangle$ — заполнение d -состояний электронами со спином $\sigma (= \pm 1)$ в приближении GGA+U; x — концентрация Co; $\delta p_{\mathbf{v}} = p_{\mathbf{v}} - x$, $p_{\mathbf{v}}$ — идемпон-

тентный оператор, равный единице, если узел \mathbf{v} кристаллической решетки $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ занят атомом Co , и нулю — если занят атомом Fe . Будем считать, что атомы Co и Fe распределены по узлам кристаллической решетки хаотически, то есть $\overline{\delta p_{\mathbf{v}} \delta p_{\mathbf{v}'}} = \delta_{\mathbf{v}, \mathbf{v}'} x(1-x)$, где чертой над величинами обозначена операция усреднения по узлам кристаллической решетки.

Отметим, что в рассматриваемой задаче о фазовых переходах в киральных магнетиках с аномально большими периодами магнитной структуры, квантово-статистическое вычисление выражения для функционала свободной энергии $\Psi(x, \zeta, \rho)$ можно рассматривать в приближении, когда пространственно-временная неоднородность локальных полей [16, 17] возникает вследствие зависимости магнитной восприимчивости Паули $\chi_q^{(0)}$ от квазиимпульса и частоты. Поэтому функционал свободной энергии (2) следует дополнить слагаемым $X_q |\zeta_q|^2$, где $X_q = U(\chi_0^{(0)} - \chi_q^{(0)})$, с четырехмерным вектором $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$, в котором \mathbf{q} — квазиимпульс, ω_{2n} — мацубаровская Бозе-частота. Слагаемое $X_q |\zeta_q|^2$ дает поправку, учитывающую пространственно-временную неоднородность функции Линдхарда. Введение этого слагаемого позволяет учесть аномальное изменение фактора обменного усиления в области фазового перехода [16].

Поскольку в исследуемых квазибинарных сплавах зарядовое упорядочение является невозможным, и флуктуации зарядовой плотности ведут к большим флуктуациям энергии, постольку они являются маловероятными. Поэтому, при расчете статистической суммы (1), слагаемыми, пропорциональными ρ_q с $q \neq 0$, можно пренебречь.

Вычисление функциональных интегралов в (1) осуществляли в приближении седловой точки, отвечающем условию максимума подынтегрального выражения в (1) по переменным: $\eta_0 \equiv \text{Re} \eta_0$ ($\text{Im} \eta_0 = 0$), $\text{Re} \eta_q$ и $\text{Im} \eta_q$ с $q \neq 0$, $\xi_0^{(\gamma)} \equiv \text{Re} \xi_0^{(\gamma)}$ ($\text{Im} \xi_0^{(\gamma)} = 0$), $\text{Re} \xi_q^{(\gamma)}$ и $\text{Im} \xi_q^{(\gamma)}$ с $q \neq 0$ и $\omega_{2n} = 0$, $|\xi_q^{(\gamma)}|$ с $q = (\mathbf{q}, \omega_{2n})$ при $\omega_{2n} \neq 0$. Можно показать [12], что получаемые перевальные значения обменных полей связаны с фурье-образами локальной намагниченности и спиновыми корреляторами соотношениями: $\xi_q^{(\gamma)} = TM_q^{(\gamma)} / c + h_q^{(\gamma)} / U$ и $|\xi_q^{(\gamma)}|^2 = \left(\left\langle T_{\tau} |S_q^{(\gamma)}|^2 \right\rangle + 1 \right) / 2$, $\gamma = (x, y, z)$.

Из условий перевала для обменных полей получаем уравнения магнитного состояния

$$M_0^{(z)} \left(D^{-1} + 2\kappa \sum_{\mathbf{q}_0} |M_{\mathbf{q}_0}^{(z)}|^2 \right) + 2\kappa \sum_{\mathbf{q}_0^{(1)}, \mathbf{q}_0^{(2)}, \mathbf{q}_0^{(3)}} \times \times M_{\mathbf{q}_0^{(1)}}^{(z)} \left(M_{\mathbf{q}_0^{(2)}} M_{\mathbf{q}_0^{(3)}} \right) \delta_{\sum_i \mathbf{q}_0^{(i)} = 0} = \frac{h}{U}, \quad (3a)$$

$$M_{\mathbf{q}}^{(\gamma)} \left(D^{-1} + 2\kappa M_0^{(z)} + \kappa \sum_{\mathbf{q}' \neq 0} |M_{\mathbf{q}'}|^2 + Aq_0^2 \right) + 2\kappa \sum_{\mathbf{q}' \neq 0} (M_{\mathbf{q}} M_{-\mathbf{q}'}) M_{\mathbf{q}'}^{(\gamma)} + \kappa (M_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}}) M_{-\mathbf{q}}^{(\gamma)} + \kappa \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{q}'' \neq 0} (M_{\mathbf{q}'} M_0^{(z)}) M_{\mathbf{q}''}^{(\gamma)} \delta_{\mathbf{q}' + \mathbf{q}''; \mathbf{q}} + \kappa \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}' \neq 0} (M_{\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}'}) M_0^{(z)} \delta_{\mathbf{q} + \mathbf{q}'; \mathbf{q}} = \frac{h_q^{(D)}}{U}, \quad (3b)$$

где $D^{-1} = 1 - Ug(x, \mu) + \tilde{\kappa} \frac{5 \langle m^2 \rangle}{3}$ — парамагнитный фактор обменного усиления, $\langle m^2 \rangle$ — средний квадрат термодинамических флуктуаций спиновой плотности; $M_{\mathbf{q}}$ — Фурье-образ локальной намагниченности на узле, $\tilde{\kappa} = \kappa + x(1-x) \frac{(U_{\text{Fe}} - U_{\text{Co}})}{U}$ — перенормированный концентрационными флуктуациями параметр межмодового взаимодействия.

Достаточное условие существования максимума подынтегральной функции (1), а значит устойчивости найденных решений уравнений (3a, 3b), сводится к следующим неравенствам:

$$2r_{q\gamma}^2 - 1 > 0; D_{\gamma}^{-1} + \kappa \left(c \xi_0^{(\gamma)} \right)^2 > 0.$$

Это условие соответствует стандартному термодинамическому условию положительности магнитной восприимчивости [12].

Химический потенциал системы (μ) удовлетворяет условию перевала по η_0 , которое оказывается эквивалентным условию электронейтральности и в первом исчезающем приближении по зарядовым и обменным полям имеет вид:

$$(N/N_0) = \partial F / \partial \mu \equiv 2 \int d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon - \mu) + 2U^2 g^{(1)}(\mu) \left[\langle m^2 \rangle + \sum_{\mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 - \eta^2 / 4 \right]. \quad (4)$$

Для параметра пространственно-временной неоднородности X_q будем использовать модель функции Линдхарда [18, 19], и после аналитического продолжения на ось действительных частот будем записывать в виде:

$$X(\mathbf{q}, \omega) = U \left(\chi^{(0)}(0,0) - \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \right) = \left(A\mathbf{q}^2 - iC \frac{\omega\theta(\omega_0 - \omega)}{|\mathbf{q}|} \right), \quad (5)$$

где $|\mathbf{q}|$ — в единицах $2k_F$, параметры A и C выражаются через значения плотности состояний и ее производных на энергии Ферми при нормальном давлении, $\omega_0 = 2v_F k_F$, v_F — скорость на поверхности Ферми, k_F — модуль волнового вектора Ферми.

Тогда из условия максимума подынтегрального выражения статистической суммы (1) по компонентам волнового вектора \mathbf{q} для модуля волнового вектора геликоидальной магнитной структуры \mathbf{q}_0 направленного перпендикулярно плоскости, в которой лежат вектора $\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}$ и $\mathbf{M}_{-\mathbf{q}_0}$, имеем: $q_0 = d(1 - D^{-1})/2UA \approx d/2UA$.

При анализе фазовых переходов первого рода в модели Гинзбурга–Ландау в соответствии с уравнениями магнитного состояния (3а, 3б) получаем, что хиральный ферромагнитный дальний порядок реализуется, когда фактор обменного усиления (D^{-1}) и параметр межмодового взаимодействия (κ) положительны. В этих условиях дальний порядок можно описать как “левый” хиральный, с фурье-образами намагниченности $M_{\mathbf{q}_0}^{(x)} = M_S$, $M_{\mathbf{q}_0}^{(y)} = \text{sgn}(\mathbf{q}_0) i M_S$, $M_{\pm\mathbf{q}_0}^{(z)} = 0$ и $\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{h}$, где магнитная восприимчивость

$$\chi = 2U^{-1} \left[\left(X(\mathbf{q}_0, 0) + \kappa \left(|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2 + \langle m^2 \rangle \right) \right)^{-1} - 1 \right]. \quad (6)$$

Для значений внешнего однородного магнитного поля, определяемых неравенством: $h^{(z)}(1 + M_S) > d|\mathbf{q}_0|M_S/(4|\kappa|)$, решения уравнений (3а, 3б) описывают скирмионную систему, в которой

$$M_{\mathbf{v}}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_{0,i} \mathbf{v} + \phi), \quad M_{\mathbf{v}}^{(y)} = M_S \sin(\mathbf{q}_{0,i} \mathbf{v} + \phi), \quad (7)$$

$$M_{\mathbf{v}}^{(z)} = \left| M_{q_0}^{(z)} \right| \cos(\mathbf{q}_{0,i} \mathbf{v} + \phi) + M_0^{(z)}.$$

Вследствие стохастических флуктуаций фазы ϕ оси квантования внутри скирмионных областей могут быть направлены в одном из трех направлений системы координат. Поэтому уравнения (7) в случае скирмионной решетки следует отнести к локальной системе координат и в согласии с экспериментом [10] скирмионная фаза характеризуется шестью векторами одинаковых по модулю \mathbf{q}_0 .

В полях, удовлетворяющих неравенству $h^{(z)}(1 + M_S) < d|\mathbf{q}_0|M_S/(4|\kappa|)$, происходит смена знака параметра межмодового взаимодействия и с увеличением температуры реализуется фазовый переход первого рода. Выше температуры T_C , которая определяется из условия $\kappa(T_C) = 0$ при $D^{-1} < 0$ возникает термодинамически неустойчивая фаза флуктуаций магнитного момента спиралей.

В этой температурно-концентрационной области ($T_C \leq T \leq T_{DM}$) сохраняется “левый” хиральный ближний магнитный порядок в виде фрагментов спиновой спирали:

$$M_{\mathbf{v}}^{(x)} = M_S \cos(\mathbf{q}_0 \mathbf{v} - \phi)$$

$$\text{и } M_{\mathbf{v}}^{(y)} = -M_S \sin(\mathbf{q}_0 \mathbf{v} - \phi), \quad (8)$$

с изменяющимися хаотически фазами ϕ , которые, как мы предполагаем, являются разностью электронных фаз Берри [20], поскольку известно, что в соединениях семейства со структурой типа $B20$ на поверхности Ферми имеется пересечение ветвей спектра, которое приводит к кривизне Берри [21, 22], причем $M_{\pm\mathbf{q}_0}^{(z)} = 0$, $\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{h}$.

Вследствие ферромагнитных спиновых корреляций значение ϕ оказывается фиксированным в пределах радиуса корреляций $R_C \sim \chi^{1/2}$, который при $D^{-1} < 0$ определяется выражением:

$$R_C = k_F^{-1} A^{1/2} \left(|\kappa| \left(|\mathbf{M}_{\mathbf{q}_0}|^2 + \langle m^2 \rangle \right) \right)^{-1/2}.$$

Далее с изменением температуры и внешнего магнитного поля формируется изменение знака фактора обменного усиления, что приводит к возникновению при $T_{DM}(H)$ (определяется условием $D^{-1}(T_{DM}) = 0$) парамагнитного состояния с положительным значением параметра межмодового взаимодействия. Области спиновых корреляций характеризуются фиксированным значением фазы ϕ . Если ϕ исчезает, то исчезают и решения (8), описывающие спиновые корреляции.

МАГНИТНАЯ (h – T)-ДИАГРАММА В МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ MnSi

Для численного анализа полученных выражений были использованы плотности электронных состояний, рассчитанные в рамках приближения GGA+U для составов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с $x = 0.2$ и 0.3 . Соответствующие результаты представлены на рис. 1. Кроме того, согласно полученным

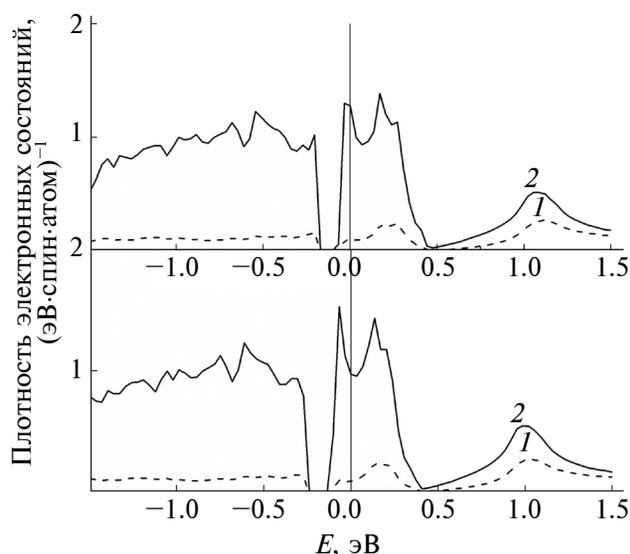


Рис. 1. Плотность электронных состояний sp (1) и d (2) сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ $x = 0.2$ (сверху) и 0.3 (снизу). Положение уровня Ферми совпадает с началом отсчета энергии. Параметры хаббардовского взаимодействия задавали в приближении виртуального кристалла: $U = (1-x)U_{\text{Fe}} + xU_{\text{Co}}$, $U_{\text{Co}} = 2.4$ эВ, $U_{\text{Fe}} = 1.2$ эВ, x — концентрация кобальта.

результатам для сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, плотность электронных состояний состоит из двух зон, разделенных энергетической щелью, а зона, в которой находится уровень Ферми, формируется синглетными t_0 -электронными состояниями. Можно отметить, что в рассматриваемых составах уровень Ферми расположен вблизи области локального минимума плотности состояний (рис. 1).

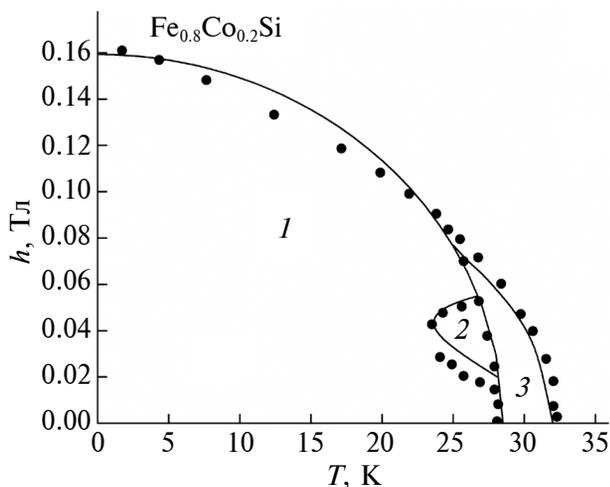


Рис. 2. Фазовая диаграмма сплава $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Si}$: точки — экспериментальные данные [8]; линии — результат расчетов.

Используя выражения (3), (4) и результаты расчетов в рамках GGA+U можно показать, что в сплавах $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$ возникает смена знака κ , что ведет к резкому возрастанию тепловых флуктуаций. Значения параметров функции Линдхарда A и C определяли из сопоставления результатов расчетов магнитной восприимчивости (6) с экспериментальными данными при $\mathbf{h} = 0$, а значения параметров Дзялошинского—Мория, использованные при расчетах, были заимствованы из работы [3].

Поскольку смена знака κ при температуре равной T_C не сопровождается исчезновением локального магнитного момента, так как магнитные фазовые переходы в исследуемых сплавах оказываются “растянутыми” по температуре. В интервале температур выше $T_C(x)$ и ниже $T_{\text{DM}}(x)$ возникает область геликоидального ближнего порядка с флуктуациями магнитного момента “левых” киральных спиновых спиралей. Рассчитанные $(h-T)$ -диаграммы для соединений с $x = 0.2$ и 0.3 приведены на рис. 2 и 3.

Кроме того, мы получаем, что на фазовых $(h-T)$ -диаграммах формируются скирмионные “карманы” (область 2 на рис. 2 и 3).

Границы (h_1 и h_2) этого интервала полей определяются уравнением: $h(1 + M_S(h)) = d|\mathbf{q}_0| \frac{M_S(h)}{(4|\kappa(h)|)}$, и отвечают возникновению спиновых конических структур (область 1 на рис. 2 и 3). Кроме того, численный анализ показывает, что за температурно-полевыми границами области существования скирмионной фазы и области с геликоидальным

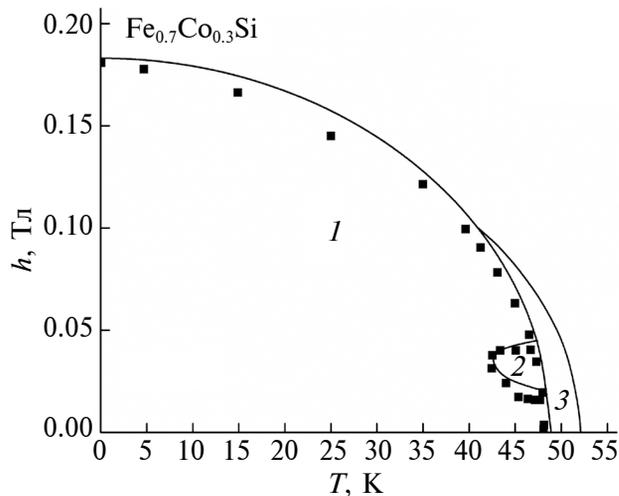


Рис. 3. Фазовая диаграмма сплава $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$: точки — экспериментальные данные [10]; линии — результат расчетов.

дальним порядком (область 1 на рис. 2 и 3) реализуется фаза флуктуации магнитного момента спиралей (область 3 на рис. 2 и 3), которые наблюдаются при исследованиях коротковолнового рассеяния поляризованных нейтронов [4, 23].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе с учетом результатов моделирования электронной структуры в рамках приближения GGA+U показано, что в киральных ферромагнетиках на основе квазибинарных сплавов переходных металлов (на примере $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Si}$ и $\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{Si}$), термодинамические и концентрационные флуктуации магнитных моментов, приводят к концентрационным превращениям, при которых возможна смена знака параметра межмодового взаимодействия. Показано, что в рассматриваемых составах реализуется “размытый” по температуре магнитный фазовый переход первого рода, при котором имеет место изменение знака параметра межмодовой связи в функционале Гинзбурга–Ландау. В этом случае возникает промежуточная область между фазами с дальним порядком в магнитной системе и парамагнитной фазой с ближним порядком в спиновой системе, характеризуемым пространственными флуктуациями магнитного момента. Получены интервалы внешних магнитных полей, при которых в рассматриваемой области “размытого” фазового перехода возникают скирмионы.

Показано, что причиной возникновения наблюдаемых особенностей спиновых корреляций в геликоидальных ферромагнетиках $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с ДМ-взаимодействием являются “размытые” по температуре фазовые переходы первого рода, которые, в соответствии с моделью Гинзбурга–Ландау, приводят к термодинамически неравновесному киральному ферромагнетизму с отрицательной межмодовой связью.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Результаты были получены в рамках задания Министерства образования и науки Российской Федерации № FEUZ-2023-0015.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Beille J., Voiron J., Towfiq F., Roth M., Zhang Z.Y. // J. Phys. F: Met. Phys. 1981. V. 11. P. 2153.
2. Ступов С.М., Перова А.Е. // УФН. 2011. Т. 181. № 11. С. 1157.
<https://www.doi.org/10.3367/UFNr.0181.201111b.1157>

3. Григорьев С.В., Дядькин В.А., Малеев С.В., Menzel D., Schoenes J., Lamago D., Москвин Е.В., Eckerlebe H. // ФТТ. 2010. Т. 52. № 5. С. 852.
4. Siegfried S.-A., Altynbaev E.V., Chubova N.M., Dyadkin V., Chernyshov D., Moskvina E.V., Menzel D., Heinemann A., Schreyer A., Grigoriev S.V. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. P. 184406.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.184406>
5. Grigoriev S.V., Dyadkin V.A., Moskvina E.V., Lamago D., Wolf Th., Eckerlebe H., Maleyev S.V. // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 144417.
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.144417>
6. Дзялошинский И.Е. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. № 6. С. 1548.
7. Moriya T. // Phys. Rev. 1960. V. 120. P. 91.
8. Bauer A., Garst M., Pfeleiderer C. // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. P. 235144.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.235144>
9. Janoschek M., Garst M., Bauer A., Krautscheid P., Georgii R., Boni P., Pfeleiderer C. // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. P. 134407.
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.134407>
10. Münzer W., Neubauer A., Adams T., Mühlbauer S., Franz C., Jonietz F., Georgii R., Böni P., Pedersen B., Schmidt M., Rosch A., Pfeleiderer C. // Phys. Rev. B. 2010. V. 72. P. 041203.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.041203>
11. Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238.
12. Moriya T. // Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism. Berlin: Springer-Verlag, 1985.
13. Hubbard J. // Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. P. 77.
14. Brazovskii S.A., Dzyaloshinskii I.E., Kukharensko B.G. // Sov. Phys. JETP. 1976. V. 43. P. 1178.
15. Brando M., Belitz D., Grosche F.M., Kirkpatrick T.R. // Rev. Mod. Phys. 2016. V. 88. P. 25006.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.025006>
16. Hertz J.A., Klenin M.A. // Phys. Rev. B. 1974. V. 10. № 3. P. 1084.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.10.1084>
17. Hertz J.A., Klenin M.A. // Physica B. 1977. V. 91. № 1. P. 49.
18. Lindhard J. // Dan. Mat. Fys. Medd. 1954. V. 28. № 8. P. 1.
19. Dzyaloshinskii I.E., Kondratenko P.S. // Sov. Phys. JETP. 1976. V. 43. № 5. P. 1036.
20. Berry M.V. // Proc. Royal Soc. London A. 1984. V. 392. P. 45.
<https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023>
21. Wilde M.A., Dodenhöft M., Niedermayr A., Bauer A., Hirschmann M.M., Alpin K., Schnyder A.P., Pfeleiderer C. // Nature. 2021. V. 594. P. 374.
<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03543-x>
22. Vergniory M.G., Elcoro L., Felser C., Regnault N., Bernevig B.A., Wang Z. // Nature. 2019. V. 566. P. 480.
<https://doi.org/10.1038/s41586-019-0954-4>
23. Bannenberg L.J., Kakurai K., Qian F., Lelievre-Berna E., Dewhurst C.D., Onose Y., Endoh Y., Tokura Y., Pappas C. // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 104406.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.104406>

Skyrmions and Fluctuations of Spin Spirals in Strongly Correlated $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ with Noncentrosymmetric Cubic Structure

A. A. Povzner^{1, *}, A. G. Volkov¹, T. A. Nogovitsyna¹

¹Ural Federal University Named After the First President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, 620002 Russia

*e-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Strongly correlated $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ solid solutions with broken $B20$ -type cubic structure are studied. Within the framework of the spin-fluctuation theory and in the model of the density of electronic states, arising from first-principles calculations within the framework of the generalized gradient approximation taking into account strong Coulomb correlations (GGA+U) temperature transitions are considered in strongly correlated $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ alloys (for example, $x = 0.2, 0.3$) with the Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction. It is shown that in the compositions under consideration, a first-order magnetic phase transition, which is prolonged in temperature, occurs, during which the sign of the intermode coupling parameter in the Ginzburg–Landau functional changes. It is found that such a transition results in the formation of skyrmion A -phases in limited ranges of temperatures and external magnetic fields, beyond which the experimentally observed fluctuations of spin spirals are realized. The constructed $(h-T)$ -diagrams (which indicate the range of long-range order, fluctuation and skyrmion phases) of $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ at $x = 0.2$ and 0.3 are consistent with the experiment.

Keywords: helicoidal ferromagnetism, chirality, spin fluctuations, spin helix fluctuations, skyrmions, electronic structure, crystal structure, phase transitions, phase diagrams, Dzyaloshinskii–Moriya interaction.