

## Взаимосвязь между структурным и магнитным параметрами порядка в кристаллах

Ю.Д. Заворотнев

*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины  
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114, Украина  
E-mail: zavorotnev.yurii@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 24 мая 2012 г., после переработки 12 сентября 2012 г.

Теоретически определены условия, при которых возможна смена рода магнитного фазового перехода (ФП) из неупорядоченного в магнитоупорядоченное состояние, когда температуры структурного и магнитного ФП близки друг к другу. Найдены зависимости величины скачка намагниченности и температуры перехода от параметров феноменологического потенциала при совмещении структурного и магнитного ФП. Изучена вынужденная перестройка структурного параметра порядка (ПП) под воздействием периодических изменений модуля магнитного ПП в фазе со спиральной структурой.

Теоретично визначено умови, при яких можлива зміна роду магнітного фазового переходу (ФП) з неупорядкованого в магнітоупорядкований стан, коли температури структурного і магнітного ФП близькі одна до одної. Знайдено залежності величини стрибка намагніченості та температури переходу від параметрів феноменологічного потенціалу при поєднанні структурного і магнітного ФП. Вивчено вимушену перебудову структурного параметра порядку (ПП) під впливом періодичних змін модуля магнітного ПП у фазі із спіральною структурою.

PACS: 75.10.-b Основная теория и модели магнитного упорядочения;  
75.40.Cx Статические свойства;  
75.40.Mg Численное моделирование.

Ключевые слова: фазовый переход, параметр порядка, восприимчивость, термодинамический потенциал, спиральная структура.

### Введение

Обычно магнитный фазовый переход (ФП) первого рода сопровождается изменением параметров кристаллической решетки: либо при изменении симметрии решетки, либо при сохранении симметрии [1,2]. Как правило, магнитный ФП первого рода имеет место для соединений, демонстрирующих гигантский магнитокалорический эффект (МКЭ) [3,4]. Здесь, помимо магнитного ФП, происходит также структурный ФП, т.е. имеет место перестройка кристаллической решетки, что говорит о сильной взаимосвязи этих переходов. Для этого случая изучено поведение термодинамических постоянных при изменении рода ФП под давлением с помощью обменно-стрикционной модели [3]. Смену рода ФП связывали с изменением величины константы обменно-упругого взаимодействия.

При магнитном ФП второго рода резких изменений решеточных параметров не происходит. Если каким-либо образом сблизить разнесенные по температуре

структурный и магнитный фазовые переходы, то следует ожидать изменения рода магнитного ФП со второго на первый. Такой эффект можно достичь изменением параметров кристаллической решетки. Как следствие этого, наряду с изменением рода перехода, сильное взаимодействие между структурным и магнитным параметрами порядка (ПП) может приводить к вынужденной перестройке одного из параметров порядка [5–7].

Задача изменения рода перехода возникает, например, в связи с необходимостью создания холодильников, использующих в качестве хладагентов материалы с большим МКЭ. Магнитокалорический эффект основан на адиабатическом изменении температуры вещества при магнитном фазовом переходе, индуцированном магнитным полем. Вследствие того, что величина МКЭ пропорциональна скорости намагничивания  $dM/dH$ , где  $H$  — напряженность магнитного поля,  $M$  — намагниченность образца, предпочтительным оказывается ФП первого рода. Во многих соединениях, таких как  $MnCoSi$ ,  $MnAs$  и т.д., это требование выполняется, од-

нако по различным причинам ни один из этих материалов не использовался в коммерческом холодильнике. Для возможного практического применения соединений, обладающих требуемыми характеристиками, возникает необходимость научиться управлять родом магнитного фазового перехода. Такое управление магнитным переходом можно осуществить с помощью структурного ФП. Одним из модельных объектов, в которых возможно осуществить направленное изменение магнитных ФП, являются сплавы на основе MnCoGe. В этом соединении при  $T_{str} = 650$  К происходит переход из низкотемпературной орторомбической структуры типа TiNiSi (пространственная группа  $Pnma$ ) в гексагональную структуру типа Ni<sub>2</sub>In (пространственная группа  $P6_3/mmc$ ) [8,9]. MnCoGe в орторомбической фазе ферромагнетик, в котором при температуре Кюри  $T_c = 345$  К наблюдается ФП второго рода из парамагнитного (ПМ) в ферромагнитное (ФМ) состояние. При замещении атомов Mn атомами В или Сг в указанном соединении температуры структурного  $T_{str}$  и магнитного  $T_c$  переходов становятся близкими. В результате при понижении температуры реализуется один магнитоупругий переход I рода из ПМ в ФМ состояние с гигантским магнитокалорическим эффектом (20 Дж/кгК при изменении индукции поля  $B = 0-2$  Тл и 50 Дж/кгК при  $B = 0-5$  Тл). При этом существенно то, что температура ФП близка к комнатной [10,11]. Во всех перечисленных работах не проводился качественный и количественный теоретический анализ изменения рода магнитного ФП. В настоящей работе этот пробел восполняется путем исследования механизма изменения рода перехода, вычисляется сдвиг температуры перехода и скачок намагниченности.

Помимо изменения рода перехода, сильное взаимодействие между магнитным и структурным параметрами порядка (ПП) должно приводить к изменению распределений этих ПП, что обуславливает появление неравномерного распределения структурного искажения в решетке.

Так, при изучении спиральной длиннопериодической структуры в случае отказа от приближения постоянства модуля неприводимого вектора (НПВ) показано, что величина этого модуля может периодически изменяться в пространстве [12]. Это, в свою очередь, как показано в настоящей работе, из-за сильного взаимодействия между магнитной и структурной подсистемами должно привести к появлению пространственной неоднородности структурного ПП.

### Управление фазовыми переходами

Пусть в модельном кристалле при понижении температуры сначала происходит структурный ФП первого рода, а затем магнитный — второго рода. Такая ситуация возможна, если температуры этих переходов

существенно отличаются. Эту последовательность переходов можно описать с помощью следующей плотности неравновесного термодинамического потенциала (НТДП):

$$\Phi = \frac{\alpha_1}{2} F^2 + \frac{\alpha_2}{4} F^4 + \frac{\alpha_3}{6} F^6 + \frac{\beta_1}{2} q^2 + \frac{\beta_2}{4} q^4 + \frac{\beta_3}{6} q^6 + \delta_1 q F + \delta_2 q^2 F^2, \quad (1)$$

где  $\alpha_i, \beta_i (i = 1, \dots, 3), \delta_1, \delta_2$  — феноменологические параметры ( $\beta_2 < 0$ ),  $\alpha_1 = C_1(T - T_1)$ ;  $\beta_1 = C_2(T - T_2)$ ,  $C_1 > 0$ ,  $C_2 > 0$ ,  $T_1$  и  $T_2$  — температуры переходов в отсутствие взаимодействия между двумя ПП,  $\mathbf{q}, \mathbf{F}$  — неприводимые векторы (параметры порядка), описывающие структурный и магнитный ФП. В выражении (1) приведены два типа взаимодействия между двумя ПП. Для большинства кристаллических групп  $\delta_1 = 0$ ,  $\delta_2 \neq 0$ . Однако возможна ситуация  $\delta_1 \neq 0$ , когда оба ПП преобразуются по одному и тому же неприводимому представлению группы симметрии кристалла. Поскольку структурный ФП является переходом первого рода, то  $\beta_2 < 0, \beta_3 > 0$ . Поскольку магнитный ФП — второго рода, то, следовательно,  $\alpha_2 > 0, \alpha_3 > 0$ . Для того чтобы магнитный ФП был энергетически выгодным, необходимо  $\delta_1 < 0$  и  $\delta_2 < 0$ .

В потенциале (1) следует учесть также упругое и магнитоупругое взаимодействия. Переменные, описывающие эти взаимодействия, можно исключить, определяя с помощью уравнений состояний их равновесные значения в зависимости от структурного и магнитного ПП [2]. После подстановки найденных выражений в потенциал получаем новый НТДП, который формально будет совпадать с НТДП без учета упругого и магнитоупругого взаимодействий. При этом перенормированные новые константы будут зависеть от температуры и давления.

Потенциал вида (1) с двумя взаимодействующими параметрами порядка изучали многие авторы. Среди них выделяется фундаментальная работа [13], в которой рассмотрены симметричные и несимметричные потенциалы до шестого порядка по обоим ПП включительно. Показано, что допустимыми являются четыре типа состояний: 1)  $q = 0, F = 0$ ; 2)  $q \neq 0, F = 0$ ; 3)  $q = 0, F \neq 0$ ; 4)  $q \neq 0, F \neq 0$ . Построены фазовые диаграммы в переменных  $\alpha_1, \beta_1$ , из которых следует, что при малых значениях  $\alpha_1, \beta_1$  возможен переход первого рода из состояния 1 в состояние 4. Этот вывод экспериментально подтвержден в [10,11], где было установлено, что при сближении обоих ФП по температуре магнитный ФП меняет род перехода. Проведем более детальное рассмотрение этого результата. Покажем, что это изменение можно объяснить изменением знака коэффициента при  $F^4$  в НТДП. Доказать справедливость такого предположения можно экспериментально, определив

величины термодинамических коэффициентов  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , аппроксимируя методом наименьших квадратов экспериментальные изотермы  $H/F$  как функции от  $F^2$  линейными зависимостями Белова–Аррота [1,14].

Рассмотрим два случая.

1.  $\delta_1 = 0, \delta_2 \neq 0$ . Дифференцируя НТДП по переменным  $q$  и  $F$ , получаем два уравнения состояния. Поскольку между переменными имеется связь, то независимым в математическом смысле фактически является один ПП. Из уравнений состояний получим

$$q^2 = -\frac{1}{2\delta_2}(\alpha_1 + \alpha_2 F^2 + \alpha_3 F^4). \quad (2)$$

Чтобы  $q^2$  было положительным при  $\alpha_i > 0$  ( $i = 1, \dots, 3$ ), необходимо  $\delta_2 < 0$ . Следовательно, искажения и магнитный порядок взаимно усиливаются. Исключая  $q^2$  из (1), получаем

$$\Phi = \frac{\alpha_1^*}{2} F^2 + \frac{\alpha_2^*}{4} F^4 + \frac{\alpha_3^*}{6} F^6, \quad (3)$$

где

$$\frac{\alpha_1^*}{2} = \frac{\alpha_2}{2} \left( -\frac{\beta_1}{2\delta_2} + \frac{\beta_2\alpha_1}{4\delta_2^2} - \frac{\beta_2\alpha_1^2}{8\delta_2^3} \right),$$

$$\frac{\alpha_2^*}{4} = -\frac{\alpha_2}{4} - \frac{\beta_1\alpha_3}{4\delta_2} + \frac{\beta_2(\alpha_2^2 + 2\alpha_1\alpha_3)}{16\delta_2^2} - \frac{\beta_3\alpha_1}{16\delta_2^3} (\alpha_1\alpha_3 + \alpha_2^2),$$

$$\frac{\alpha_3^*}{6} = -\frac{\alpha_3}{3} + \frac{\beta_2\alpha_2\alpha_3}{8\delta_2^2} - \frac{\beta_3\alpha_2(\alpha_2^2 + 6\alpha_1\alpha_3)}{48\delta_2^3}. \quad (4)$$

Уравнение состояния для определения величины  $F$  представляет собой полином. Для существования положительного решения необходимо, чтобы в ряду коэффициентов этого уравнения было хотя бы одно изменение знака, т.е. требуется, чтобы  $\alpha_2^* < 0, \alpha_3^* > 0$ . При  $\alpha_1 = \beta_1 = 0$  имеем

$$\alpha_1^* = 0, \quad \alpha_2^* = -\alpha_2 + \frac{\beta_2\alpha_2^2}{4\delta_2^2}. \quad (5)$$

Последний коэффициент отрицателен, так как  $\beta_2 < 0, \alpha_2 > 0$ . Следовательно, род магнитного ФП меняется со второго на первый. Коэффициент при  $F^6$  должен быть положителен, что выполняется при условии

$$0 < \alpha_3 < \frac{\beta_3\alpha_2^3}{2|\delta_2|(8\delta_2^2 - 3\alpha_2\beta_2)}. \quad (6)$$

Неравенство (6) удовлетворяется, если

$$\delta_2^2 > \frac{3}{8}\alpha_2\beta_2, \quad (7)$$

т.е. величина коэффициента НТДП, описывающего взаимодействие между структурным и магнитным ПП, ограничена снизу и должна быть достаточно большой.

Если ПП является ферромагнитным, то в пределе  $H \rightarrow 0$  магнитная восприимчивость ПМ фазы имеет вид

$$\chi(H \rightarrow 0) = \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{1}{\alpha_1^*} = \frac{8\delta_2^3}{\alpha_1\alpha_2(2\beta_2\delta_2 - \beta_3\alpha_1) - 4\alpha_2\beta_1\delta_2^2}. \quad (8)$$

Учитывая, что восприимчивость расходится при приближении к магнитному ФП по температуре сверху, то приравняв к нулю знаменатель (8), можно найти температуру магнитного фазового перехода  $T_c$  при учете взаимодействия между двумя ПП. Если  $2C_2\delta_2^2 - C_1\beta_2\delta_2 < 0$ , то

$$T_c = T_1 + \frac{4C_2(T_2 - T_1)|\delta_2|}{C_1^2\beta_3}. \quad (9)$$

Поскольку все входящие в (9) величины положительны, то при учете взаимодействия двух ПП температура магнитного ФП повышается. В случае  $2C_2\delta_2^2 - C_1\beta_2\delta_2 > 0$  имеем

$$T_c = T_1 - \frac{4C_2(T_2 - T_1)|\delta_2|}{C_1^2\beta_3}, \quad (10)$$

и температура понижается. Сдвиги температур тем больше, чем больше величина взаимодействия двух ПП. При совмещении по температуре двух фазовых переходов, т.е. при  $\alpha_1 = 0, \beta_1 = 0$  ( $T_c = T_1, T_1 = T_2$ ), на графике магнитной восприимчивости имеет место разрыв второго рода.

Величина  $2\beta_2\delta_2 > 0$ , поэтому требование неотрицательности  $\chi$  запишется следующим образом:

$$|\beta_1| < \frac{\alpha_1\alpha_2(\beta_3\alpha_1 - 2|\beta_2||\delta_2|)}{4\alpha_2\delta_2^2}. \quad (11)$$

Это соотношение выполняется только тогда, когда

$$|\delta_2| < \frac{\beta_3\alpha_1}{2|\beta_2|}. \quad (12)$$

Следовательно, модуль величины взаимодействия между структурной и магнитной подсистемами ограничен сверху.

Решая систему уравнений состояний, можно найти величину скачка намагниченности при совмещении двух ФП

$$\Delta F^2 = \frac{8\delta_2^2}{\alpha_2^2|\beta_2|}. \quad (13)$$

2.  $\delta_1 \neq 0, \delta_2 = 0$ . Повторяя вышеизложенные выкладки, можно показать, что восприимчивость ПМ фазы в пределе  $H \rightarrow 0$  имеет вид

$$\chi = \frac{2\delta_1^2}{\alpha_1(2\alpha_1\beta_1 - \delta_1^2)} \quad (14)$$

Поскольку  $\beta_1 < 0$ , то восприимчивость отрицательна. Следовательно, в этом случае невозможно сосуществование кристаллографического искажения и ПМ фазы.

### Взаимодействие спиральной структуры и структурного ПП. Вычислительный эксперимент

Предположим, что при понижении температуры в обобщенном кристалле произошел структурный, а затем и магнитный фазовый переход из ПМ в ФМ фазу. В результате последнего реализуется длиннопериодическая спиральная структура. Как показано еще в работах Дзялошинского [15], описание спиральной структуры возможно при учете пространственной неоднородности магнитного ПП. Рассмотрение такой последовательности переходов можно осуществить с помощью неравновесного термодинамического потенциала вида

$$\Phi = \frac{\alpha_1}{2} F^2 + \frac{\alpha_2}{4} F^4 + \frac{\alpha_3}{6} F^6 + \frac{\beta_1}{2} q^2 + \frac{\beta_2}{4} q^4 + \frac{\beta_3}{6} q^6 + \delta_2 q^2 F^2 + \delta_3 \left( F_x \frac{\partial F_y}{\partial z} - F_y \frac{\partial F_x}{\partial z} \right) + \delta_4 \left[ \left( \frac{\partial F_x}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial F_y}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (15)$$

где  $F^2 = F_x^2 + F_y^2$ . В потенциале (15) не учтены пространственные производные по структурному ПП, так как предполагается, что в состоянии  $q \neq 0, F = 0$  имеется однородное распределение по этому ПП.

Как было отмечено выше, в большинстве работ, в которых изучали длиннопериодические структуры, использовали приближение постоянства модуля параметра порядка. Появление таких структур обусловлено наличием неоднородности обменного или релятивистского взаимодействий. Эти же неоднородности могут приводить к изменению модуля вращающегося ПП.

При отказе от приближения постоянства модулей неприводимых векторов, варьируя функционал (15), получаем систему уравнений Эйлера:

$$\begin{cases} 2\delta_4 \frac{\partial^2 F_x}{\partial z^2} - 2\delta_3 \frac{\partial F_y}{\partial z} - F_x \left[ \alpha_1 + \alpha_2 (F_x^2 + F_y^2) + \alpha_3 (F_x^2 + F_y^2)^2 + 2\delta_2 q^2 \right] = 0, \\ 2\delta_4 \frac{\partial^2 F_y}{\partial z^2} + 2\delta_3 \frac{\partial F_x}{\partial z} - F_y \left[ \alpha_1 + \alpha_2 (F_x^2 + F_y^2) + \alpha_3 (F_x^2 + F_y^2)^2 + 2\delta_2 q^2 \right] = 0, \\ \beta_1 + \beta_2 q^2 + \beta_3 q^4 + 2\delta_2 F^2 = 0. \end{cases} \quad (16)$$

Найти решение этой системы в аналитическом виде затруднительно. Поэтому был проведен численный анализ с помощью математического пакета MathCad 14. Параметры системы (16) подбирали таким образом, чтобы существовало решение. От знака  $\delta_3$  в приближении постоянства модулей ПП зависит знак разности фаз компонент  $F_x$  и  $F_y$ .

1.  $\alpha_1 < 0, \alpha_2 < 0, \alpha_3 > 0, \beta_1 < 0, \beta_2 > 0, \beta_3 > 0, \delta_2 < 0, \delta_3 > 0, \delta_4 > 0$ . Такая комбинация знаков феноменологических коэффициентов означает, что магнитный ФП является переходом первого рода, а структурный — второго. На синусоидальные колебания компонент  $F_x(z)$  и  $F_y(z)$  накладывается двусторонняя амплитудная пространственная модуляция, а разность фаз этих компонент не остается постоянной (рис. 1(а),(б)). Все это приводит к появлению несинусоидальной зависимости  $|F(z)|$  (рис. 1(в)). Минимумы этой функции являются более острыми, чем максимумы. Уменьшение по модулю величины отрицательного коэффициента  $\alpha_1$  в два раза приводит к увеличению периода и амплитуды в

1,14 и 1,003 раз. Эти зависимости практически линейны с тангенсами угла наклона 0,275 и 0,015. Аналогичное уменьшение по модулю коэффициента  $\alpha_2$  увеличивает период и амплитуду  $|F(z)|$  в 1,23 и 1,2 раза соответственно. Здесь также имеет место практически линейная зависимость с тангенсами угла наклона 0,29 и 0,02. Благодаря взаимодействию между двумя ПП появляется вынужденная осциллирующая пространственная зависимость структурного ПП (рис 1(г)). Следовательно, в кристалле должно наблюдаться неоднородное пространственное распределение смещения ионов, описываемое структурным ПП. Его, вероятно, можно обнаружить экспериментально с помощью рентгеновских измерений. Необходимо отметить, что изменение величин коэффициентов, описывающих структурный ПП, также влияет на поведение магнитного ПП. Уменьшение по модулю величины коэффициента  $\beta_1$  увеличивает период модуляции магнитного ПП в 1,13 раза и практически не влияет на величину амплитуды. Изменение коэффициента  $\beta_2$  оказывает противоположное влияние.

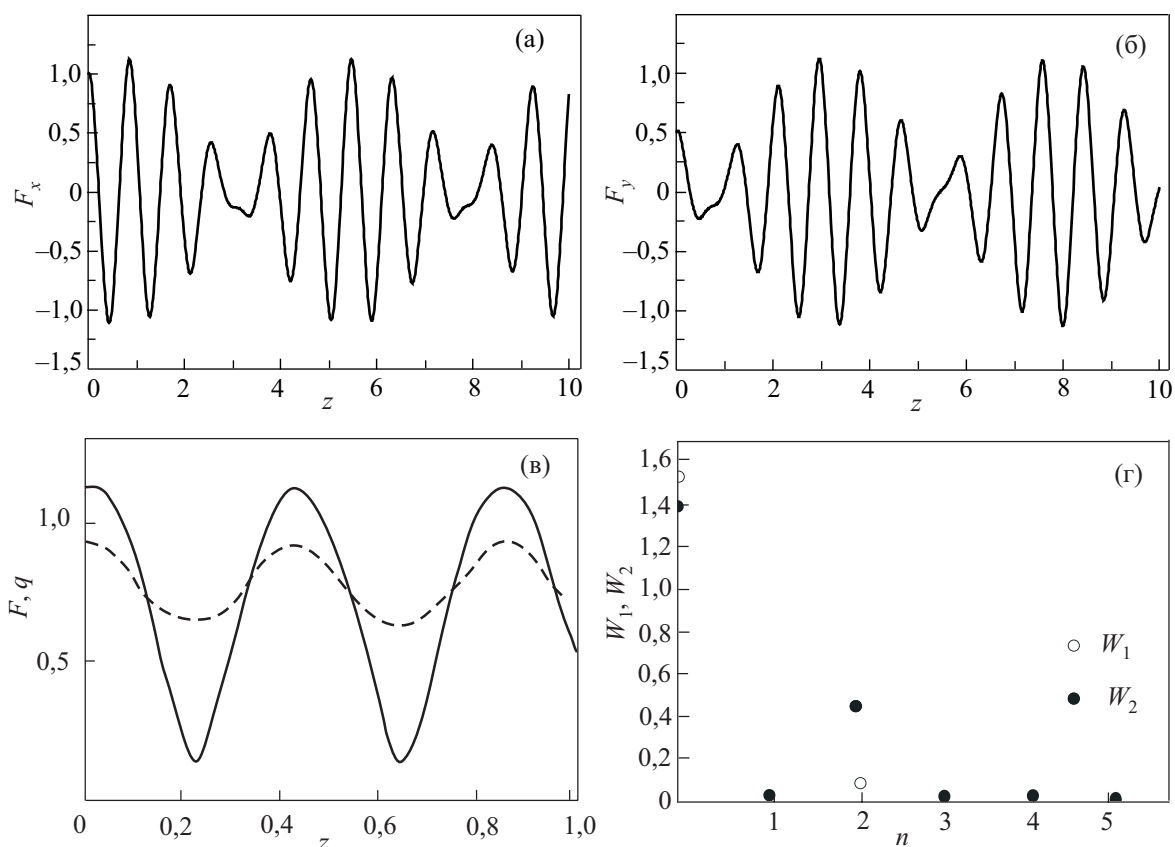


Рис. 1. Пространственные распределения  $F_x(z)$  (а) и  $F_y(z)$  (б); пространственные распределения  $F(z)$  (—) и  $q(z)$  (- - -) (в); спектр амплитуд гармоник магнитного  $W_1$  (●) и пространственного  $W_2$  (○) ПП (г). По осям координат все величины даны в условных единицах.

Его уменьшение в два раза не меняет период колебаний, но уменьшает амплитуду магнитного ПП в 1,15 раза. Увеличение модуля  $\delta_2$  до некоторого порогового значения приводит к появлению разрывов первого рода на графике  $q(z)$  в точках максимума и появлению отрицательных участков (рис. 2(а)). Это означает, что при сильном взаимодействии между структурным и магнитным ПП появляющееся искажение кристаллической решетки

будет периодически менять знак. В то же время остальные функции остаются непрерывными. Фурье-анализ поведения структурного ПП показал, что распределение амплитуд невозможно описать гладкой непрерывной кривой, поскольку имеет место существенный разброс (рис. 2(б)). Для адекватного описания разрывной кривой структурного ПП необходим учет минимум 50 гармоник. Необходимо отметить, что интенсивность первой гармо-

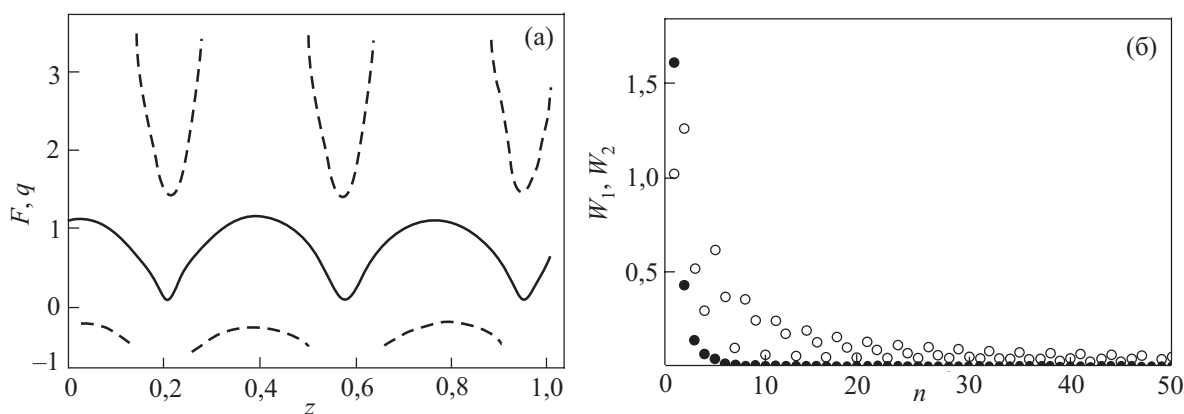


Рис. 2. Пространственные распределения  $F(z)$  (—) и  $q(z)$  (- - -) при больших значениях модуля  $\delta_2$  (а); спектр амплитуд гармоник магнитного  $W_1$  (●) и пространственного  $W_2$  (○) ПП при больших значениях модуля  $\delta_2$  (б) По осям координат все величины даны в условных единицах.

ники превышает интенсивность основной частоты. В то же время для восстановления кривой магнитного ПП достаточно учесть только 5 гармоник. Следствием увеличения значения  $\beta_2$  будет уменьшение периодов и амплитуды всех колебательных составляющих магнитного и структурного ПП. При некотором значении  $\beta_2$  функция  $q(z)$  снова становится непрерывной и почти синусоидальной. При уменьшении по модулю коэффициента  $\beta_2$  уменьшается постоянная и амплитуда колебательных составляющих структурного ПП.

2.  $\alpha_1 < 0, \alpha_2 < 0, \alpha_3 > 0, \beta_1 < 0, \beta_2 > 0, \beta_3 > 0, \delta_2 < 0, \delta_3 < 0, \delta_4 > 0$ . Спектры колебаний в этом случае будут богаче, чем в предыдущем. Колебания компонент магнитного ПП ограничены двумя совпадающими по фазе пространственными амплитудными модуляциями (рис. 3(а),(б)). Изменения  $|F(z)|$  и  $q(z)$  (рис. 3(в)) характеризуются короткими импульсами выбросов, причем фазы амплитудных модуляций  $q(z)$  и  $|F(z)|$  совпадают. Кривая  $|F(z)|$  более плавная, поэтому ее можно описать 7 гармониками, в то время как для  $q(z)$  необходимо 9. Оба распределения гармоник укладываются в плавные кривые гиперболического типа, и ось  $Ox$  является горизонтальной асимптотой (рис 3(г)). При уменьшении по модулю величины  $\delta_2$  имеет место уменьшение амплитуды колебаний  $q(z)$ .

3.  $\alpha_1 < 0, \alpha_2 < 0, \alpha_3 > 0, \beta_1 < 0, \beta_2 < 0, \beta_3 > 0, \delta_2 < 0, \delta_3 < 0, \delta_4 > 0$ . Такой набор знаков предполагает, что имеет место последовательность ФП первого рода, которая может быть любой. Характер колебаний компонент магнитного ПП такой, что приводит к появлению двойной амплитудной модуляции магнитного ПП (рис. 4(а)). Эти модуляции имеют одинаковый период и сдвинуты относительно друг друга по фазе на половину периода. Фурье-анализ показал, что значимыми являются 28-я и 38-я гармоники, а для полного описания достаточно учесть 50 гармоник (рис. 4(в)). Постоянная и колебательная составляющие структурного ПП отрицательны с постоянной амплитудой (рис. 4(б)). Следовательно, деформация решетки по знаку противоположна случаям 1 и 2. Необходимо отметить, что в этом случае имеет место односторонняя амплитудная модуляция. При разложении такого пространственного ПП в ряд Фурье оказалось, что для адекватного описания двух пространственных модуляций необходимо учитывать около 150 гармоник, причем основную роль в разложении играют именно высшие гармоники. Для сравнения отметим, что один колебательный процесс с одной двухсторонней синусоидальной модуляцией описывается рядом Фурье с основной частотой и двумя симметрично расположенными сателлитами. Получен-

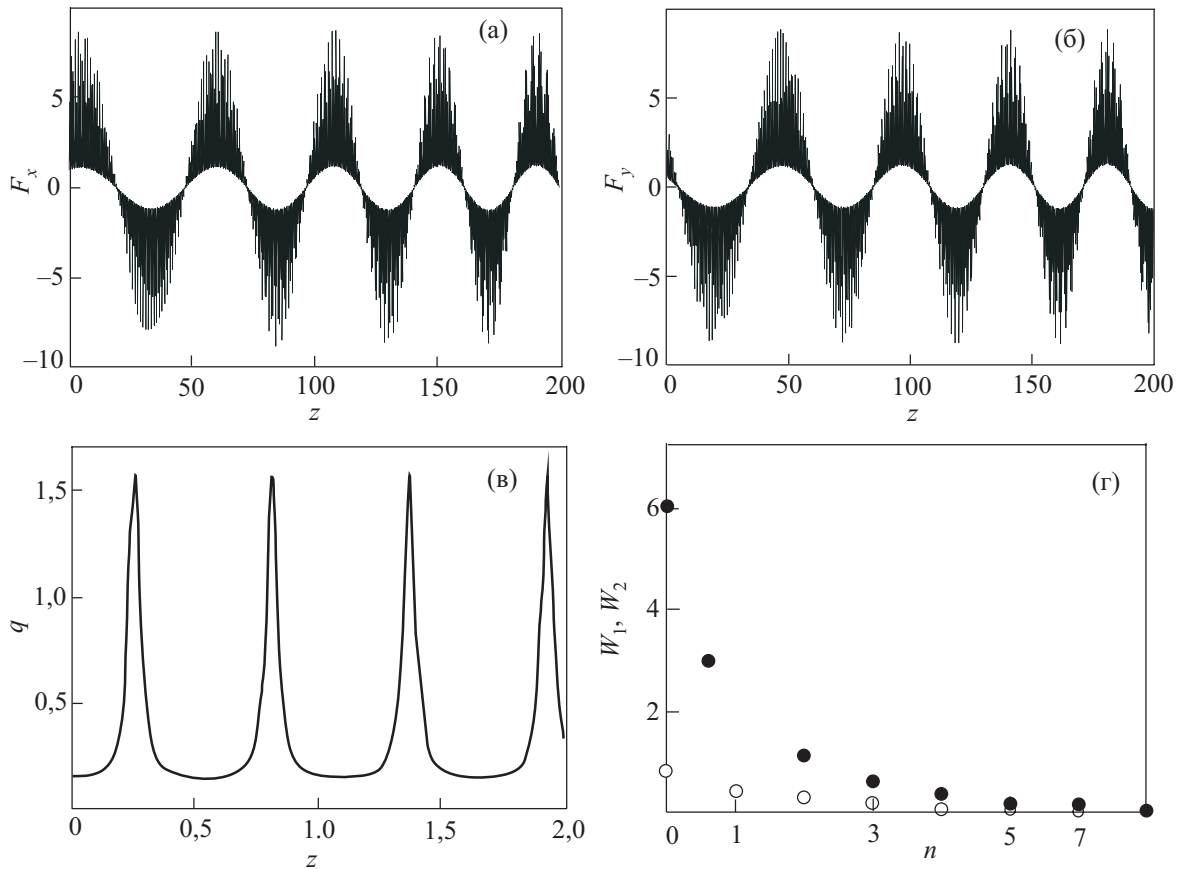


Рис. 3. Пространственные распределения  $F_x(z)$  (а) и  $F_y(z)$  (б), пространственное распределение  $q(z)$  на малых расстояниях (в); спектр амплитуд гармоник магнитного  $W_1$  (●) и пространственного  $W_2$  (○) ПП (г). По осям координат все величины даны в условных единицах.

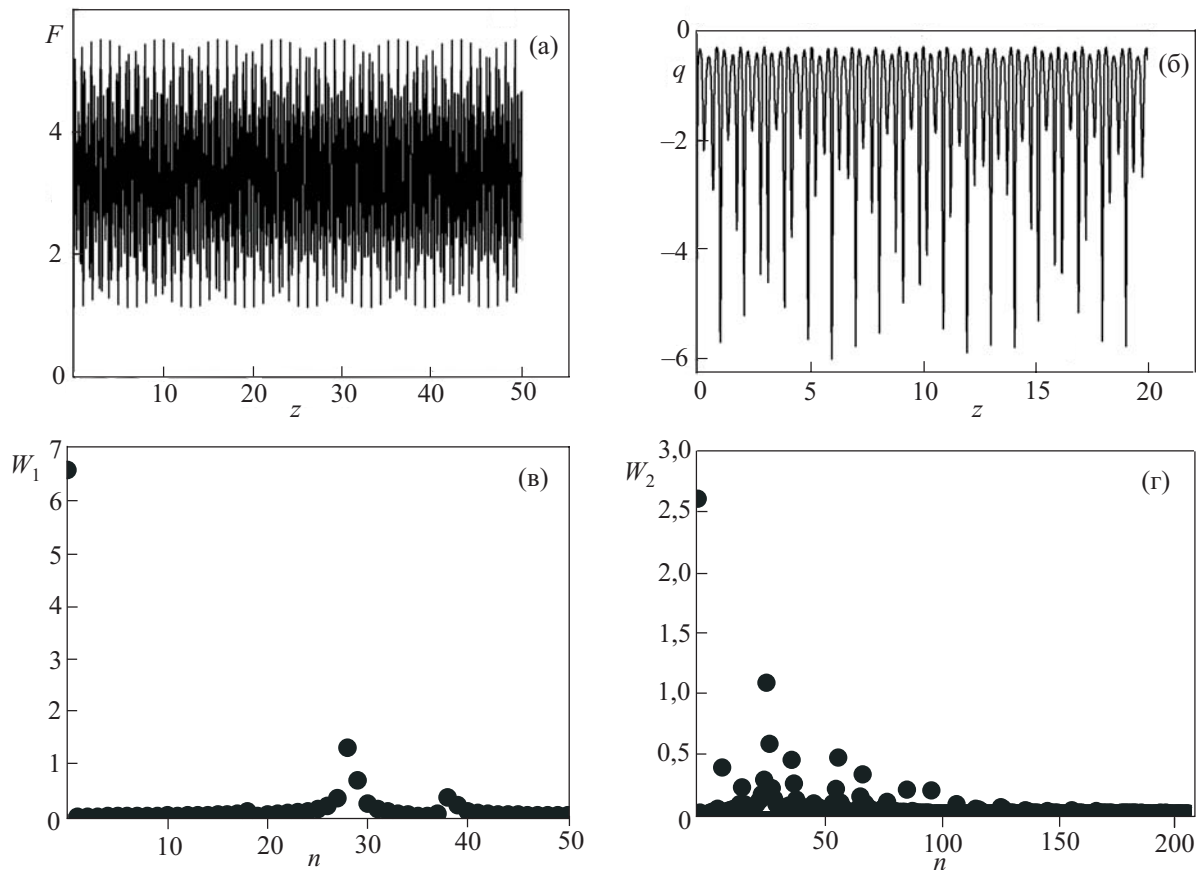


Рис. 4. Пространственные распределения на больших расстояниях  $F(z)$  (а) и  $q(z)$  (б); спектр амплитуд гармоник магнитного ПП ( $n$  — номер гармоники,  $W_1$  — величина амплитуды гармоники) (в); спектр амплитуд гармоник пространственного ПП ( $n$  — номер гармоники,  $W_2$  — величина амплитуды гармоники) (г). По осям координат все величины даны в условных единицах.

ный спектр амплитуд (рис. 4(г)) показал, что наибольшие значения имеют амплитуды 18, 28, 38, 57, 67, 77, 85, 95 и 105 гармоник. Увеличение по модулю  $\alpha_1$  приводит к сжатию графиков. Аналогичное поведение будет и при увеличении по модулю  $\beta_1$ , что также приводит к увеличению амплитуды колебаний обоих ПП. Если  $\alpha_1 < \beta_1$  и различаются на порядок величины, то появляется множественная пространственная амплитудная модуляция ПП, возрастающая с ростом модуля  $\delta_2$ .

4.  $\alpha_1 < 0$ ,  $\alpha_2 > 0$ ,  $\alpha_3 > 0$ ,  $\beta_1 < 0$ ,  $\beta_2 < 0$ ,  $\beta_3 > 0$ ,  $\delta_2 < 0$ ,  $\delta_3 < 0$ ,  $\delta_4 > 0$ . В этом случае структурный ФП первого рода, магнитный — второго. Все колебательные процессы синусоидальны, и пространственная модуляция отсутствует. Постоянная и колебательная составляющие структурного ПП отрицательны.

### Обсуждение результатов

Благодаря взаимодействию между магнитным и структурным ПП появляется возможность непрямого воздействия на один из ПП. Вследствие этого может меняться род ФП или возникать вынужденное упорядочение одного из ПП. Можно сконструировать большое количество искажений решеточных структур, меняя

путем внешнего воздействия (температура, давление, легирование) параметры существующей в кристалле длиннопериодической магнитной структуры. Так, изменение температуры (коэффициенты  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  термодинамического потенциала) приводит к изменению периода осцилляций магнитного и структурного ПП. С помощью давления можно менять величину взаимодействия между двумя ПП, при увеличении  $\delta_2$  возможно появление структурного искажения с периодически меняющимся знаком. В этом случае возможно также создание решеточного искажения, осцилляции которого будут иметь одну или несколько амплитудных модуляций.

1. Н.П. Гражданкина, *УФН* **96**, 291 (1968).
2. И.М. Витебский, В.И. Каменев, Д.А. Яблонский, *ФТТ* **23**, 215 (1981).
3. Э.З. Валиев, *ЖЭТФ* **135**, 314 (2009).
4. Э.А. Завадский, В.И. Вальков, Б.М. Тодрис, С.К. Асадов, *ФТТ* **24**, 1531 (1982).
5. Ю.М. Гуфан, *Структурные фазовые переходы*, Наука, Москва (1982).
6. Yu.D. Zavorotnev and L.I. Medvedeva, *Physica B* **406**, 1695 (2011).

7. М.А. Попов, Г.А. Петраковский, В.И. Зиненко, *ФТТ* **46**, 478 (2004).
8. O. Beckman and L. Lundgren, in: *Handbook of Magnetic Materials*, K.H.J. Buschow (ed.), Elsevier, New York (1991), Vol. 6, Ch. 3.
9. T. Kanomata, H. Ishigaki, H. Yoshida, S. Abe, and T. Kaneko, *J. Magn. Magn. Mater.* **140**, 131 (1995).
10. N.T. Trung, V. Biharie, L. Caron, K.H.J. Buschow, and E. Bruck, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 162507 (2010).
11. N.T. Trung, L. Zhang, L. Caron, K.H.J. Buschow, and E. Bruck, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 172504 (2010).
12. Ю.Д. Заворотнев, Л.И. Медведева, *ФНТ* **34**, 172 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 131 (2008)].
13. Ю.М. Гуфан, Е.С. Ларин, *ФТТ* **22**, 463 (1980).
14. К.П. Белов, *Магнитные превращения*, Физматгиз, Москва (1959).
15. И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **46**, 1420 (1964).

## Interrelation of structural and magnetic order parameters in crystals

Yu.D. Zavorotnev

The paper presents a theoretical definition of conditions when the change of the type of magnetic phase transition (PT) from a disordered state to an ordered magnetic state at close temperatures of the structural and magnetic phase transitions becomes possible. We have found relations between the magnitude of magnetization jump, the transition temperature and the parameters of phenomenological potential at superposition of the structural and magnetic PT. Forced reconstruction of the structural order parameter (OP) under periodic changes of the magnetic OP modulus in phase with a spiral structure has been studied.

PACS: **75.10.-b** General theory and models of magnetic ordering;  
75.40.Cx Static properties;  
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: phase transition, order parameter, susceptibility, thermodynamic potential, spiral structure.