

Магнитные фазовые переходы порядок–порядок в магнетиках с коллективизированными электронами: $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$

В.И. Вальков¹, А.В. Головчан¹, В.П. Дьяконов^{1,2}, Н. Szymczak²

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: valkov09@gmail.com

²Institute of Physics, PAS, Al. Lotnikow 32/46, 02-668 Warsaw, Poland

Статья поступила в редакцию 30 июня 2010 г., после переработки 31 августа 2010 г.

На основании результатов расчета из первых принципов электронной структуры сплавов системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ и двухзонной модели коллективизированного магнетика проведен анализ индуцированных магнитным полем магнитных фазовых переходов порядок–порядок в $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$. В рамках модели показано, что низкотемпературное основное и индуцированное магнитным полем состояния могут описываться сосуществованием однородной ферромагнитной и периодической антиферромагнитной компонент полного магнитного момента d -зоны. Воздействие гидростатического давления на переходы порядок–порядок обусловлено структурной перенормировкой плотности электронных состояний в результате сжатия материала. Модель предсказывает, что коллинеарный ферримагнетизм в системе $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$ является метастабильным состоянием, переход к которому может произойти только в сверхсильных магнитных полях.

На підставі результатів розрахунку з перших принципів електронної структури сплавів системи $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ і двозонної моделі колективізованого магнетика проведено аналіз індукованих магнітним полем магнітних фазових переходів порядок–порядок в $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$. У рамках моделі показано, що низькотемпературний основний й індукований магнітним полем стани можливо описати співіснуванням однорідної ферромагнітної та періодичної антиферромагнітної компонентів повного магнітного моменту d -зони. Вплив гідростатичного тиску на переходи порядок–порядок обумовлено структурною перенормировкою щільності електронних станів у результаті стискання матеріалу. Модель передбачає, що колінеарний ферримагнетизм у системі $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$ є метастабільним станом, перехід до якого може відбутися тільки в надсильних магнітних полях.

PACS: 71.20.Be Переходные металлы и сплавы;
75.50.Ee Антиферромагнетики;
75.50.Gg Ферримагнетики;
75.10.Lp Зонные и коллективизированные модели.

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

Введение

Пниктиды $3d$ переходных металлов, в частности сплавы системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$, обладают рядом свойств, которые, с одной стороны, позволяют использовать их в качестве рабочих сред для магнитных рефрижераторов и запоминающих устройств, с другой — рассматривать как модельные объекты для фундаментальных исследований в области физики магнитных явлений.

Прикладное использование индуцированных магнитными и электрическими полями фазовых переходов первого рода неразрывно связано с улучшением характеристик этих материалов, например, увеличением величины скачков намагниченности и проводимости, уменьшением гистерезиса по магнитному и увеличением гистерезиса по электрическому полям. Устойчивость и механизмы возникновения различных магни-

тоупорядоченных фаз при воздействии сильных магнитных и электрических полей и их магнорезистивные свойства можно отнести к фундаментальным вопросам.

В магнетиках с коллективизированными электронами изменения типа магнитного порядка и резистивного состояния вдали от температур магнитного разупорядочения (характерные для барически или термически стимулированных магнитных фазовых переходов порядок–порядок) являются следствием изменений плотности электронных состояний при увеличении давления или температуры, поскольку, согласно спин-флуктуационным теориям, именно эта характеристика электронного спектра прежде всего подвергается перенормировкам при внешних воздействиях [1]. Физическая природа низкотемпературного магнитокалорического и магнорезистивного эффектов [1,2] и причина возникновения аномальных вольт-амперных характеристик (ВАХ) наноконтактов [3] в этих материалах связаны со строением электронного спектра магнитоактивных электронов и особенностями диффузии анионов в массиве образца и в приконтактной области. Поэтому особенно актуальны исследования взаимосвязи индуцированных переходов первого рода с изменениями структуры плотности электронных состояний сплавов переходных металлов (к которым относятся сплавы системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$).

В настоящей работе на примере теоретического анализа индуцированных магнитным полем переходов порядок–порядок в сплавах системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ с тетрагональной кристаллической симметрией $P4/nmm$ показана ключевая роль структуры плотности электронных состояний в формировании механизма указанных переходов.

1. Экспериментальные сведения

В сплавах системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ ($1,29 \leq x \leq 1,52$) ниже температуры Нееля наблюдается магнитный фазовый переход первого рода из антиферромагнитной (AF) в слабоферритмагнитную (low-ferrimagnetic — LFi_1) фазу (рис. 1). Согласно нашим предположениям, спонтанная намагниченность низкотемпературной фазы LFi_1 пропорциональна ферромагнитной компоненте, сосуществующей с антиферромагнитной компонентой магнитного момента [4]. Имеющиеся в литературе данные нейтронографии порошкового образца $Fe_{0,72}Mn_{1,28}As$ [5] подтверждают это. Согласно [5], в низкотемпературной фазе с удвоенной элементарной ячейкой присутствуют нескомпенсированные компоненты магнитных моментов $m(II)$ и $m(I)$ с октаэдрическим (II) и тетраэдрическим (I) окружением анионов соответственно (рис. 1).

Легко видеть, что векторы ферромагнетизма $M(I)$, $M(II)$ и антиферромагнетизма $L(I)$, $L(II)$, описывающие

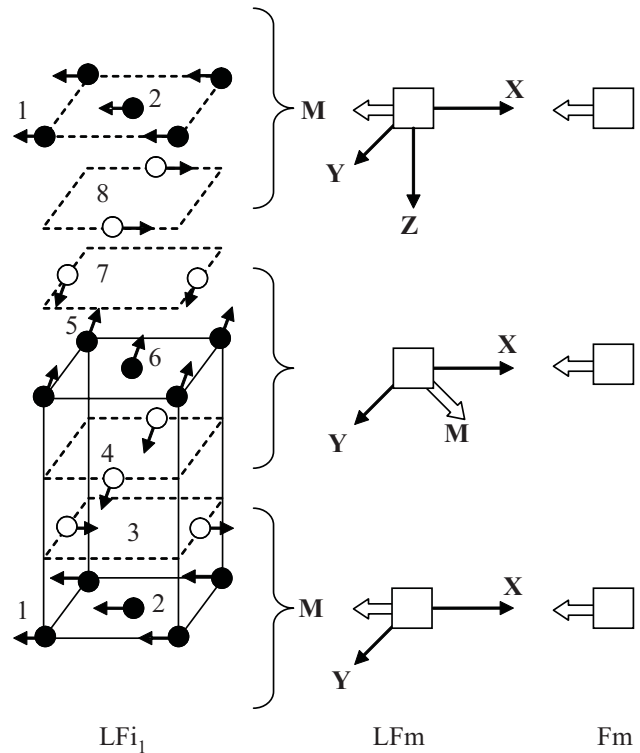


Рис. 1. Кристаллическая и магнитная структуры сплава $Fe_{0,72}Mn_{1,28}As$: LFi_1 — слабоферритмагнитная структура, обнаруженная в [5], стрелки указывают направление магнитных моментов атомов марганца в позициях с октаэдрическим (светлые кружки) и атомов железа и марганца с тетраэдрическим (темные кружки) окружением As тетрагональной решетки C38; LFm и Fm — используемое в настоящей работе модельное представление слабоферритмагнитной (LFi_1) и ферритмагнитной структур, в которых результирующий магнитный момент (светлые стрелки) одноэлектронной ячейки (светлый квадрат) вращается в базисной xy -плоскости.

ферритмагнитную (Fi) типа Mn_2Sb при $M(I) \uparrow \downarrow M(II)$ и антиферромагнитную (AF2) типа Mn_2As при $L(I) \uparrow \downarrow L(II)$ структуры [6] действительно имеют компоненты x и z ($x \parallel a$, $z \parallel c$) в фазе LFi_1 :

$$\begin{aligned} M(I) &= m_1 + m_2 + m_5 + m_6; & M(II) &= m_3 + m_4 + m_7 + m_8; \\ L(I) &= m_1 + m_2 - m_5 - m_6; & L(II) &= m_3 - m_4 - m_7 + m_8. \end{aligned} \quad (1)$$

По этой причине LFi_1 фаза обладает, как и высокотемпературная антиферромагнитная фаза, удвоенным (по сравнению с элементарной кристаллографической ячейкой) периодом вдоль оси z , а ее спонтанная намагниченность значительно меньше намагниченности коллинеарной ферритмагнитной фазы (FIM1), рассчитанной в [10]. Косвенным подтверждением особого характера LFi_1 фазы как промежуточной между ферритмагнитной FIM1 и антиферромагнитной AF2 коллинеарными магнитными структурами могут служить кривые намагничивания образцов системы $Fe_{a-x}Mn_xAs$ ($1,95 \leq a \leq 2,15$) в статических [7] и сильных импульсных [6,8] магнитных полях (рис. 2). Например, значительный рост

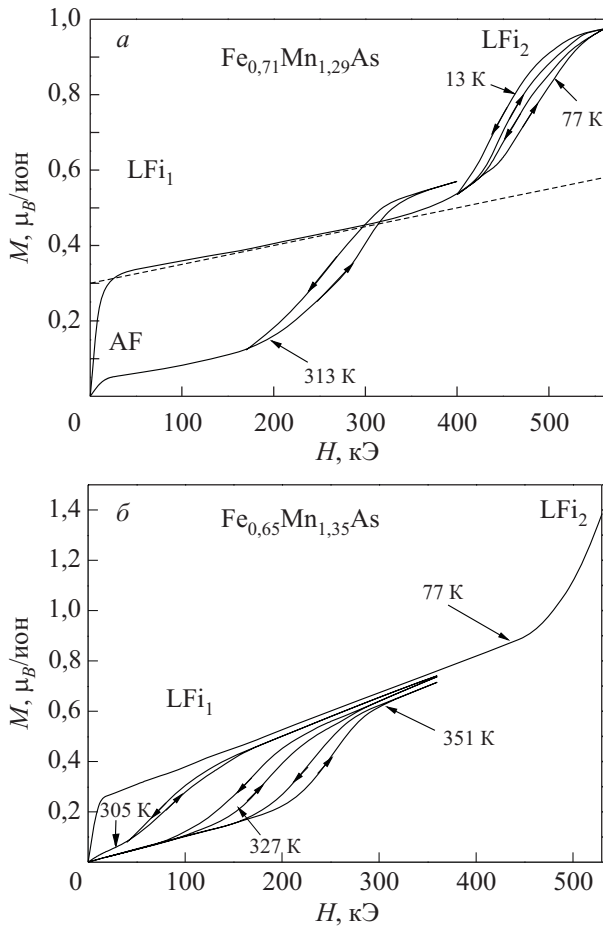


Рис. 2. Обратимые индуцированные магнитным полем переходы порядок–порядок в некоторых сплавах системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ при различных начальных температурах [6].

намагниченности насыщения фазы LFI_1 при возрастании напряженности магнитного поля ($\partial\sigma/\partial H \approx (0,24-0,33) \text{ Гс}\cdot\text{см}^3/(\text{Г}\cdot\text{Т})$) можно интерпретировать как возрастание ферромагнитной поляризации спиновой плотности за счет уменьшения антиферромагнитной. При этом возникновение новой индуцированной фазы LFI_2 (стабильной только в полях $H \geq 50 \text{ Тл}$), намагниченность которой меньше намагниченности коллинеарной ферромагнитной фазы FIM1 (оцененной в [10]), свидетельствует об устойчивости антиферромагнитного параметра порядка в системе $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$.

С другой стороны, анизотропные свойства фазы LFI_1 , измеренные на монокристаллических образцах (рис. 3), противоречат наличию z -компоненты намагниченности (рис. 1). На наш взгляд, это обусловлено ошибочной интерпретацией данных нейтронографии порошкового образца $\text{Fe}_{0.72}\text{Mn}_{1.28}\text{As}$. По-видимому, авторы [5], анализируя порошковые нейтронограммы $\text{Fe}_{0.72}\text{Mn}_{1.28}\text{As}$, исходили из модели, которая не учитывает ограничения, накладываемые анизотропией типа легкая плоскость.

Обширный экспериментальный материал, изложенный в [8,9,11], позволяет констатировать чрезвычайную чувствительность магнитных характеристик спла-

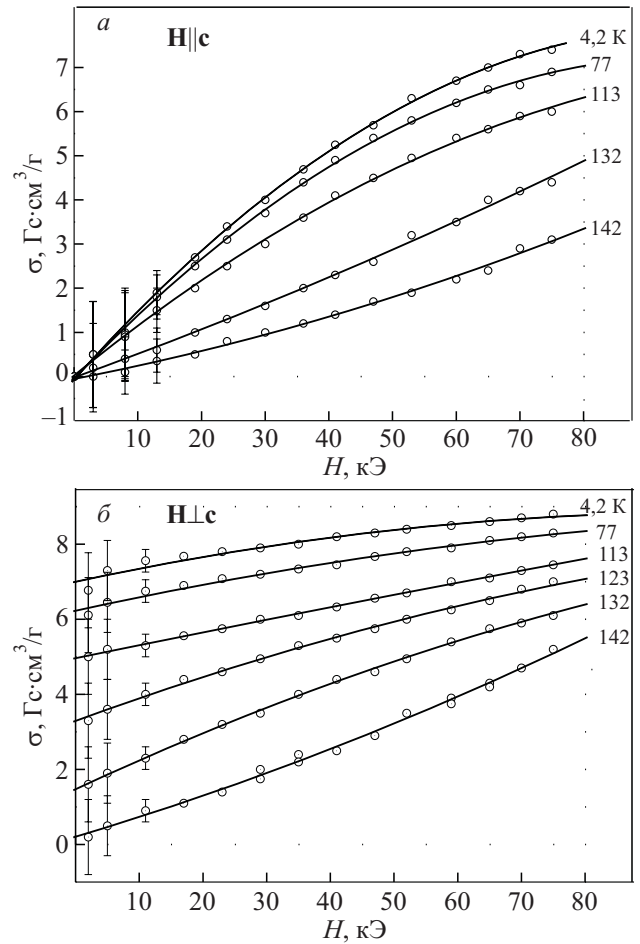


Рис. 3. Проявление анизотропии типа легкая плоскость в монокристаллическом образце $\text{Fe}_{0.65}\text{Mn}_{1.35}\text{As}$ [7] при различных температурах.

вов системы $\text{Fe}_{a-x}\text{Mn}_x\text{As}$ к различным видам сжатия решетки. Наложение гидростатического или одноосного (вдоль оси c) давлений сужает температурную область стабильности слабоферромагнитной LFI_1 фазы. Скорость понижения температуры (T_1) спонтанного перехода первого рода $\text{LFI}_1\text{-AF}$ $\partial T_1/\partial P \sim -17 \div -40 \text{ К/кбар}$, а скорость увеличения критических полей обратимых индуцированных переходов $\text{LFI}_1\text{-AF}$ $\partial H_k/\partial P \sim 20 \text{ кЭ/кбар}$ [8,9,11]. Напротив, одноосное сжатие перпендикулярно оси c стабилизирует фазу LFI_1 со скоростью $\partial T_1/\partial P \approx +12 \text{ К/кбар}$ [11].

Расчет из первых принципов $\text{Fe}_{0.69}\text{Mn}_{1.31}\text{As}$, проведенный ниже, в отличие от ранее проведенных нами расчетов [10], позволяет проанализировать влияние гидростатического и одноосного давлений на стабильность коллинеарной ферромагнитной фазы FIM1 в $\text{Fe}_{0.69}\text{Mn}_{1.31}\text{As}$.

2. Электронная структура $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$

Для исследования электронной структуры сплавов $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ нами применен полностью релятивистский метод Корринги–Кона–Ростокера (пакет SPRKKR [13]).

При построении кристаллического потенциала использовано приближение атомной сферы. Обменно-корреляционную энергию вычисляли в приближении локальной плотности без учета градиентных поправок [14]. Для рассматриваемого диапазона концентраций системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ ($x > 1$) атомы Fe занимают преимущественно позиции типа I (тетраэдрическое окружение анионов, симметрия $2a — (0, 0, 0), (0, 5; 0, 5; 0)$); атомы Mn — позиции II (октаэдрическое окружение анионов, симметрия $2c — (0; 0, 5; z_1), (0, 5; 0; 1 - z_1)$) и частично позиции I; мышьяк занимает положения $2c — (0; 0, 5; z_2), (0, 5; 0; 1 - z_2)$ пространственной группы $P4/nmm$. Значения параметров z_1 и z_2 составляют 0,33 и $-0,265$ для MnII и As соответственно. Постоянные кристаллической решетки для системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ взяты из работы [15]. Расчет электронной структуры сплава проводился в приближении когерентного потенциала для модели неупорядоченного сплава: предполагалось, что атомы FeI и MnI распределены хаотически по тетраэдрическим позициям.

Результаты расчетов коллинеарных магнитных структур $Fe_{0,69}Mn_{1,31}As$, как и в [10], показывают, что наименьшей энергией обладает ферромагнитная конфигурация FIM1, в которой магнитные моменты MnI ($-2,56 \mu_B$) и FeI ($2,23 \mu_B$) направлены противоположно. Суммарный магнитный момент в позициях с тетраэдрическим

окружением ($0,75 \mu_B$) совпадает по направлению с магнитным моментом MnII в позициях с октаэдрическим окружением анионов ($3,11 \mu_B$), рис. 1. Плотность электронных состояний (DOS) имеет многопиковую структуру (рис. 4) и обеспечивает металлический характер проводимости за счет d -зон марганца и железа (рис. 4,б). Эти же зоны подвержены сильному обменно расщеплению и дают наибольший вклад ($3,83 \mu_B$) (рис. 4,а) в полный магнитный момент ($3,75 \mu_B$) (рис. 4,б).

3. Обсуждение результатов расчета и экспериментальных исследований

Экспериментальное значение величины спонтанной намагниченности насыщения сплавов системы $Fe_{a-x}Mn_xAs$ не превышает $18 \text{ Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$, или $0,6 \mu_B$ на формульную единицу (f.u.), рис. 2. Как видно на рис. 4, рассчитанная величина полного магнитного момента ($3,75 \mu_B$) образца $Fe_{0,69}Mn_{1,31}As$ в ферромагнитном состоянии FIM1 не только в несколько раз превышает экспериментальное значение спонтанного магнитного момента в LFi1 фазе ($0,6 \mu_B/\text{f.u.}$ для наиболее близкого по составу к исследуемому образцу $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$), но также превосходит величины магнитных моментов для индуцированных магнитным полем состояний LFi2 ($2,8 \mu_B/\text{f.u.}$ для $Fe_{0,65}Mn_{1,35}As$ и $2 \mu_B/\text{f.u.}$ для $Fe_{0,71}Mn_{1,29}As$), рис. 2. Если учесть слабую зависи-

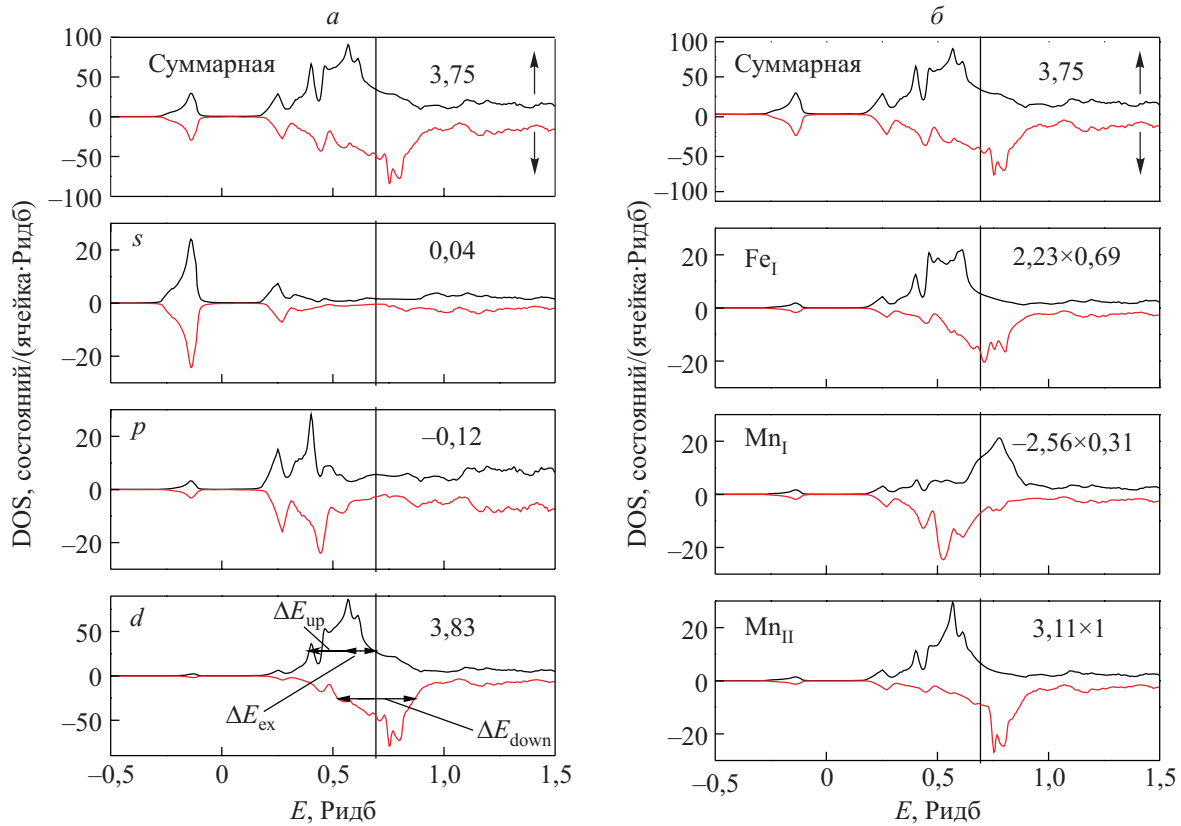


Рис. 4. Парциальные плотности электронных состояний (DOS) в ферромагнитной фазе FIM1, рассчитанные для образца $Fe_{0,69}Mn_{1,31}As$ ($a = 3,747, c = 6,21$) при атмосферном давлении. Числами в единицах μ_B обозначены парциальные вклады в магнитный момент на формульную единицу. Уровни Ферми обозначены вертикальными линиями. Числами обозначены вклады в магнитный момент s -, p -, d -состояний (а); ионов марганца и железа (б).

мость величин локальных магнитных моментов от их ориентации [10], то количественные несоответствия экспериментальных и теоретических результатов могут указывать на возможность интерпретации обоих ферромагнитных состояний (LFi_1 и LFi_2) как неколлинеарных структур. Однако прямые *ab initio* расчеты электронной структуры неколлинеарных магнитоупорядоченных состояний системы $Fe_{2-x}Mn_xAs$ на сегодняшний день находятся за пределами наших технических возможностей. Тем не менее определенное понимание последовательности реализации скошенных состояний и индуцированных переходов порядок–порядок многозонного магнетика можно получить в рамках модельного подхода, использующего в качестве параметров некоторые данные из результатов *ab initio* расчетов при $T = 0$.

В рамках модельного подхода будем исходить из того, что в коллективизированных магнетиках макроскопические характеристики системы могут быть рассчитаны при использовании заданной плотности электронных состояний. Например, магнитный момент $M = \sum_{\sigma} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \sigma G_{\sigma}(\varepsilon)$, энергия зонной структуры $E = \sum_{\sigma} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \varepsilon G_{\sigma}(\varepsilon)$ и число электронов $n = \sum_{\sigma} \int d\varepsilon f(\varepsilon) G_{\sigma}(\varepsilon)$ как функции температуры и давления (здесь $f(\varepsilon)$ — функция Ферми–Дирака) могут быть вычислены с использованием перенормированной температурой и давлением спин-поляризованной плотности электронных состояний $G_{\sigma}(\varepsilon)$. При этом если температурная перенормировка $G_{\sigma}(\varepsilon)$ может быть рассчитана только в рамках спин-флуктуационных моделей, то ее барические изменения могут быть зафиксированы *ab initio* расчетами электронной структуры при различных степенях сжатия для $T = 0$. Результаты, полученные при $T = 0$, могут быть использованы для развития комбинированного модельного подхода при теоретическом анализе последовательности индуцированных магнитным полем переходов в исследуемой системе.

4. Двухзонная модель антиферромагнитной структуры

Учитывая, что структура плотности d -электронных состояний $DOS(E)$ (рис. 4,а) формируется за счет парциальных вкладов вырожденных d -состояний Mn_I , Mn_{II} и Fe_I (рис. 4,б), описание сложной магнитной структуры многозонного коллективизированного магнетика будем проводить в рамках двухзонной модели. При этом полагаем, что качественные особенности сложных многозонных реальных материалов можно учесть при использовании модельной плотности электронных состояний $G_{mod}(E)$ (рис. 5), структура которой подобна плотности электронных состояний $DOS(E)$, рассчитанной из первых принципов для конкретного соеди-

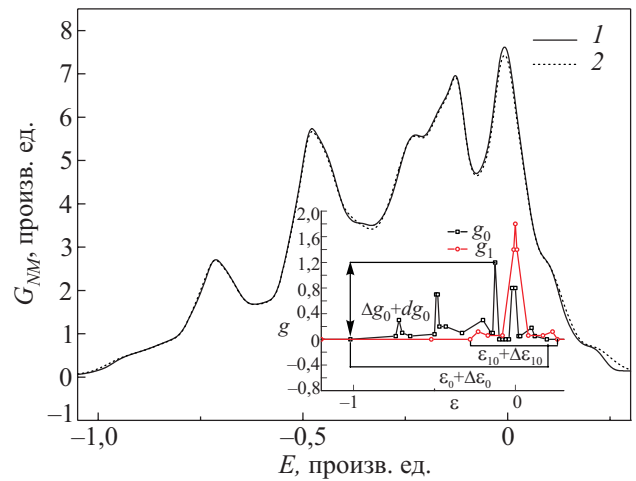


Рис. 5. Изменение исходной (1) модельной плотности электронных состояний при увеличении параметров $\Delta\varepsilon_{10}$, $\Delta\varepsilon_0$, dg_0 : $\Delta\varepsilon_{10} = \Delta\varepsilon_0 = dg_0 = 0$ (1), $\Delta\varepsilon_{10} = 0,01$, $\Delta\varepsilon_0 = 0,04$, $dg_0 = 0,032$ (2). На вставке приведены исходные функции $g_0(\varepsilon)$, $g_1(\varepsilon)$.

нения в немагнитном состоянии. Естественно, что при таком подходе намагниченность модельной системы возникает как результат спиновой поляризации зонной энергии модели $E(M, L)$, которая может быть вычислена при использовании модельного гамильтониана, учитывающего энергию обменного взаимодействия. Обменный интеграл модели может быть оценен по данным *ab initio* расчетов коллинеарных магнитных состояний реальной системы.

В рассматриваемом модельном подходе каждой исходной кристаллохимической ячейке $Fe_{2-x}Mn_xAs$, содержащей две формульные единицы (четыре магнитных атома, на которые приходится 20 коллективизированных d -состояний), ставится в соответствие двухатомная ячейка j с двумя s -подобными d -состояниями. Тогда в модельной ячейке j , включающей две формально различных позиции (a, b), ферромагнитную и антиферромагнитную поляризации электронного спектра можно описать пространственно однородными неприводимыми векторами ферромагнетизма \mathbf{M} и антиферромагнетизма \mathbf{L} , которые выступают в роли параметров магнитного порядка. Векторы $\mathbf{M} = \langle \hat{M} \rangle$ и $\mathbf{L} = \langle \hat{L} \rangle$, определяющие взаимную ориентацию магнитных моментов в позициях a и b , соответствуют статистическим средним операторов \hat{M}_j и \hat{L}_j по гамильтониану модельной системы

$$H = H_0 + H_{int} + H_{ex}, \quad (2)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma=+,-} \sum_k \gamma_k (a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma}) + \sum_{\sigma=+,-} \sum_k t_k (a_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}),$$

$$H_{int} = -\tilde{J} \sum_{j=1}^{N_0} (\hat{S}_{aj} + \hat{S}_{bj}^2) \equiv -\frac{\tilde{J}}{2} \sum_{j=1}^{N_0} (\hat{F}_j^2 + \hat{L}_j^2),$$

$$\begin{aligned} H_{\text{ex}} &= g\mu_B \mathbf{H}_0 \sum_j (\mathbf{S}_{aj} + \mathbf{S}_{bj}) + g\mu_B \sum_j (\mathbf{H}_a \mathbf{S}_{aj} + \mathbf{H}_b \mathbf{S}_{bj}) \equiv \\ &\equiv g\mu_B \mathbf{H}_0 \sum_j \mathbf{F}_j + g\mu_B \mathbf{H}_Q \sum_j \mathbf{L}_j, \\ \hat{M}_j &= S_{aj} + S_{bj}, \hat{L}_j = S_{aj} - S_{bj}, H_a = -H_b = H_Q, \end{aligned} \quad (3)$$

где H_0 описывает систему невзаимодействующих электронов; H_{int} — обменное взаимодействие на центрах, H_{ex} — взаимодействие с внешними однородным \mathbf{H}_0 и периодическим \mathbf{H}_Q полями; \tilde{J} — эффективный внутриатомный обменный интеграл; S_{aj}, S_{bj} — спиновые операторы одноэлектронных атомов в позициях a, b , выраженные через фурье-компоненты фермиевских операторов $a_j^{\pm}(a_j), b_j^{\pm}(b_j)$ рождения (уничтожения) электронов в ячейке j ; N_0 — число ячеек; γ_k, t_k — фурье-компоненты интегралов переноса внутри (aa, bb) и между (ab) плоскостями, образованных атомами a и b .

Используя методы функционального интегрирования (см. Приложение), безразмерное выражение термодинамического потенциала системы, описываемой гамильтонианом (1), $F(\xi, \eta) = \tilde{F}(\xi, \eta) / N_0 \Delta \tilde{E}_{\text{mod}}$ при $T = 0$ может быть приведено к виду (П.5)

$$E(\xi, \eta) = \sum_{m=1,2,3,4} \int d\varepsilon d\varepsilon_1 E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) \Theta(\mu - E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta)) g_0(\varepsilon) g_1(\varepsilon_1). \quad (5)$$

Связь между модельной плотностью электронных состояний $G(E, \xi, \eta)$ и функциями $g_0(\varepsilon)$ и $g_1(\varepsilon_1)$ определяется выражением

$$G(E, \xi, \eta) = \sum_{m \in 1,2,3,4} \int d\varepsilon d\varepsilon_1 \delta(E - E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta)) g_0(\varepsilon) g_1(\varepsilon_1), \quad (6)$$

где выражение для m -й ветви модельного электронного спектра $E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta)$ определяется формулами (П.11).

Из определений

$$-\frac{\partial \tilde{F}}{\partial H_0} = g\mu_B M, \quad -\frac{\partial \tilde{F}}{\partial H_Q} = g\mu_B L$$

прослеживается связь между $M \equiv \langle \hat{M} \rangle$, $L \equiv \langle \hat{L} \rangle$ и статическими компонентами флуктуирующих полей ξ, η :

$$M = (\xi - h_0), \quad L = (\eta - h_Q). \quad (7)$$

Величины ξ и η — решения уравнений перевала $\partial \psi_1(\xi, \eta) / \partial \xi = 0$, $\partial \psi_1(\xi, \eta) / \partial \eta = 0$, которые совпадают с уравнениями состояния $\partial F / \partial \xi = 0$, $\partial F / \partial \eta = 0$ (П.12), если рассматривать выражение (4) как неравновесную свободную энергию. Равновесные значения ξ и η находятся из уравнений состояния $\partial F / \partial \xi = 0$, $\partial F / \partial \eta = 0$. Решения уравнений состояния (П.12), дополненные уравнением для химического потенциала (П.13), ищутся при постоянном значении параметра J , заданного для исследуемого сплава числа электронов n и функций $g_0(\varepsilon), g_1(\varepsilon_1)$ при $H_Q = 0$. Число d -электронов на

$$F(\xi, \eta) = E(\xi, \eta) + \frac{J}{2} (\xi - h_0)^2 + \frac{J}{2} (\eta - h_Q)^2, \quad (4)$$

где $J = \tilde{J} / \Delta \tilde{E}_{\text{mod}}$, $h_0 = g\mu_B H_0 / \tilde{J}$, $h_Q = g\mu_B H_Q / \tilde{J}$, N_0 — число магнитоактивных атомов, $\Delta \tilde{E}_{\text{mod}}$ — ширина основания модельной плотности состояний для немагнитного случая, $E(\xi, \eta)$ — безразмерная энергия спинполяризованных электронов при $T = 0$. В (4) полагается, что статические компоненты спиновых полей ξ, η , сопряженные операторам \hat{F}, \hat{L} , направлены вдоль однородного $\mathbf{H}_0(e_x, e_y, e_z)$ и альтернированного $\mathbf{H}_Q(1, 0, 0)$ полей. Учитывая достоверные экспериментальные данные об анизотропии низкотемпературной намагниченности (рис. 3), рассмотрен случай, когда векторы ферромагнетизма $\mathbf{M} \parallel \mathbf{H}_0$ и антиферромагнетизма $\mathbf{L} \parallel \mathbf{H}_Q$ лежат в плоскости, перпендикулярной тетрагональной оси. При заданном направлении $\mathbf{L}(1, 0, 0)$ и произвольном по отношению к нему направлении $\mathbf{M}(e_x, e_y, 0)$ величина $E(\xi, \eta)$ может быть вычислена с учетом структуры модельной плотности электронных состояний посредством введения двух функций $g_0(\varepsilon), g_1(\varepsilon_1)$ (см. (П.9)):

состояние $n = 1, 259$ приведено в соответствие с расчетами электронной структуры $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$ следующим образом ($x > 1$):

$$\begin{aligned} n &= [2N_d(\text{Mn}_I)(x-1) + 2N_d(\text{Fe}_I)(2-x)(\text{Fe}_I) + \\ &+ 2N_d(\text{Mn}_{II}) + 2N_d(\text{As})] / 20. \end{aligned} \quad (8)$$

Величины $N_{dNM}(N_d)$, соответствующие полному числу d -электронов на формульную единицу (f.u.) в d -зоне в немагнитном (ферримагнитном FIM1) состоянии для выбранных наборов объемов кристаллической ячейки, и величины магнитных моментов (μ_B /f.u.) приведены в табл. 1. Значение параметра $J = \tilde{J} / \Delta \tilde{E}_{\text{mod}}$ оценивается из условия $\tilde{J}\mu = \Delta E_{\text{ex}}$, которое приводится к виду

$$\begin{aligned} J\mu (\Delta \tilde{E}_{\text{mod}} / \Delta E_{\text{ex}}) &= \Delta E_{\text{ex}} / \Delta E_{\text{av}}, \\ \Delta E_{\text{av}} &= (\Delta E_{\text{up}} + \Delta E_{\text{down}}) / 2. \end{aligned} \quad (9)$$

Значения ширины плотности состояний для подзон «спин вверх» ΔE_{up} и вниз ΔE_{down} определяются на высоте $1/3$ каждой из функций $\text{DOS}_{\text{up, down}}(E)$ (рис. 4,а). Разница между смещениями центров функций

Таблица 1. Изменение основных магнитных и электронных характеристик сплава $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$ при сжатии

Тип сжатия	$V, \text{Å}^3$	NM	FIM1			FM		n
		N_{dNM}	N_d	M_d	M_{total}	M_d	M_{total}	$N_{dNM}/10$
Всестороннее сжатие	87,18	12,594	12,414	3,83	3,75	5,24	5,07	1,2594
	86,49	12,596	12,424	3,784	3,70	5,16	4,98	1,2597
	85,80	12,600	12,432	3,74	3,66	5,08	4,90	1,2600
$\parallel c$	86,67	12,594	12,422	1,89	1,85	2,56	2,47	1,2594
	86,14	12,594	12,428	1,86	1,82	2,44	2,47	1,2594
$\perp c$	87,70	12,594	12,410	1,93	1,90	2,68	2,59	1,2594
	88,20	12,594	12,404	1,96	1,92	2,72	2,63	1,2594

$\text{DOS}_{\text{up, down}}(E)$ на этой высоте отождествляется с обменным расщеплением ΔE_{ex} (рис. 4,а); μ — магнитный момент на одно d -состояние. Он оценивается из соотношения $\mu = M_{d\text{FIM1}}/10 = 0,383$. Таким образом, для стабилизации коллинеарного ферромагнитного состояния FIM1 величина \tilde{J} составляет 0,392 Ридб. Для последующих расчетов ограничимся значением $\tilde{J} = 0,286$ Ридб, что дает $J = \tilde{J}/\Delta\tilde{E}_{\text{mod}} = 0,698$.

Функции $g_0(\epsilon)$ и $g_1(\epsilon_1)$ подбираются таким образом, чтобы вычисленная с их помощью модельная плотность электронных состояний $G_{NM}(E) = G(E, \xi = \eta = 0)$ (рис. 5) как функция безразмерной энергии $E = \tilde{E}/\Delta\tilde{E}_{\text{mod}}$ была подобна плотности электронных состояний $\text{DOS}(E)$ для немагнитной фазы, полученной из *ab initio* расчетов для заданного типа деформации ячейки рис. 6. Введение этих двух функций и снятие ограничений на взаимную ориентацию векторов ферромагнетизма и антиферромагнетизма создают более реалистические предпосылки для модельного описания магнитоупорядоченных состояний (LFm, Fm, рис. 1) в системе $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ по сравнению с модельным подходом в нашей работе [12], где рассматривался случай $\mathbf{L} \perp \mathbf{M}$ и не учитывалась дисперсия $\gamma(k)/\Delta E_{\text{mod}} = \tilde{\gamma} = \text{const}$. Последнее равносильно использованию только функции $g_1(\epsilon_1)$, что приводит к невозможности воспроизведения несимметричной плотности электронных состояний (рис. 6). На этом рисунке приведены плотности d -электронных состояний в немагнитной фазе, рассчитанные для различных типов деформации элементарной ячейки. При расчетах полагалось, что всестороннему сжатию соответствует пропорциональное уменьшение параметров ячейки; сжатие вдоль тетрагональной оси выбрано таким образом, что уменьшение параметра c сопровождается увеличением параметра a при результирующем уменьшении объема; сжатие в базисной плоскости рассматривалось как равномерное уменьшение параметра a при увеличении параметра c при общем увеличении объема ячейки. В этом случае можно выделить наиболее общие законо-

мерности изменения структуры плотности электронных состояний немагнитной фазы и степени электронного заполнения как реакции на соответствующие типы деформации ячейки. Все три типа деформации по-разному изменяют электронное заполнение N_d (табл. 1).

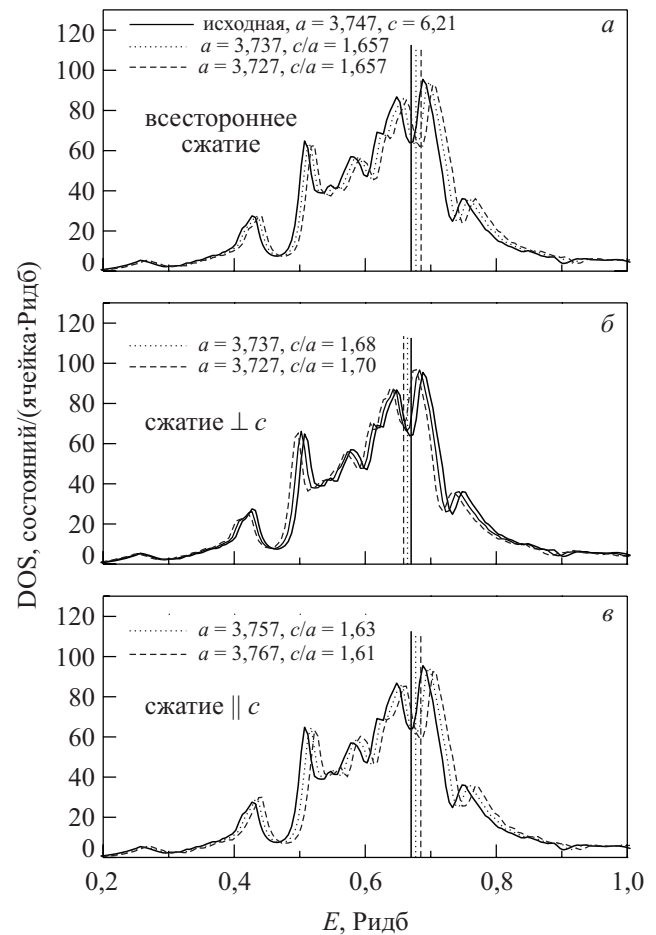


Рис. 6. Изменение исходной (сплошная линия) плотности d -электронных состояний (DOS_{dNM}), рассчитанной для немагнитного состояния при различных вариантах сжатия сплава $\text{Fe}_{0,69}\text{Mn}_{1,31}\text{As}$. Вертикальные линии указывают положение уровня Ферми.

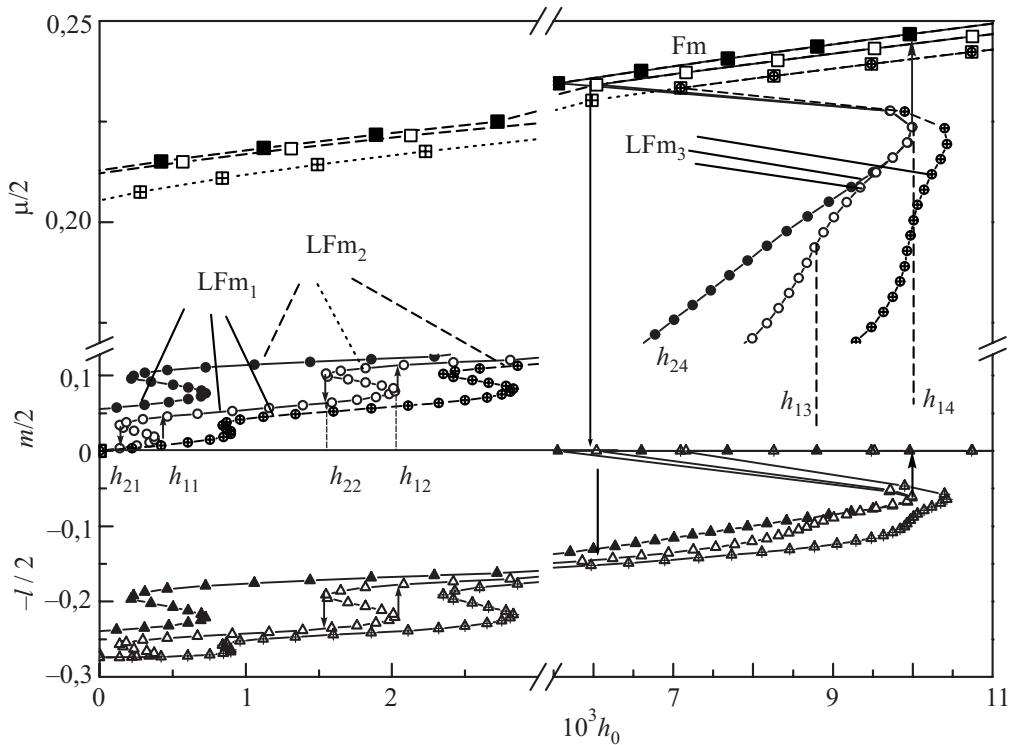


Рис. 9. Влияние структуры плотности состояний на каскад индуцированных переходов порядок–порядок AF–LFm₁–LFm₂–LFm₃–Fm. Темные символы — исходное состояние ($\Delta\varepsilon_{10} = \Delta\varepsilon_0 = dg_0 = 0$, $n = 1,2594$); светлые символы — $\Delta\varepsilon_{10} = 0,005$, $\Delta\varepsilon_0 = 0,02$, $dg_0 = 0,022$, $n = 1,2597$; светлые символы с крестом — $\Delta\varepsilon_{10} = 0,01$, $\Delta\varepsilon_0 = 0,04$, $dg_0 = 0,032$, $n = 1,26$. Вертикальные стрелки (вверх, вниз) показывают переходы на полевых границах лабильности соответствующих состояний при (возрастании, понижении) магнитного поля.

рис. 9. Показано, что в полях $h \geq 0,01$ ($H_0 \geq 6,78 \cdot 10^3$ кЭ) обе зависимости $m(h)$ и $\mu(h)$ совпадают. Этому предшествуют переходы порядок–порядок LFm₁–LFm₂–LFm₃–Fm для исходной плотности состояний. При больших величинах $\Delta\varepsilon_{10}$, $\Delta\varepsilon_0$, dg_0 минимуму энергии уже соответствует антиферромагнитное состояние (рис. 10) и переходы на рис. 9 дополняются переходом первого рода AF–LFm₁. Рисунок 10 также иллюстрирует энергетическое обоснование последова-

тельности магнитных фазовых переходов порядок–порядок в магнитном поле. Увеличение магнитного поля приводит к смещению минимума свободной энергии от LFm₁ к LFm₂ для исходного состояния (кривые 1, 3) и от AF к LFm₁ под давлением (кривые 2, 4). Все рассмотренные переходы для относительно больших $\Delta\varepsilon_{10}$, $\Delta\varepsilon_0$, dg_0 моделируют влияние всестороннего сжатия решетки и потому кривые $m(h)$, $\mu(h)$ построены с учетом увеличения числа d -электронов, сопровождающих увеличение этого сжатия (табл. 1). Как видно на рис. 9, индуцированные переходы при увеличении $\Delta\varepsilon_{10}$, $\Delta\varepsilon_0$, dg_0 сопровождаются возрастанием критических полей возникновения h_i и исчезновения h_{2i} i -го состояния. При этом увеличение $\Delta\varepsilon_{10}$, $\Delta\varepsilon_0$, dg_0 приводит к значительному уменьшению полевого гистерезиса $\Delta h_1 = h_{11} - h_{21}$ перехода из антиферромагнитного (AF) в основное слабоферромагнитное (LFm₁) состояние. Подобное поведение полностью согласуется с экспериментальными зависимостями намагниченности насыщения индуцированного состояния и критических полей от давления, измеренными для различных образцов системы Fe_{2-x}Mn_xAs [11,16].

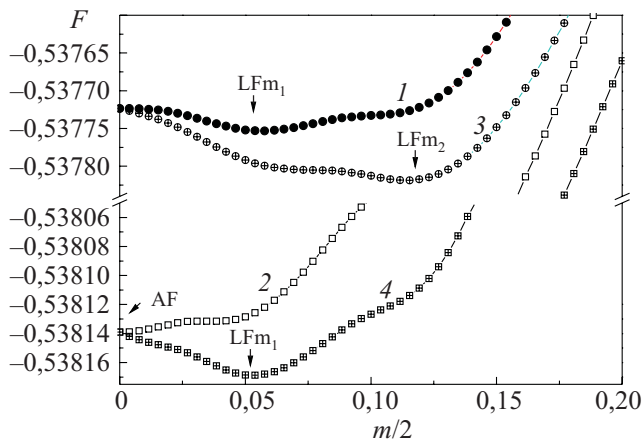


Рис. 10. Стабильность слабомагнитных состояний при изменении давления и магнитного поля: 1 (2) — энергия исходного состояния ($\Delta\varepsilon_{10} = \Delta\varepsilon_0 = dg_0 = 0$, $n = 1,2594$) при $h_0 = 0$ ($h_0 = 0,0008$); 3 (4) — энергия барически нагруженного состояния ($\Delta\varepsilon_{10} = 0,005$, $\Delta\varepsilon_0 = 0,02$, $dg_0 = 0,022$, $n = 1,2597$) при $h_0 = 0$ ($h_0 = 0,0008$).

Закключение

1. Построена модель сосуществования ферромагнитных и антиферромагнитных свойств в магнитном поле при произвольной взаимной ориентации параметров ферромагнитного и антиферромагнитного порядков.

2. Рассмотренная модель позволила не только качественно правильно отразить наблюдаемые особенности спонтанных и индуцированных слабомагнитных состояний, но и обосновать существование коллинеарного ферромагнитного состояния FIM1 как метастабильной фазы для системы $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$.

3. Показано, что влияние давления на магнитные фазовые переходы порядок–порядок в системе с коллективизированными носителями магнетизма может проявляться, как реакция на перенормировку плотности электронных состояний, обусловленную сжатием материала.

4. Из приведенного рассмотрения вытекает, что тенденции изменения магнитных характеристик многокомпонентных материалов при легировании можно выявлять путем анализа изменений легко рассчитываемой для немагнитной фазы плотности электронных состояний, сопровождающих легирование.

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках конкурсного проекта ДФФДУ-БРФФД № 29.1/016, а также Европейского фонда региональных исследований (EFRD) (контракт No. UDA-POIG.01.03.01–00–058/08/00).

Приложение

В статическом пределе при использовании преобразования Стратоновича–Хаббарда,

$$\exp(aS^2) \equiv (\alpha/\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-a\xi^2 - 2a\xi S),$$

свободная энергия системы с гамильтонианом (1) при низких температурах, когда можно пренебречь термическими флуктуациями обменных полей ($\xi_{q \neq 0}, \eta_{q \neq 0}$), может быть представлена в виде функционального интеграла только по компонентам однородных обменных полей $\eta = \eta_{q=0}, \xi = \xi_{q=0}$ [3]:

$$F = -\beta^{-1} \ln \int d\eta d\xi \exp(-\beta \Psi\{\eta, \xi\}) + \mu N, \quad (\text{П.1})$$

$$\Psi(\xi, \eta) = \Psi_0 + \Psi_1,$$

$$\Psi_1(\xi, \eta) = -\beta^{-1} \ln \text{Tr} \exp(-\beta(\tilde{H}_0 + \tilde{H}_{\text{int}})), \quad (\text{П.2})$$

$$\Psi_0(\xi, \eta) = \frac{1}{2} N_0 \tilde{J} \left\{ \left(\xi - \frac{g\mu_B H_0}{\tilde{J}} \right)^2 + \left(\eta - \frac{g\mu_B H_Q}{\tilde{J}} \right)^2 \right\}, \quad (\text{П.3})$$

$$\tilde{H}_{\text{int}} = -\tilde{J} (\xi e_x \hat{F}_x + \xi e_y \hat{F}_y + \xi e_z \hat{F}_z + \eta \hat{L}_x), \quad (\text{П.4})$$

где фурье-компоненты операторов спиновой плотности $\hat{F}_{qv}, \hat{L}_{qv}$ ($v \in x, y, z$) определяются через операторы рождения и уничтожения электронов $a_{k\sigma}^+$ ($a_{k\pm\sigma}$), $b_{k\sigma}^+$ ($b_{k\pm\sigma}$) известными соотношениями [3]; e_v — направляющие косинусы внешнего $\mathbf{H}_0 = H_0(\mathbf{ie}_x + \mathbf{je}_y + \mathbf{ke}_z)$ и обменного $\tilde{\xi} = \xi(\mathbf{ie}_x + \mathbf{je}_y + \mathbf{ke}_z)$ полей, определяющие расположение вектора ферромагнетизма по отношению к выделенному вдоль оси абсцисс вектору антиферромагнетизма, $\tilde{H}_0 = H_0 - \mu N$, μ — химический потенциал, $N(2N_0)$ — полное число электронов (атомов).

В этом случае $\Psi_1(\xi, \eta)$ легко вычисляется и после взятия интегралов методом перевала «безразмерное» выражение свободной энергии в расчете на атом $F(\xi, \eta) = \tilde{F}(\xi, \eta) / N_0 \Delta \tilde{E}_{\text{mod}}$ в пределе $T \rightarrow 0, H_Q = 0$ приобретает вид

$$F(\xi, \eta) = E(\xi, \eta) + \frac{J}{2} (\xi - \eta)^2 + \frac{J}{2} (\eta - h_Q)^2, \quad (\text{П.5})$$

$$E(\xi, \eta) = \frac{V_0}{N_0 \Delta E_{\text{mod}} 16\pi^3} \times \sum_{m=1}^4 \int d^3k \left[\left\{ \left(E^m(k, \xi, \eta) - \mu \right) \Theta(\mu - E^m(k, \xi, \eta)) \right\} \right], \quad (\text{П.6})$$

где

$$\Theta(x) = 1, \quad x > 0$$

$$\Theta(x) = 0, \quad x < 0$$

ΔE_{mod} — размерный параметр, характеризующий эффективную ширину магнитоактивной зоны в немагнитном состоянии, где $J = \tilde{J} / \Delta \tilde{E}_{\text{mod}}, h = g\mu_B H_0 / (\Delta \tilde{E}_{\text{mod}} J), h_Q = g\mu_B H_Q / (\Delta \tilde{E}_{\text{mod}} J)$. $E^m(k, \xi, \eta)$ — решения секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} \gamma_{k\uparrow} - E(k, \xi, \eta) & -\tilde{J}(\xi_x + \eta - \frac{\xi_y}{i})/2 & t_k & 0 \\ -\tilde{J}(\xi_x + \eta - \frac{\xi_y}{i})/2 & \tilde{\gamma}_{k\downarrow} - E(k, \xi, \eta) & 0 & t_k \\ t_k & 0 & \gamma_{k\uparrow} - E(k, \xi, \eta) & -\tilde{J}(\xi_x - \eta + \frac{\xi_y}{i})/2 \\ 0 & t_k & -\tilde{J}(\xi_x - \eta + \frac{\xi_y}{i})/2 & \gamma_{k\downarrow} - E(k, \xi, \eta) \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{П.7})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_{k\uparrow\downarrow} &= \gamma_k \mp \tilde{J} \xi_z / 2, \quad \xi_v = \xi e_v, \\ E^{1,2}(k, \xi, \eta) &= \gamma_k \pm \sqrt{t_k^2 + \left(\frac{\tilde{J}}{2}\right)^2 (\eta^2 + \xi^2) + \tilde{J} \sqrt{t_k^2 \xi^2 + \left(\frac{\tilde{J}}{2}\right)^2 (\xi\eta)^2}}, \\ E^{3,4}(k, \xi, \eta) &= \gamma_k \pm \sqrt{t_k^2 + \left(\frac{\tilde{J}}{2}\right)^2 (\eta^2 + \xi^2) - \tilde{J} \sqrt{t_k^2 \xi^2 + \left(\frac{\tilde{J}}{2}\right)^2 (\xi\eta)^2}}, \end{aligned} \quad (\text{П.8})$$

ξ, η соответствуют решениям уравнений перевала $\partial\psi/\partial\xi = 0$, $\partial\psi/\partial\eta = 0$.

Если электронный спектр системы в приближении ближайших соседей допускает факторизацию по \mathbf{k} (например, t_k зависит только от k_z , а γ_k — только от k_x, k_y), то возможно перейти от трехмерного интегрирования по \mathbf{k} к двумерному, введя функции

$$\begin{aligned} g_0(\varepsilon) &= \left(\frac{V_0}{16\pi^3 N_0}\right)^{2/3} \int dk_x dk_y \delta(\varepsilon - \gamma_k / \Delta E_{\text{mod}}), \\ g_1(\varepsilon_1) &= \left(\frac{V_0}{16\pi^3 N_0}\right)^{1/3} \int dk_z \delta(\varepsilon_1 - t_k / \Delta E_{\text{mod}}). \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

Тогда для (П.6) имеем

$$\begin{aligned} E(\xi, \eta) &= \sum_{m=1,4} \int d\varepsilon d\varepsilon_1 E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) \times \\ &\times \Theta(\mu - E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta)) g_0(\varepsilon) g_1(\varepsilon_1). \end{aligned} \quad (\text{П.10})$$

Здесь $E^m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta)$ — «безразмерные» ветви электронного спектра $E^m(\gamma_k, t_k, \xi, \eta) \equiv E^m(k, \xi, \eta)$ — имеют вид

$$\begin{aligned} E^{1,2}(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) &= \\ &= \varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 + \left(\frac{J}{2}\right)^2 (\eta^2 + \xi^2) + J \sqrt{\varepsilon_1^2 \xi^2 + \left(\frac{J}{2}\right)^2 (\xi\eta)^2}}, \\ E^{3,4}(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) &= \\ &= \varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 + \left(\frac{J}{2}\right)^2 (\eta^2 + \xi^2) - J \sqrt{\varepsilon_1^2 \xi^2 + \left(\frac{J}{2}\right)^2 (\xi\eta)^2}}. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Формально выражение (П.5) можно рассматривать как неравновесный термодинамический потенциал, зависящий от неравновесных параметров порядка ξ, η , равновесное значение которых определяют из уравнений состояния $\partial F / \partial \xi = 0$, $\partial F / \partial \eta = 0$, совпадающих с уравнениями перевала. Уравнения состояния при $H_Q = 0$, дополненные уравнениями для химического потенциала (П.13), имеют вид

$$\begin{aligned} h &= \xi + \frac{1}{J} \sum_{m=1}^2 \int g_1(\varepsilon_1) g_0(\varepsilon) [\partial E_m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) / \partial \xi] \times \\ &\times [\Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta))] d\varepsilon d\varepsilon_1, \\ 0 &= \eta + \frac{1}{J} \sum_{m=1}^2 \int g_1(\varepsilon_1) g_0(\varepsilon) [\partial E_m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta) / \partial \eta] \times \\ &\times [\Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta))] d\varepsilon d\varepsilon_1, \end{aligned} \quad (\text{П.12})$$

$$n = \int g_1(\varepsilon_1) g_0(\varepsilon) \sum_{m=1}^2 [\Theta(\mu - E_m(\varepsilon, \varepsilon_1, \xi, \eta))] d\varepsilon d\varepsilon_1. \quad (\text{П.13})$$

Переход к использованию плотности электронных состояний немагнитной фазы (6) позволяет сопоставлять решения уравнений состояния (П.12) с изменением немагнитной плотности электронных состояний системы, полученной из результатов *ab initio* расчетов.

1. Б.И. Резер, В.И. Гребенников, *ФММ* **83**, 29 (1997).
2. N.K. Sun, Ma.Q. Zhang, J. Du, and Z.D. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 112503 (2007); N.K. Sun, Y.B. Li, D. Li, Q. Zhang, W.J. Feng, and Z.D. Zhang, *Phys. Rev.* **B74**, 172402 (2006).
3. Д.В. Варюхин, В.Ю. Таренков, А.И. Дьяченко, В.И. Вальков, А.В. Головчан, А.В. Подлесный, *ФТВД* **19**, 157 (2009).
4. В.И. Вальков, Э.А. Завадский, С.А. Бужинский, *ФТТ* **31**, 238 (1989).
5. V. Baron, M. Neronin, H. Rundlijf, and R. Tellgren, *JMMM* **169**, 271 (1997).
6. K. Sugiyama, T. Kanomata, H. Ido, and M. Date *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 1558 (1988).
7. В.И. Вальков, И.Ф. Грибанов, А.В. Головчан, Б.М. Тодрис, *ФНТ* **31**, 1277 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 971 (2005)].
8. В.И. Вальков, Э.А. Завадский, *ФТВД* **1**, №4, 5 (1991).
9. T. Kanomata, K. Shirakava, and T. Kaneko, *Phys. Lett.* **124**, 100 (1987).
10. В.И. Вальков, А.В. Головчан, *ФНТ* **34**, 53 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 43 (2008)].
11. В.И. Вальков, С.А. Бужинский, Н.А. Романова, *ФТТ* **33**, 1936 (1991).
12. В.И. Вальков, А.В. Головчан, *ФНТ* **33**, 1109 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 843 (2007)].
13. *The Munich SPR-KKR package, version 3.6*, H. Ebert et al., <http://olymp.cup.uni-muenchen.de/ak/ebert/SPRKKR>; H. Ebert,

Fully Relativistic Band Structure Calculations for Magnetic Solids — Formalism and Application, in: *Electronic Structure and Physical Properties of Solids*, H. Dreysse (ed.), Lecture Notes in Physics, vol. 535, p. 191, Springer Berlin (2000).

14. S.H. Vosko and L. Wilk, *Phys. Rev.* **B22**, 3812 (1980).
15. L. Hollan, *Ann. Chim.* **1**, 437 (1966).
16. В.И. Вальков, В.М. Кирбитов, *УФЖ* **32**, 1418 (1987).

Magnetic order–order phase transitions in itinerant magnetics: $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$

V.I. Valkov, A.V. Golovchan, V.P. Dyakonov,
and H. Szymczak

The magnetic field-induced order–order magnetic phase transitions in $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ have been analyzed by using the results of *ab initio* calculations of electronic structure of the $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ system alloys and the two-band model of itinerant magnetic. Within the

limits of the model it is shown that the low-temperature ground and magnetic field-induced states can be described by the coexistence of homogeneous ferromagnetic and periodic antiferromagnetic components of the total magnetic moment of a *d*-band. In the context of the model approach it is shown that the influence of hydrostatic pressure on order–order phase transitions is caused by the structural renormalization of the density of electronic states due to the material compression. The model predicts that the collinear ferromagnetism in the $\text{Fe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{As}$ system is a metastable state, the transition to which may occur only in high magnetic fields.

PACS: 71.20.Be Transition metals and alloys;
75.50.Ee Antiferromagnetics;
75.50.Gg Ferrimagnetics;
75.10.Lp Band and itinerant models.

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