



**Received:** 30.08.2024  
**Revised:** 30.09.2024  
**Accepted:** 25.10.2024  
**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.5.170-180

## SPONTANEOUS VOLUME MAGNETOSTRICTION IN ANTIFERROMAGNETS AND ITS MANIFESTATION IN AN Fe–Rh ALLOY

E. Z. Valiev<sup>a</sup> \* and V. I. Bobrovskii<sup>b</sup>

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russia*

<sup>a)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0760-0370>  [valiev@imp.uran.ru](mailto:valiev@imp.uran.ru);

<sup>b)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4692-8889>  [bobrovskii@imp.uran.ru](mailto:bobrovskii@imp.uran.ru)

\*Corresponding author. Email: [valiev@imp.uran.ru](mailto:valiev@imp.uran.ru)

Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620108, Russia  
Tel./Fax: +7 (343) 374-0003

A formula for spontaneous volume magnetostriction of a two-sublattice antiferromagnet is obtained and discussed in detail in terms of an exchange striction model. The main feature of the formula is taking into account the dependence of volumetric strains on the directions of sublattice magnetization vectors. The calculation shows that this way it is possible to explain giant forced volume magnetostriction previously observed in the antiferromagnetic state of the Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> alloy. Besides, the temperature dependences of the specific volume and critical magnetic field of this alloy are calculated, and they are in a satisfactory agreement with the experiment.

**Keywords:** magnetic sublattices, magnetostriction, ferromagnets, antiferromagnets, exchange integrals, exchange striction model, magnetic phase transitions, magnetocaloric effect

### Acknowledgment

*The research was performed at the IMP Neutron Material Science Complex under the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme Flux, No. 122021000031-8).*

### References

1. Fallot, M. Les alliages du fer avec les métaux de la famille du platine. *Annales de Physique*, 1938, 11 (10), 291–332. DOI: 10.1051/anphys/193811100291.
2. Staunton, J.B., Banerjee, R., Dos Santos Dias, M., Deak, A., and Szunyogh, L. Fluctuating local moments, itinerant electrons, and the magnetocaloric effect: compositional hypersensitivity of FeRh. *Physical Review B*, 2014, 89, 054427. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.054427.
3. Zakharov, A.I., Kadomtseva, A.M., Levitin, R.Z., and Ponyatovskii, E.G. Magnetic and magnetoelastic properties of a metamagnetic iron–rhodium alloy. *Soviet Physics JETP*, 1964, 19 (6), 1348–1353.
4. Shirane, G., Chen, C.W., Flinn, P.A., and Nathans, R. Hyperfine fields and magnetic moments in the Fe–Rh system. *Journal of Applied Physics*, 1963, 34, 1044–1045. DOI: 10.1063/1.1729362.
5. Annaorazov, M.P., Asatryan, K.A., Myalikgulyev, G., Nikitin, S.A., Tishin, A.M., and Tyurin, A.L. Alloys of the Fe Rh system as a new class of working material for magnetic refrigerators. *Cryogenics*, 1992, 32 (10), 867–872. DOI: 10.1016/0011-2275(92)90352-B.



6. Zverev, V.I., Saletsky, A.M., Gimaev, R.R., Tishin, A.M., Miyanaga, T., and Staunton, J.B. Influence of structural defects on the magnetocaloric effect in the vicinity of the first order magnetic transition in Fe<sub>50.4</sub>Rh<sub>49.6</sub>. *Applied Physics Letters*, 2016, 108 (19), 192405. DOI: 10.1063/1.4949355.
7. Kouvel, J.S. and Hartelius, C.C. Anomalous magnetic moments and transformations in the ordered alloy FeRh. *Journal of Applied Physics*, 1962, 33 (3), 1343–1344. DOI: 10.1063/1.1728721.
8. Ibarra, M.R. and Algarabel, P.A. Giant volume magnetostriction in the FeRh alloy. *Physical Review B*, 1994, 50, 4196–4199. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.4196.
9. Valiev, E.Z. and Bobrovskii, V.I. On the search of new magnetic materials for cryogenics. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2019, 4, 6–15. DOI: 10.17804/2410-9908.2019.4.006-015. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2019-4/2019-4\\_261.html](http://dream-journal.org/issues/2019-4/2019-4_261.html)
10. Kittel, C. Model of exchange-inversion magnetization. *Phys. Rev.*, 1960, 120, 335–342. DOI: 10.1103/PhysRev.120.335.
11. Gruner, M.E., Hoffman, T., and Entel, P. Instability of the rhodium magnetic moment as the origin of the metamagnetic phase transition in  $\alpha$ -FeRh. *Physical Review B*, 2003, 67, 064415. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.064415.
12. Sandratskii, L.M. and Mavropoulos, P. Magnetic excitations and femtomagnetism of FeRh: a first-principles study. *Physical Review B*, 2011, 83, 174408. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.174408.
13. Bean, C.P. and Rodbell, D.S. Magnetic disorder as a first-order phase transformation. *Phys. Rev.*, 1962, 126, 104–115. DOI: 10.1103/PhysRev.126.104.
14. Valiev, E., Gimaev, R., Zverev, V., Kamilov, K., Pyatakov, A., Kovalev, B., and Tishin, A. Application of the exchange-striction model for the calculation of the FeRh alloys magnetic properties. *Intermetallics*, 2019, 108, 81–86. DOI: 10.1016/j.intermet.2019.02.015.
15. Valiev, E.Z. Isotropic magnetoelastic interaction in two-sublattice ferri- and antiferromagnets: mean-field approximation for the Heisenberg model. *Physics of Metals and Metallography*, 2003, 96 (2), 121–127.
16. Valiev, E.Z. and Kazantsev, V.A. Magnetocaloric effect in La(Fe<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>)<sub>13</sub> ferromagnets. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2011, 113 (6), 1000–1005. DOI: 10.1134/S1063776111150118.
17. Valiev, E.Z. and Teplykh, A.E. Magnetovolume effects and effect of pressure on the temperature dependence of sublattice magnetization in H<sub>0</sub>(Co<sub>0.9</sub>Ga<sub>0.1</sub>)<sub>2</sub> compounds. *Crystallography Reports*, 2016, 61 (1), 89–93. DOI: 10.1134/S1063774516010259.
18. Landau, L.D. and Lifshitz, E.M. *Statistical Physics: Vol. 5*, Elsevier, 2013, 544 p. ISBN 9780080570464.
19. Ziman, J.M. *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, Cambridge, 1972, 425 p. ISBN 0 521 29733 8.
20. Tyablikov, S.V. *Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Springer, New York, 1967, 354 p. ISBN 978-1-4899-7091-6.
21. Valiev, E.Z. Entropy and magnetocaloric effect in ferromagnets and antiferromagnets. *The Physics of Metals and Metallography*, 2007, 104, 8–12. DOI: 10.1134/S0031918X07070022.



Подана в журнал: 30.08.2024  
УДК 537.622.6:537.634.2  
DOI: 10.17804/2410-9908.2024.5.170-180

## САМОПРОИЗВОЛЬНАЯ ОБЪЕМНАЯ МАГНИТОСТРИКЦИЯ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ И ЕЕ ПРОЯВЛЕНИЕ В СПЛАВЕ Fe–Rh

Э. З. Валиев<sup>a, \*</sup>, В. И. Бобровский<sup>b</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620137, Россия*

<sup>a)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0760-0370>  [valiev@imp.uran.ru](mailto:valiev@imp.uran.ru);

<sup>b)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4692-8889>  [bobrovskii@imp.uran.ru](mailto:bobrovskii@imp.uran.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [valiev@imp.uran.ru](mailto:valiev@imp.uran.ru)  
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия  
Тел.: +7 (343) 374-00-03; факс: +7 (343) 374-00-03

В терминах обменно-стрикционной модели получена и подробно обсуждается формула для самопроизвольной объемной магнитострикции двухподрешеточного антиферромагнетика. Основной особенностью формулы является учет зависимости объемных деформаций от направления векторов намагниченности подрешеток. Расчет показал, что таким образом можно объяснить гигантскую вынужденную объемную магнитострикцию, наблюдавшуюся ранее в антиферромагнитном состоянии сплава Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub>. Также рассчитаны и удовлетворительно согласуются с экспериментом температурные зависимости удельного объема и критического магнитного поля этого сплава.

**Ключевые слова:** магнитные подрешетки, магнитострикция, ферромагнетики, антиферромагнетики, обменные интегралы, обменно-стрикционная модель, магнитные фазовые переходы, магнитокалорический эффект

### 1. Введение

В упорядоченном сплаве Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> при повышении температуры наблюдается фазовый переход первого рода от антиферромагнитной (АФМ) фазы к ферромагнитной (ФМ) [1]. Этот переход происходит при температуре  $T_N$ , лежащей в температурной области от комнатной температуры до 400 К. Температура перехода сильно зависит от состава и присутствия дефектов кристаллической структуры [2]. Фазовый переход сопровождается увеличением объема приблизительно на 1 %, а кристаллическая структура (ОЦК, типа CsCl) не изменяется [3]. Нейтронно-дифракционными экспериментами [4] установлено, что в АФМ-фазе только атомы железа имеют магнитный момент  $\mu_{Fe} \approx 3,2\mu_B$ , а  $\mu_{Rh} = 0$ . При температурах выше  $T_N$  магнитный момент  $\mu_{Fe}$  сохраняет свое значение, но возникает магнитный момент на атомах родия,  $\mu_{Rh} \approx 1\mu_B$ . Кроме того, при АФМ–ФМ переходе наблюдаются аномально большие изменения магнитной энтропии [5, 6], электросопротивления [7] и вынужденной объемной магнитострикции [8]. Максимальный магнитокалорический эффект наблюдается в эквиатомном Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> [6]. Эти свойства создают для сплава Fe<sub>50</sub>Rh<sub>50</sub> перспективы использования в элементах памяти, а также в устройствах магнитного охлаждения [9] и магнитострикционных устройствах.

Для объяснения причин АФМ–ФМ перехода в данном материале были предложены различные механизмы: модель с инверсией знака обменного взаимодействия между атомами железа [10], теоретические исследования, основанные на вычислении электронной структу-



ры из первых принципов [11, 12], обменно-стрикционная модель ферромагнетиков [13, 14]. Однако единое мнение о причинах этого фазового перехода до сих пор отсутствует.

Целью настоящей работы является обобщение и развитие идей, обсуждаемых в работах [13, 14] для объяснения эффекта вынужденной гигантской объемной магнитострикции [8] и анализа природы АФМ–ФМ перехода в сплаве Fe–Rh. Результаты нашего расчета объясняют также температурную зависимость коэффициента линейного расширения и магнитного критического поля, экспериментально установленную в работе [8].

## 2. Постановка задачи и методы решения

Для нашего анализа используем модель антиферромагнетика (АФ), состоящего из двух эквивалентных магнитных подрешеток, ограничившись вдобавок случаем магнитоизотропного кристалла. Обозначим через 1 и 2 узлы первой и второй подрешеток и условимся считать, что внутри подрешеток имеет место ферромагнитное упорядочение, а между подрешетками – антиферромагнитное. В соответствии с этим примем, что для обменных интегралов между атомами внутри подрешеток 1 и 2 выполняется соотношение  $J_{11} = J_{22} > 0$ , а между атомами различных подрешеток – соотношение  $J_{12} = J_{21} < 0$ . При этом спины атомов подрешеток будем обозначать  $s_1 = s_2 = s$ .

Наш расчет объемной магнитострикции АФ основан на обобщении обменно-стрикционной модели ферромагнетика, впервые предложенной Бином и Родбеллом в работе [13]. Обобщение этой модели для случая магнитоупорядоченных систем с двумя магнитными подрешетками дано в работе [15] (см. также [16, 17]). В настоящей работе мы сосредоточимся на более глубоком, чем это было сделано в работах [15–17], рассмотрении поведения магнитострикции антиферромагнетика.

В рамках такого подхода термодинамический потенциал, учитывающий обменную энергию кристалла, энергию изотропных объемных деформаций и фононный вклад в приближении Дебая, можно записать в следующем виде:

$$F = \frac{1}{2}n J_{11}s^2\sigma_1^2 + \frac{1}{2}nJ_{22}s^2\sigma_2^2 + nJ_{12}\sigma_1\sigma_2 (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)s^2 - nkT [\ln Z(y_1) + \ln Z(y_2)] + \frac{1}{2}B\omega^2 + P\omega + NkT \left[ 3\ln \left( 1 - \exp \left( -\frac{\Theta}{T} \right) - D(\Theta/T) \right) \right]. \quad (1)$$

Здесь:

$$y_1 = \frac{s}{kT} [2\mu_B (\mathbf{e}_1\mathbf{H}) + J_{11}s\sigma_1 + J_{12} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)s\sigma_2];$$

$$y_2 = \frac{s}{kT} [2\mu_B (\mathbf{e}_2\mathbf{H}) + J_{22}s\sigma_2 + J_{12} (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)s\sigma_1];$$

$$Z(y_1) = sh \left( \left[ 1 + \frac{1}{2s} \right] y_1 \right) / sh \left( \frac{1}{2s} y_1 \right);$$

$$Z(y_2) = sh \left( \left[ 1 + \frac{1}{2s} \right] y_2 \right) / sh \left( \frac{1}{2s} y_2 \right);$$

$\sigma_1$  и  $\sigma_2$  – приведенные намагниченности подрешеток антиферромагнетика;

$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$  – единичные векторы направлений намагниченности подрешеток антиферромагнетика;

$\mathbf{H}$  – внешнее магнитное поле;

$\omega = \Delta V/V$  – относительное изменение объема  $V$ ;

$P$  – давление;

$B$  – модуль всестороннего сжатия;

$\Theta$  – температура Дебая;

$D(\Theta/T)$  – функция Дебая [18];



$J_{11}, J_{22} > 0$  и  $J_{12} < 0$  – внутривузельный и межузельный обменные интегралы антиферромагнетика;

$J_{11} = J_{22} = J_{11}^0 + \gamma_1 \omega$  с учетом магнитоупругого взаимодействия в линейном приближении по  $\omega$ ;

$$J_{12} = J_{12}^0 + \gamma_2 \omega ;$$

$$\Theta = \Theta_0 - \Gamma \omega ;$$

$\gamma_1, \gamma_2$  и  $\Gamma$  – константы магнитоупругого взаимодействия и Грюнайна соответственно;

$n$  – число атомов в единице объема одной подрешетки антиферромагнетика (половина атомов железа в единице объема сплава Fe–Rh);

$N$  – полное число атомов в единице объема сплава.

Формула (1) является обобщением модели Бина – Родбелла для двухузельного антиферромагнетика, дополненной учетом теплового расширения решетки через зависимость температуры Дебая от объема [14, 16, 17]. Первые 4 слагаемых в выражении (1) описывают магнитный вклад с учетом магнитоупругого взаимодействия, а слагаемые 5 и 6 – энергию объемных деформаций. Последнее слагаемое – это фононный вклад в приближении Дебая – Грюнайна [18, 19].

Равновесные значения для намагниченности подрешеток и относительного изменения объема следуют из условия минимума термодинамического потенциала (1) по переменным  $\sigma_1, \sigma_2$  и  $\omega$ , давая в результате формулы для расчета температурных зависимостей намагниченности подрешеток и относительного изменения объема:

$$\sigma_1 = Z'(y_1)/Z(y_1) = B_s(y_1) ; \quad \sigma_2 = Z'(y_2)/Z(y_2) = B_s(y_2), \quad (2)$$

где  $B_s(y)$  – функция Бриллюэна для спина  $s$ .

Выполнив с учетом  $J_{11} = J_{22} = J_{11}^0 + \gamma_1 \omega, J_{12} = J_{12}^0 + \gamma_2 \omega$  дифференцирования  $\partial F/\partial \omega, \partial y_1/\partial \omega, \partial y_2/\partial \omega$ , из условия  $\partial F/\partial \omega = 0$  после простых, хотя и несколько громоздких преобразований можно получить

$$B \omega = \frac{1}{2} n s^2 \gamma_1 [\sigma_1^2 + \sigma_2^2] + n s^2 \sigma_1 \sigma_2 \gamma_2 (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) - P + 3kN \frac{T}{\Theta} \Gamma D(T/\Theta). \quad (3)$$

Отметим, что формула (3) является обобщением соответствующего выражения, полученного в работе [14] для частного случая  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma; \gamma_1 = 0; \gamma_2 = \gamma; (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) = -1$ .

В этом выражении первые два слагаемых – это объемная магнитострикция антиферромагнетика, последние слагаемые учитывают влияние всестороннего давления и тепловое расширение решетки.

Отличительной особенностью уравнения (3) является учет зависимости относительного изменения объема (самопроизвольной магнитострикции) антиферромагнетика от взаимной ориентации намагниченностей подрешеток (т. е. векторов  $\mathbf{e}_1$  и  $\mathbf{e}_2$ ). Отметим, что при переходе в магнитном поле от антиферромагнитного ( $\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2$ ) = -1 состояния к ферромагнитному ( $\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2$ ) = +1 изменение  $\omega$  может составлять несколько процентов.

Равновесные конфигурации спиновых моментов двухузельного магнетика в магнитном поле, направленном по оси  $z$ , определяются из решения известной системы уравнений [20–21]

$$\begin{cases} (J_{11} s^2 \sigma_1^2 + \lambda_1) e_1^\alpha + J_{12} s^2 \sigma_1 \sigma_2 e_2^\alpha = 2 s \sigma_1 \mu_B H \delta_{\alpha z} \\ J_{12} s^2 \sigma_1 \sigma_2 e_1^\alpha + (J_{11} s^2 \sigma_2^2 + \lambda_2) e_2^\alpha = -2 s \sigma_2 \mu_B H \delta_{\alpha z} \end{cases}, \quad (4)$$

где  $\alpha = x, y, z; \lambda_1, \lambda_2$  – неопределенные множители Лагранжа,  $\delta_{\alpha\beta}$  – символ Кронекера.



Как показано в работе [20], уравнения (4) имеют решения двух типов. Одно из них соответствует обращению в нуль определителя системы (4), другое возникает, когда этот определитель не равен нулю.

В первом случае из условия разрешимости системы уравнений (4) получаем для множителей Лагранжа:

$$\lambda_1 = -J_{11}s^2\sigma_1^2 + J_{12}s^2\sigma_1\sigma_2; \quad \lambda_2 = -J_{11}s^2\sigma_2^2 + J_{12}s^2\sigma_1\sigma_2,$$

а для намагниченностей подрешеток имеем

$$\begin{cases} J_{12}s^2\sigma_1\sigma_2 (e_1^{x,y} + e_2^{x,y}) = 0 \\ J_{12}s^2\sigma_1\sigma_2 (e_1^z + e_2^z) = -2s\sigma_1\mu_B H \end{cases} \quad (5)$$

Выбором ориентации осей системы координат получаем в качестве решения первого уравнения (5):  $e_1^y = e_2^y = 0; e_1^x = -e_2^x$ . Тогда из второго уравнения с учетом принятого нами соотношения  $\sigma_1 = \sigma_2$  следует  $e_1^z = e_2^z = \mu_B H / H_c$ , где введено следующее обозначение:

$$H_c = (s|J_{12}|\sigma) / \mu_B. \quad (6)$$

После этого из условия нормировки  $|e_1| = |e_2| = 1$  для компонентов этих векторов следует

$$e_1^z = e_2^z = H/H_c; \quad e_1^x = -e_2^x = [1 - (H/H_c)^2]^{1/2}; \quad (e_1 e_2) = 2(H/H_c)^2 - 1. \quad (7)$$

Имеющее физический смысл решение системы требует действительных значений компонент  $e_1^x, e_2^x$ , для чего необходимо  $H \leq H_c$ .

В случае же  $H > H_c$  решением системы (5) является

$$e_1^z = e_2^z = 1; \quad e_1^y = e_2^y = 0; \quad e_1^x = e_2^x = 0.$$

Здесь спины обеих подрешеток ориентированы вдоль внешнего поля, и реализуется ферромагнитное упорядочение. Значение напряженности внешнего поля  $H_c$ , при котором один тип решений переходит к другому, очевидно, имеет смысл критического магнитного поля.

### 3. Результаты и обсуждение

В качестве отправной точки применения изложенного выше подхода для описания свойств Fe–Rh и сравнения их с экспериментом примем для фигурирующих в формуле (3) параметров следующие значения:  $\gamma_1 = 0, \gamma_2 = \gamma > 0$ . Такой выбор согласуется с гипотезой Киттеля о зависимости интеграла обмена между подрешетками АФ от объема и с экспериментальным фактом, согласно которому объем материала в АФМ-состоянии уменьшается по сравнению с парамагнитным состоянием (в АФМ-фазе при  $H = 0$  выполняется  $(e_1 e_2) = -1$ ). Тем самым мы принимаем в качестве исходного факта существование отрицательной самопроизвольной объемной магнитострикции АФМ-фазы в сплаве Fe–Rh. Как показано в работе [14], это позволяет также объяснить увеличение температуры Нееля в Fe–Rh под давлением.

Таким образом, формула (3) принимает вид

$$\omega = [ns^2\sigma_1\sigma_2\gamma (e_1 e_2) - P + 3kN (T/\Theta) \Gamma D(T/\Theta)]/B. \quad (8)$$

Здесь обменный интеграл  $J_{12} = J_{12}^0 + \gamma\omega$  зависит от объема. Как показывают численные расчеты и анализ, зависимость температуры Нееля от объема (давления) определяется только теми слагаемыми в (8), которые не зависят от намагниченности. Это позволяет нам считать, что в формуле (6) для  $H_c$  можно положить

$$J_{12} = J_{12}^0 + \gamma [3kN (T/\Theta) \Gamma D(T/\Theta)]/B. \quad (9)$$

Формулы (7–9) мы используем для расчетов зависимостей  $\omega(H)$ ,  $\omega(T)$ ,  $H_c(T)$ , чтобы сравнить их с экспериментальными данными работы [8].

В итоге выражение для температурной зависимости коэффициента линейного расширения  $\Delta l/l = \omega(T) / 3$  при  $P = 0$  принимает вид

$$\Delta l/l = [-ns^2\sigma^2\gamma + 3kN (T/\Theta) \Gamma D(T/\Theta)]/3B. \quad (10)$$

Здесь учтено, что в АФМ-фазе  $(e_1 e_2) = -1$ ;  $y_1 = y_2 = y$ ;  $H = 0$ .

Результат расчета температурной зависимости коэффициента линейного расширения представлен на рис. 1.

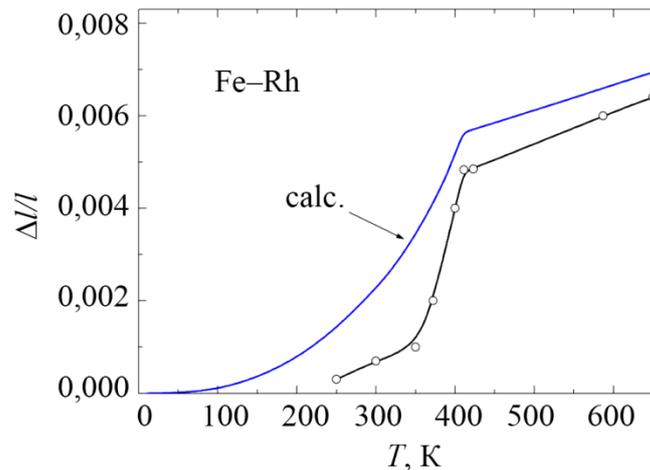


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента линейного расширения: синяя линия – результат расчета, черная – экспериментальные данные из [8]

Значение  $\Delta l/l$  в формуле (10) при 0 К равно  $-ns^2\sigma^2\gamma/3$ , то есть 1/3 максимальной величины отрицательной объемной магнитострикции сплава при  $T = 0$  К. На данном рисунке расчетная кривая искусственно смещена вверх на это значение, чтобы ярче продемонстрировать взаимный ход обеих кривых, обеспечив их совпадение в начале координат.

При расчетах были приняты следующие численные значения фигурирующих в формуле физических величин:  $J_{11}^0 = 4,49 \cdot 10^{-14}$  эрг;  $J_{12}^0 = -0,30 \cdot 10^{-14}$  эрг;  $\gamma = 6 \cdot 10^{-13}$  эрг;  $\Theta = 450$  К;  $\Gamma = 500$  К;  $N = 7,4 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>;  $n = N/4$ ;  $B = 2 \cdot 10^{22}$  эрг/см<sup>3</sup>;  $s = 3/2$ .

Необходимые для расчетов значения параметров выбирались следующим образом. Величины обменных интегралов  $J_{12}^0$  и  $J_{11}^0$  подбирались так, чтобы получить  $T_N \approx 410$  К и  $H_c \approx 10$  Тл, а постоянные магнитоупругого взаимодействия и Грюнайзена ( $\gamma$  и  $\Gamma$ ) – так, чтобы получить объемную магнитострикцию  $\omega \approx 0,01$  и заданный темп теплового расширения. Остальные величины, так же как в [14], выбраны из имеющихся экспериментальных данных.

Из выражений (7) и (8) следует, что при  $P = 0$  зависимость объемной магнитострикции от магнитного поля имеет вид

$$\omega = [ns^2\sigma^2\gamma (2(H/H_c)^2 - 1) + 3kN (T/\Theta) \Gamma D(T/\Theta)]/B. \quad (11)$$

На рис. 2 приведен результат расчета объемной магнитострикции в зависимости от магнитного поля при температуре 350 К. При этом полученная по формуле (11) расчетная кривая смещена в положительном направлении оси ординат, так чтобы  $\omega = 0$  при  $H = 0$ ,  $T = 350$  К (т. е. на величину  $[-ns^2\sigma^2\gamma + 3kN(T/\Theta) \Gamma D(T/\Theta)] / 3B$ , взятую при значениях  $T = 350$  К,  $\sigma(T = 350 \text{ К}) = 0,673$ , соответствующих экспериментальной кривой). Как и на предыдущем рисунке, этим обеспечивается совпадение кривых в начале координат. Как следует из рис. 1 и 2, результаты наших расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными работы [8].

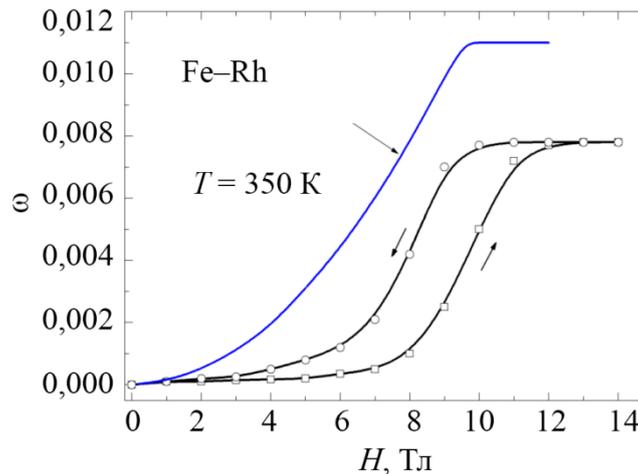


Рис. 2. Вынужденная объемная магнитострикция сплава Fe–Rh: синяя линия – расчет по формуле (11), черная – эксперимент [8]

Согласно формуле (9) обменный интеграл  $J_{12}$  и критическое магнитное поле при некоторой температуре могут обратиться в нуль. Это означает неустойчивость АФМ-состояния и фазовый переход. При  $H > H_c$  устойчивым является ферромагнитное состояние.

На рис. 3 приведена температурная зависимость критического магнитного поля, рассчитанного по формулам (6), (9). Температурная зависимость  $\sigma(T)$  в формуле (9) определена по формулам (2) при  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ . Результаты этого расчета также неплохо согласуются с экспериментальными данными из работы [8].

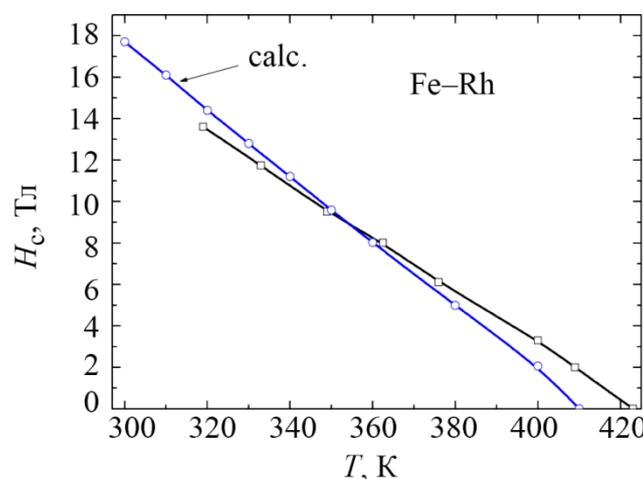


Рис. 3. Температурная зависимость критического магнитного поля: синяя линия – расчет, черная – эксперимент [8]

На рис. 4 мы привели также температурную зависимость обменного интеграла  $J_{12}$ , рассчитанную по формуле (9). Видно, что этот обменный интеграл изменяет знак в окрестности температуры Нееля  $T_N \approx 410$  К.

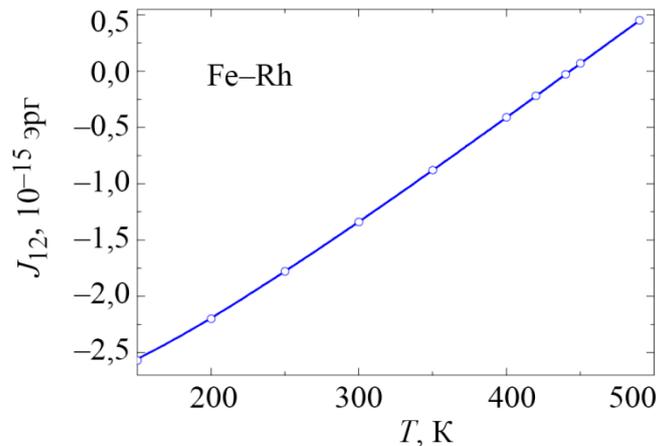


Рис. 4. Рассчитанная по формуле (9) зависимость обменного интеграла антиферромагнетика Fe–Rh от температуры

Таким образом, наше предположение (см. также [14]) об отрицательной самопроизвольной объемной магнитоэлектричности АФМ-фазы сплава Fe–Rh не только позволяет объяснить зависимости  $\Delta l/l$  и  $H_c$  от температуры и гигантскую магнитоэлектричность этого сплава, но и согласуется с гипотезой Ч. Киттеля [10] об инверсии знака обменного интеграла  $J_{12}$  в точке фазового перехода.

#### 4. Заключение

В настоящей работе получена формула для самопроизвольной объемной магнитоэлектричности двухподрешеточного антиферромагнетика (АФ), примененная затем для объяснения гигантской индуцированной объемной магнитоэлектричности в сплаве Fe–Rh, обнаруженной в работе [8]. Наш расчет позволяет удовлетворительно объяснить основные экспериментальные факты, приведенные в работе [8], а также предсказать неустойчивость АФМ-состояния в сплаве Fe–Rh, связанную с зависимостью обменного интеграла АФ от объемных деформаций. Этот факт подтверждает гипотезу Киттеля [10] об инверсии знака обменного интеграла при АФМ–ФМ переходе в сплаве Fe–Rh. Тем самым показано, что особенности поведения тепловых и магнитных характеристик двухподрешеточных магнетиков, отличающихся наличием высокой объемной магнитоэлектричности, могут быть успешно описаны в рамках подхода, базирующегося на модели Бина – Родбелла, дополненной учетом теплового расширения решетки через зависимость температуры Дебая от объема. При этом очевидно, что использованная нами модель носит несколько ограниченный и упрощенный характер и нуждается в дальнейшем развитии. Например, экспериментальные факты [8] указывают на существование ярко выраженного фазового перехода I рода в точке Нееля со значительным гистерезисом, в то время как у нас фазовый переход непрерывный. По нашему мнению, этот факт связан с тем, что в наших расчетах не учитываются возможная магнитокристаллическая анизотропия АФМ-фазы сплава Fe–Rh и роль подсистемы атомов родия в этой фазе. Можно надеяться, что развитый подход окажется полезным при исследовании новых магнитных систем.



## Благодарность

*Результаты исследования получены в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Поток», № 122021000031-8), выполнявшегося на базе уникальной научной установки «Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ».*

## Литература

1. Fallot M. Les alliages du fer avec les métaux de la famille du platine // *Annales de Physique*. – 1938. – Vol. 11 (10). – P. 291–332. – DOI: 10.1051/anphys/193811100291.
2. Fluctuating local moments, itinerant electrons, and the magnetocaloric effect: compositional hypersensitivity of FeRh / J. B. Staunton, R. Banerjee, M. Dos Santos Dias, A. Deak, L. Szunyogh // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 89. – P. 054427. – DOI: 10.1103/PhysRevB.89.054427.
3. Magnetic and magnetoelastic properties of a metamagnetic iron–rhodium alloy / A. I. Zakharov, A. M. Kadomtseva, R. Z. Levitin, E. G. Ponyatovskii // *Soviet Physics JETP*. – 1964. – Vol. 19 (6). – P. 1348–1353.
4. Hyperfine fields and magnetic moments in the Fe Rh system / G. Shirane, C. W. Chen, P. A. Flinn, R. Nathans // *Journal of Applied Physics*. – 1963. – Vol. 34. – P. 1044–104. – DOI: 10.1063/1.1729362.
5. Alloys of the Fe Rh system as a new class of working material for magnetic refrigerators / M. P. Annaorazov, K. A. Asatryan, G. Myalikgulyev, S. A. Nikitin, A. M. Tishin, A. L. Tyurin // *Cryogenics*. – 1992. – Vol. 32 (10). – P. 867–872. – DOI: 10.1016/0011-2275(92)90352-B.
6. Influence of structural defects on the magnetocaloric effect in the vicinity of the first order magnetic transition in Fe<sub>50.4</sub>Rh<sub>49.6</sub> / V. I. Zverev, A. M. Saletsky, R. R. Gimaev, A. M. Tishin, T. Miyanağa, J. B. Staunton // *Applied Physics Letters*. – 2016. – Vol. 108 (19). – P. 192405. – DOI: 10.1063/1.4949355.
7. Kouvel J. S., Hartelius C. C. Anomalous magnetic moments and transformations in the ordered alloy FeRh // *Journal of Applied Physics*. – 1962. – Vol. 33 (3). – P. 1343–1344. – DOI: 10.1063/1.1728721.
8. Ibarra M. R., Algarabel P. A. Giant volume magnetostriction in the FeRh alloy // *Physical Review B*. – 1994. – Vol. 50. – P. 4196–4199. – DOI: 10.1103/PhysRevB.50.4196.
9. Valiev E. Z., Bobrovskii V. I. On the search of new magnetic materials for cryogenics // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. – 2019. – Iss. 4. – P. 6–15. – DOI: 10.17804/2410-9908.2019.4.006-015. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2019-4/2019-4\\_261.html](http://dream-journal.org/issues/2019-4/2019-4_261.html)
10. Kittel C. Model of exchange-inversion magnetization // *Phys. Rev.* – 1960. – Vol. 120 (2). – P. 335–342. – DOI: 10.1103/PhysRev.120.335.
11. Gruner M. E., Hoffman T., Entel P. Instability of the rhodium magnetic moment as the origin of the metamagnetic phase transition in  $\alpha$ -FeRh // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67. – P. 064415. – DOI: 10.1103/PhysRevB.67.064415.
12. Sandratskii L. M., Mavropoulos P. Magnetic excitations and femtomagnetism of FeRh: a first-principles study // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 83. – P. 174408. – DOI: 10.1103/PhysRevB.83.174408.
13. Bean C. P., Rodbell D. S. Magnetic disorder as a first-order phase transformation // *Phys. Rev.* – 1962. – Vol. 126. – P. 104–115. – DOI: 10.1103/PhysRev.126.104.
14. Application of the exchange-striction model for the calculation of the FeRh alloys magnetic properties / E. Valiev, R. Gimaev, V. Zverev, K. Kamilov, A. Pyatakov, B. Kovalev, A. Tishin // *Intermetallics*. – 2019. – Vol. 108. – P. 81–86. – DOI: 10.1016/j.intermet.2019.02.015.
15. Valiev E. Z. Isotropic magnetoelastic interaction in two-sublattice ferri- and antiferromagnets: mean-field approximation for the Heisenberg model // *Physics of Metals and Metallography*. – 2003. – Vol. 96 (2). – P. 121–127.



16. Valiev E. Z., Kazantsev V. A. Magnetocaloric effect in  $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$  ferromagnets // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2011. – Vol. 113 (6). – P. 1000–1005. – DOI: 10.1134/S1063776111150118.
17. Valiev E. Z., Teplykh A. E. Magnetovolume effects and effect of pressure on the temperature dependence of sublattice magnetization in  $\text{H}_0(\text{Co}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2$  compounds // Crystallography Reports. – 2016. – Vol. 61 (1). – P. 89–93. – DOI: 10.1134/S1063774516010259.
18. Landau L. D., Lifshitz E. M. Statistical Physics : vol. 5. – Elsevier, 2013. – 544 p. – ISBN 9780080570464.
19. Ziman J. M. Principles of the Theory of Solids. – Cambridge : Cambridge University Press, 1972. – 425 p. – ISBN 0 521 29733 8.
20. Tyablikov S. V. Methods in the Quantum Theory of Magnetism. – New York : Springer, 1967. – 354 p. – ISBN 978-1-4899-7091-6.
21. Valiev E. Z. Entropy and magnetocaloric effect in ferromagnets and antiferromagnets // The Physics of Metals and Metallography. – 2007. – Vol. 104. – P. 8–12. – DOI: 10.1134/S0031918X07070022.