

# ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ СОЕДИНЕНИЯХ $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ ( $0 \leq x \leq 1$ ) МЕТОДОМ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Боков<sup>a,b\*</sup>, М. В. Магницкая<sup>a,c</sup>, Д. А. Саламатин<sup>a</sup>, А. В. Цвященко<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук  
108840, Москва, Россия

<sup>b</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобелъцына,  
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова  
119991, Москва, Россия

<sup>c</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 июня 2022 г.,  
после переработки 17 августа 2022 г.  
Принята к публикации 28 августа 2022 г.

Выполнены измерения магнитных сверхтонких полей  $H_{hf}$  и изомерного сдвига  $\delta$  в интерметаллических соединениях  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  (структурный тип  $MgCu_2$ ), синтезированных при высоком давлении. Значения  $H_{hf}$ , возникающие на ядрах  $^{57}Fe$  при концентрации никеля  $x$  ниже 20 ат.%, практически не изменяются и примерно равны 22 Тл, а в интервале от  $x = 0.4$  до  $x = 0.98$  линейно уменьшаются с увеличением концентрации Ni. Однако линейная экстрополяция сверхтонкого поля в зависимости от концентрации Ni не приводит к его исчезновению в  $YNi_2$ . Для  $YFe_2$  обнаружен поворот оси легкого намагничивания от направления [101] к направлению [111] при повышении температуры. При увеличении концентрации Ni до  $x = 0.3$  при температуре 5 К наблюдается ось легкого намагничивания [101], а при  $x = 0.4$  ось меняет направление на [100]. Из вида концентрационной зависимости сверхтонкого поля сделано предположение, что при кристаллизации  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  в условиях высоких давлений на ионах Ni существует магнитный момент. Выполнены *ab initio*-расчеты магнитных свойств и сверхтонких взаимодействий, согласующиеся с экспериментом.

DOI: 10.31857/S0044451023030069  
EDN: QECNYL

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что высокое давление уменьшает средний объем элементарной ячейки кристаллической структуры и может вызывать изменение электронной конфигурации некоторых элементов. В некоторых случаях это может приводить к образованию соединений между элементами, которые при нормальных условиях не образуются [1–4]. Например, в ранних работах [1–3] были синтезированы под давлением не известные до этого соединения щелоч-

ных и щелочноземельных элементов с магнитными *3d*-металлами. Только недавно соединение в системе K–Ni, полученное в работе [1] без расшифровки структуры, было идентифицировано как  $K_2Ni$  с помощью теоретических *ab initio*-расчетов [4].

Примерно в то же время были впервые синтезированы и изучены соединения кальция с Fe, Co и Ni [2, 3]. В частности, были выполнены детальные экспериментальные и теоретические исследования непрерывного ряда псевдобинарных соединений  $Ca(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  (структурный тип  $MgCu_2$ ). В настоящей работе рассмотрен аналогичный этой системе ряд  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  и изучены его свойства. Методом эффекта Мессбауэра на ядрах  $^{57}Fe$  исследованы сверхтонкие взаимодействия. Магнитные свойства и сверхтонкие взаимодействия рассчитаны также ме-

\* E-mail: bokov@hppi.troitsk.ru

тодом *ab initio*.

Топологически плотноупакованные фазы Лавеса довольно распространены среди интерметаллических соединений. Материалы на их основе используются как контейнеры для хранения водорода, как магнитомеханические датчики и приводы, а также в качестве износостойких и коррозионно-стойких покрытий в агрессивных средах и при высоких температурах [5]. Исследования этих систем, содержащих металлы группы железа, представляют интерес также для физики Земли и сходных с ней планет.

В данной работе для соединений  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ , синтезированных при высоком давлении, методом мессбауэровской спектроскопии исследована эволюция сверхтонких магнитных полей в узлах  $3d$ -металлов при замещении железа (электронная конфигурация  $[Ar]3d^64s^2$ ) никелем (электронная конфигурация  $[Ar]3d^84s^2$ ). Мессбауэровские спектры  $^{57}Fe$  позволяют определить изомерные сдвиги, сверхтонкие поля и направление оси легкого намагничивания в поликристалле.

Кубическая фаза Лавеса (C15, тип  $MgCu_2$ ) соединения  $YFe_2$  представляет собой ферримагнетик с магнитными моментами на атомах Fe, равными  $1.77\mu_B$ , и антипараллельными им моментами на  $4d$ -атомах Y, равными  $-0.67\mu_B$  [6, 7]. Соединение  $YNi_2$ , которое образуется при нормальном давлении, кристаллизуется в сверхструктуру кубической фазы Лавеса C15 [8]. В этом соединении возникают вакансии в узлах Y (до 5–7 ат.%), упорядоченные при низких температурах. При комнатной температуре эти вакансии обладают высокой подвижностью [9]. Показано, что при высоких температурах и/или при приложении внешнего давления происходит обратимый структурный переход (типа порядок–беспорядок) в кубическую фазу Лавеса C15, связанный с разупорядочением вакансий [10]. Соединение  $YNi_2$  в сверхструктуре кубической фазы Лавеса является паулевским парамагнетиком, что связано с низкой плотностью электронных состояний на уровне Ферми для этого соединения [11].

В работе [12] было показано, что соединения  $Y_{0.95}(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ , где  $x \leq 0.95$ , синтезированные при нормальном давлении, кристаллизуются в кубической фазе Лавеса C15. Из температурных измерений электрического сопротивления было высказано предположение, что в соединении с  $x = 0.95$  существует локальный магнетизм, связанный с короткодействующими спиновыми флуктуациями или образованием основного состояния кластерного стекла. Для соединений с  $x = 0.85$  и  $x = 0.75$ , вероятно, имеет место дальнейшее магнитное упорядочение.

Соединения  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  для  $x$  от 0 до 1, синтезированные при высоких давлениях и температурах, по данным рентгеноструктурного анализа и намагничивания кристаллизуются в кубическую фазу Лавеса со структурой C15. Магнитный момент ионов Ni составляет  $0.36\mu_B$  для всех значений  $x$  [13]. При  $x = 0.35$  наблюдается аномалия зависимости постоянной решетки от состава  $x$ . Установлено также [13], что в  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  зависимость магнитного момента, приходящегося на один атом переходного металла, от числа  $3d$ -электронов  $N_d$  имеет характер кривой Слэтера–Полинга, аналогично системе  $Fe_{1-x}Ni_x$ .

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Псевдобинарные интерметаллиды  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  были получены путем воздействия высокой температуры при постоянном давлении 7.7 ГПа в камере, сконструированной Хвостанцевым и др. [14]. Детали процедуры, использованной в этих экспериментах, приведены в работе [15]. После синтеза под высоким давлением кристаллическая структура образцов соединений была определена с помощью порошковой рентгеновской дифракции. Поликристаллические образцы были однофазными и кристаллизовались в структуре кубической фазы Лавеса (C15).

Измерения эффекта Мессбауэра  $\gamma$ -перехода 14.4 кэВ  $^{57}Fe$  проводились для серии соединений  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  с

$$x = 0; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.6; 0.7; 0.8; 0.9; 0.95; 0.98$$

при  $T = 5$  К. Образцы с 2, 5 и 10 ат.% Fe обогащались изотопом  $^{57}Fe$  до 100 %, а образцы с 20, 30 и 40 ат.% Fe обогащались  $^{57}Fe$  до 20 %.

Спектры получены с помощью спектрометра с постоянным ускорением, описанного в работе [16]. В качестве источника  $\gamma$ -квантов использовали  $^{57}Co$  в медной матрице. Отметим, что все мессбауэровские спектры измерялись при атмосферном давлении.

Программа, использующая точное аналитическое выражение для положений и интенсивностей мессбауэровских линий, была применена для определения параметров сверхтонкой структуры. Для каждого спектра, полученного от поглотителя  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), была сделана компьютерная подгонка с использованием метода статистической регуляризации [17]. Среднее значе-

ние сверхтонкого поля определялось из следующего соотношения:

$$\bar{H}_{hf} = \frac{\sum_{i=0}^{20} H_i P_i}{\sum_{i=0}^{20} P_i},$$

где  $P_i$  — вероятность существования локального сверхтонкого поля  $H_i$  на диаграмме распределения  $P_i(H_i)$ .

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для соединений  $RFe_2$  ( $R$  — редкоземельный элемент) месбауэровские исследования  $^{57}\text{Fe}$  показали, что хотя эти соединения имеют одинаковую кристаллографическую структуру типа  $C15$ , они представляют несколько типов спектров [18]. В этих соединениях ионы железа, лежащие в общей сетке правильных тетраэдров с общими углами, имеют узловую симметрию  $\bar{3}m$  с тремя осями, параллельными направлениям  $[111]$ . Позиции ионов железа ( $16c$ ) кристаллографически эквивалентны, но в присутствии магнитного поля они магнитно-неэквивалентны, поскольку электрические квадрупольные взаимодействия зависят от угла  $\theta$  между осью аксиально-симметричного градиента электрического поля и магнитным полем, которое не будет одинаковым для всех ионов железа [19]. Если вектор легкого намагничивания  $\mathbf{n}$  совпадает с кристаллографическим направлением  $[111]$ , то существуют два магнитно-неэквивалентных узла железа с относительной заселенностью 3 : 1, что приводит к спектру, который представляет собой суперпозицию двух шестилинейных структур, как это наблюдается для  $YFe_2$ , синтезированного при нормальном давлении в диапазоне температур от 1.7 К до  $T_C$  (545 К) [18]. При  $\mathbf{n}$ , параллельном оси  $[101]$ , присутствуют две магнитно-неэквивалентные позиции железа с соотношением заселенностей 1 : 1, как это наблюдается в  $LuFe_2$  и в  $SmFe_2$  [20]. При направлении вектора легкого намагничивания  $\mathbf{n}$  вдоль оси  $[100]$  все ионы железа эквивалентны и спектр описывается одной шестилинейной структурой.

Спектр синтезированного под высоким давлением  $YFe_2$ , измеренный при  $T = 5$  К, состоит из двух сверхтонких «шестилинеек» с соотношением интенсивностей 1 : 1 (рис. 1 и таблица). Это согласуется с направлением оси легкого намагничивания вдоль одного из направлений  $[101]$ . Однако установлено, что при  $T = 300$  К ось легкого намагничивания направлена вдоль  $[111]$ , как это наблюдалось в об-

разце  $YFe_2$ , приготовленном при нормальном давлении [18] (см. рис. 1 и таблицу).

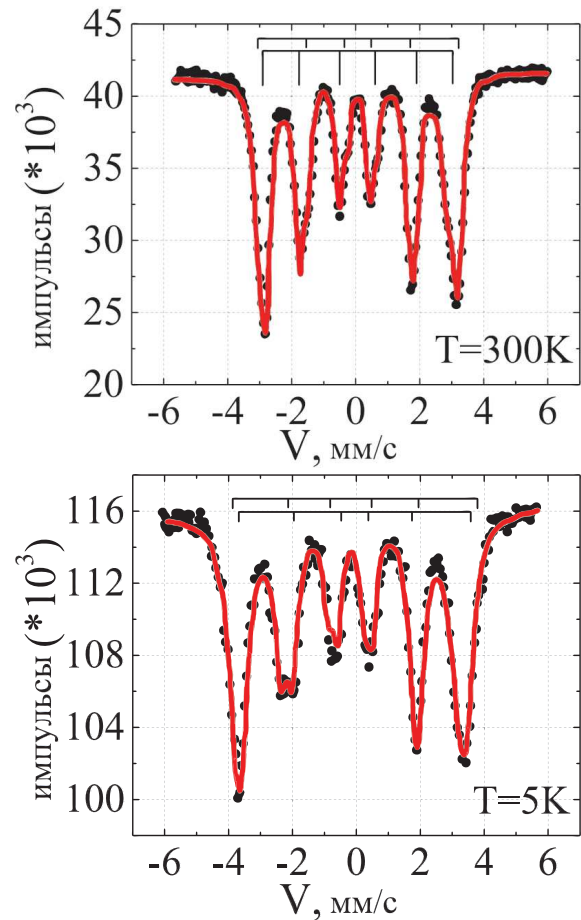
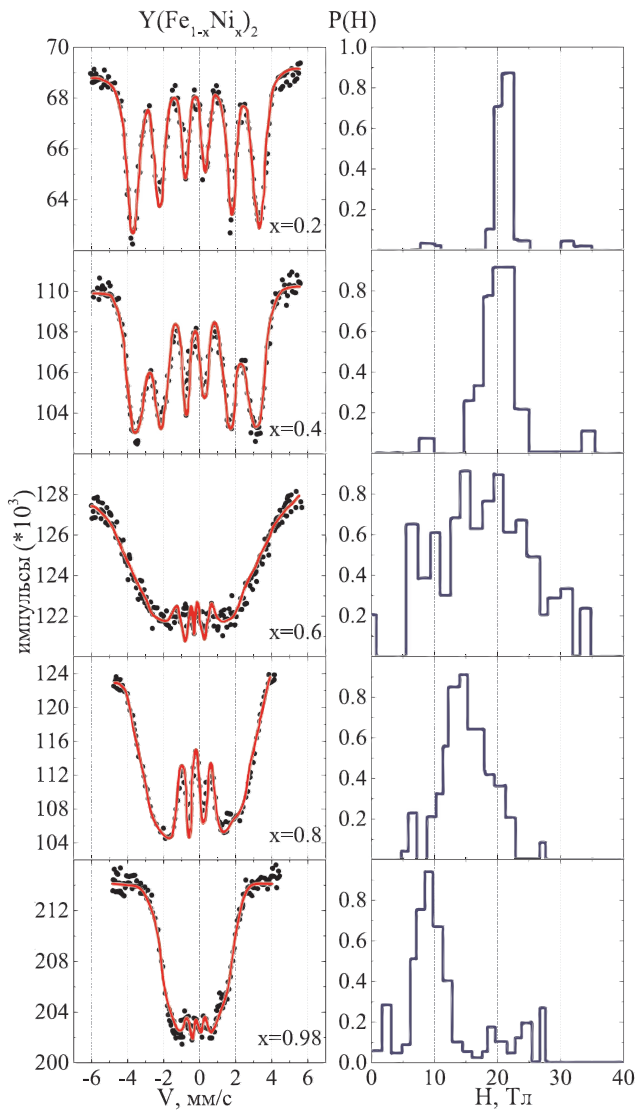


Рис. 1. Месбауэровские спектры  $^{57}\text{Fe}$  синтезированного под высоким давлением  $YFe_2$  при различных температурах. Точки — экспериментальные данные, сплошные линии — аппроксимации. Метки над спектрами означают вклады от сверхтонкого магнитного расщепления

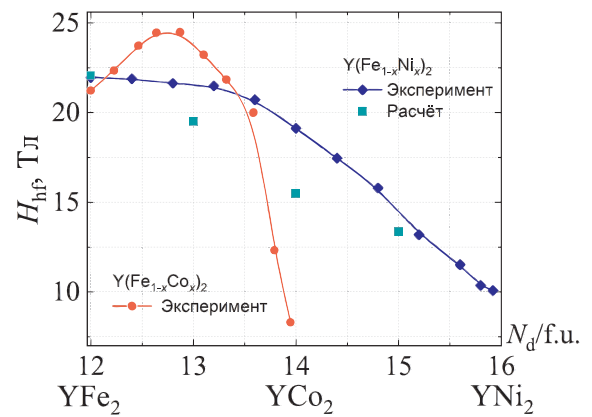
Для образцов  $Y(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$  с концентрацией Ni в области  $0 \leq x \leq 0.3$  ось легкого намагничивания параллельна оси  $[101]$ , а для  $x = 0.4$  ось легкого намагничивания параллельна оси  $[100]$  при  $T = 5$  К. Однако при  $0.2 \leq x \leq 0.4$  видно уширение линий на месбауэровских спектрах, а при  $x = 0.4$  ширина линий сильно увеличивается. Уширение может быть связано с различными вариациями локального окружения ядер  $^{57}\text{Fe}$ . Поэтому для  $0 \leq x \leq 0.98$  средние значения сверхтонкого поля определялись из компьютерных подгонок с использованием метода статистической регуляризации, который был предложен для оценки неразрешенных месбауэровских спектров многих перекрывающихся линий [17] (рис. 2).

**Таблица.** Параметры сверхтонкого взаимодействия  $^{57}\text{Fe}$  в соединении  $\text{YFe}_2$ , синтезированном при различных давлениях ( $P_{\text{synth}}$ ).  $H_{hf}$  — сверхтонкое магнитное поле (погрешность  $\pm 0.1$  Тл),  $\Delta E$  — квадрупольное расщепление (погрешность  $\pm 0.01$  мм/с),  $\delta$  — изомерный сдвиг относительно  $\alpha\text{-Fe}$  (погрешность  $\pm 0.01$  мм/с)

$P_{\text{synth}}$ , ГПа	$T$ , К	Спектр I			Спектр II			Легкая ось
		$H_{hf}$ , Тл	$\Delta E$ , мм/с	$\delta$ , мм/с	$H_{hf}$ , Тл	$\Delta E$ , мм/с	$\delta$ , мм/с	
7.7	5	22.5	0.14	0.43	21.3	-0.17	0.34	101
7.7	300	18.7	0.19	0.13	18.2	-0.28	0.13	111
$\approx 0$	1.7 [18]	21.5	—	—	20.8	—	—	111
$\approx 0$	295 [21]	19.2	0.04	-0.18	18.5	-0.12	-0.03	111
$\approx 0$	300 [22]	18.0	—	—	18.9	—	—	111



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Мессбауэровские спектры  $^{57}\text{Fe}$  некоторых соединений  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ , измеренные при  $T = 5$  К. Точки — экспериментальные данные. Сплошные красные линии и диаграмма распределений вероятностей сверхтонких полей  $P(H)$  получены подгонкой



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Среднее сверхтонкое поле на ядре Fe для  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$  при 5 К (синяя линия — наши измерения) и для  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$  при 1.7 К (красная линия — работа [6]) как функция числа  $3d$ -электронов  $N_d$  на формульную единицу. Результаты наших расчетов показаны голубыми символами

На рис. 3 средние значения сверхтонкого поля  $\overline{H}_{hf}$  при  $T = 5$  К представлены в зависимости от концентрации Ni. Значения  $\overline{H}_{hf}$  при концентрации Ni менее 20 ат.% почти не изменились. От  $x = 0.4$  до  $x = 0.98$  наблюдается линейное уменьшение  $\overline{H}_{hf}$ . Заметим, что в системе  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$  резкое уменьшение  $\overline{H}_{hf}$  было обнаружено уже при  $x \geq 0.8$  (см. рис. 3) и тесно связано с исчезновением магнитного момента на атомах Co в этом ряду [18]. С другой стороны, установлено, что зависимость средней величины сверхтонкого поля на ядре железа в ряду  $\text{R}(\text{Fe}_{0.02}\text{Ni}_{0.98})_2$  (где R = Gd, Dy, Ho, Tb, Er) определяется из выражения

$$\overline{H}_{hf} = H_0 + a(g - 1)J,$$

где  $H_0$  — постоянное сверхтонкое поле, связанное с железом, зависящее исключительно от взаимодействий Fe-Fe и Fe-Ni и равное 11(1) Тл [23]. Из наших экспериментов также следует, что для  $\text{Y}(\text{Fe}_{0.02}\text{Ni}_{0.98})_2$  среднее значение сверхтонкого поля,

измеренное при 5 К, равно 10.9 Тл. Это указывает на то, что магнитное сверхтонкое поле определяется магнитным моментом Ni.

В отличие от усиленного парамагнетика Паули  $YCo_2$ , сплав  $YFeNi$ , в котором, вероятно, должно быть такое же заполнение  $3d$ -зоны, как и в  $YCo_2$ , является ферромагнетиком [13] и имеет значение сверхтонкого поля, близкое к значению сверхтонкого поля в  $HoCo_2$ , когда поляризующее влияние Ho приводит к возникновению момента на атомах Co, равного  $1.0\mu_B$  [24, 25].

Таким образом, при воздействии, например, внешнего или внутреннего магнитного поля или давления (как в нашем случае) в  $3d$ -электронной зоне сплавов  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ , вероятно,  $3d$ -электроны Ni могут принимать участие в метамагнетизме коллективизированных электронов так же, как  $3d$ -электрон Co в сплавах  $Y(Fe_{1-x}Co_x)_2$  [26–28].

Из изучения сверхтонкого поля на ядре Fe в ряду сплавов  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  можно сделать вывод, что индуцированный высоким давлением электронный переход приводит к возникновению собственного магнитного момента на ионах Ni, который ответственен за большие значения сверхтонкого поля для всех значений  $x$ . При этом нужно понимать, что непрерывный ряд соединений  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  при атмосферном давлении не образуется. А получение соединений при высоком давлении в метастабильной форме связано с изменением электронных свойств Ni [29].

#### 4. РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ AB INITIO

Расчеты электронных и магнитных свойств  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  проводились в рамках теории функционала электронной плотности методом присоединенных плоских волн (APW+lo), реализованным в пакете WIEN2k [30], с полулокальным приближением PBE-GGA [31] для обменно-корреляционного функционала. Использовался параметр  $R_{min}K_{max} = 8.0$  и сетки  $k$ -точек Монкхорста – Пака, соответствующие разрешению в обратном пространстве около  $0.15 \text{ \AA}^{-1}$ . Для Y и Fe/Ni были выбраны МТ-радиусы, равные 2.50 и 2.38 радиуса Бора соответственно.

Были выполнены расчеты для концентраций  $x$ , равных 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.00. Электронная структура псевдобинарных сплавов ( $x = 0.25, 0.50, 0.75$ ) рассчитывалась как структура гипотетических упорядоченных тройных соединений с той же стехиометрией. Для каждой концентрации  $x$  использовалась экспериментальная постоянная решетки а.

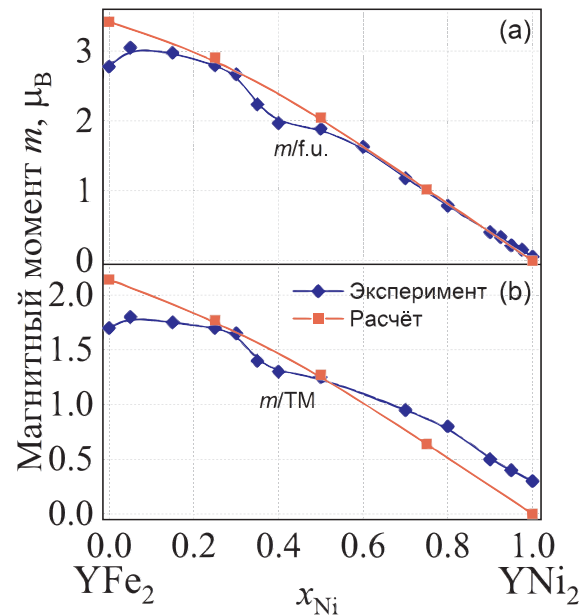


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости магнитного момента в  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$  от концентрации никеля  $x$ : в расчете на формульную единицу (a) и на атом переходного металла (b). Результаты измерений [13] при 4.2 К и нашего *ab initio*-моделирования показаны синим и красным цветом соответственно

Вообще говоря, замещение Fe на Ni понижает симметрию решетки, и в результате структура тройных соединений становится не кубической, а тетрагональной. Это тетрагональное искажение довольно слабое, и структура с пониженной симметрией очень близка к исходной решетке C15. Поэтому порошковые рентгенограммы соответствующих сплавов показывают лишь небольшое уширение рефлексов C15, вызванное легированием. Однако сверхтонкое взаимодействие является локальным свойством, и его вычисленные значения очень чувствительны даже к небольшим изменениям симметрии и координат атомов. В искаженной решетке координаты атомов становятся свободными, а не строго фиксированными, как в кубической структуре C15. Поэтому для составов с  $x = 0.25, 0.50, 0.75$  была выполнена релаксация положений атомов; при этом остаточные атомные силы не превышали  $5 \text{ мэВ/\AA}$ .

Спин-поляризованные расчеты проводились для коллинеарного расположения спинов. На рис. 4 представлена рассчитанная концентрационная зависимость магнитного момента в  $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ , приходящегося на формульную единицу и на один атом переходного металла (TM). Вычисленный момент внутри сферы, окружающей атом Fe, слабо зависит от концентрации  $x$ . Момент в сфере Ni параллелен моменту Fe и для состава  $Y(Fe_{1.5}Ni_{0.5})_2$

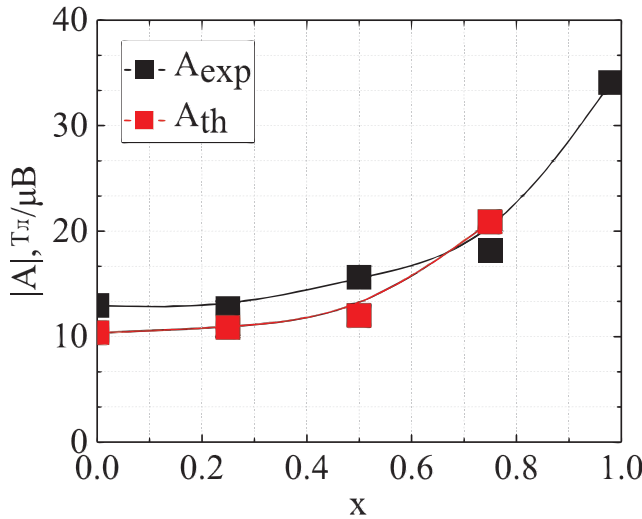


Рис. 5. Константы спаривания:  $A_{\text{exp}}$  — экспериментальные результаты,  $A_{\text{th}}$  — теоретические расчеты

равен  $0.36\mu_B$ , что совпадает с экспериментальным значением, найденным в работе [13]. Предполагалось [13], что момент Ni, равный  $0.36\mu_B$ , не меняется с увеличением  $x$ . Однако наш расчет показывает, что при увеличении  $x$  от 0.25 до 0.75 момент на Ni монотонно уменьшается до  $0.13\mu_B$ .

Магнитный момент в сфере Y антипараллелен моментам Fe/Ni, что подтверждает предположение [13] о ферримагнитном упорядочении в  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ . Вычисленный момент на Y изменяется монотонно примерно от  $-0.3\mu_B$  для  $\text{YFe}_2$  до  $-0.1\mu_B$  для  $\text{Y}(\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{1.5})_2$ , что отличается от значения  $-0.67\mu_B$ , принятого в работе [13] для всех концентраций  $x$ . Следует также отметить, что геометрия метода APW предполагает наличие магнитного момента в междоузлии, который вносит существенный вклад (в данном случае отрицательный) в полный момент элементарной ячейки. Магнитное состояние для  $\text{YNi}_2$  оказалось неустойчивым, т. е. момент равен нулю, в отличие от результатов работы [13], где был найден момент на Ni порядка  $0.3\mu_B$ .

На рис. 3 показано сверхтонкое поле  $H_{hf}$  на ядре Fe в зависимости от числа  $d$ -электронов  $N_d$  на формульную единицу, которое является линейной функцией концентрации  $x$ . Это позволяет представить  $H_{hf}$  для  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$  и  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$  на одном графике. Вычисленный изомерный сдвиг  $\delta$  на ядре Fe (относительно ОЦК  $\alpha$ -Fe) практически не зависит от концентрации и изменяется от 0.22 до 0.23 мм/с.

Для  $\text{YFe}_2$  рассчитанные значения сверхтонкого поля  $H_{hf}$  и изомерного сдвига  $\delta$  согласуются с экспериментальными значениями для образцов, синтезированных при высоком давлении. Зависимость

$H_{hf}(x)$  также удовлетворительно согласуется с экспериментом (см. рис. 3). Что касается квадрупольного расщепления  $\Delta E$ , то теоретическое значение составляет около  $-1.0$  мм/с для всех концентраций, что значительно превышает экспериментальные значения.

Константы спаривания между сверхтонкими полями и магнитными моментами ( $A = H_{hf}/\mu_{TM}$ ) также рассчитаны в зависимости от концентрации  $x$  для полученных экспериментальных результатов и теоретических расчетов (рис. 5). На рисунке показано нелинейное увеличение значения  $A$  с увеличением концентрации Ni.

## 5. ВЫВОДЫ

Методом эффекта Мессбауэра на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  измерены сверхтонкие взаимодействия в соединении  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$  ( $0 \leq x \leq 0.98$ ). Установлено, что экстрополюция концентрационной зависимости среднего сверхтонкого поля  $\overline{H}_{hf}$  не стремится к нулю при  $x \rightarrow 1$ . Это свидетельствует о наличии магнитного момента у ионов Ni в ряду соединений  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ , синтезированных при высоком давлении. Для  $\text{YFe}_2$ , синтезированного при высоком давлении, обнаружен поворот легкой оси намагничивания от направления [101] к направлению [111] с повышением температуры. При увеличении концентрации Ni до  $x = 0.3$  (при температуре 5 К) наблюдается ось легкого намагничивания [101], а при  $x = 0.4$  ось меняет направление на [100]. *Ab initio*-расчеты сверхтонких взаимодействий находятся в разумном согласии с экспериментом. Таким образом, образование непрерывного ряда соединений  $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$  связано с возникновением при высоком давлении электронного перехода из конфигурации  $3d^9 4s^1$  в конфигурацию  $3d^{9-y} 4s^{1+y}$  в ионах Ni, где  $y$  может изменяться с концентрацией Ni.

**Благодарности.** Авторы признательны В. И. Крылову за помощь в проведении эксперимента. Численные расчеты проводились с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>) и вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСП РАН).

**Финансирование.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00806 (<https://rscf.ru/project/22-22-00806/>).

## ЛИТЕРАТУРА

1. L. J. Parker, T. Atou, and J. V. Badding, *Science* **273**, 95 (1996).
2. А. В. Цвященко, Л. Н. Фомичева, М. В. Магницкая и др., *Письма в ЖЭТФ* **68**, 864 (1998).
3. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, M. V. Magnitskaya et al., *The Physics of Metals and Metallography* **93**, S59 (2002).
4. A. A. Adeleke and Y. Yao, *J. Chem. Phys.* **124**, 4752 (2020).
5. F. Stein and A. Leineweber, *J. Mater. Sci.* **56**, 5321 (2021).
6. C. Ritter, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2765 (1989).
7. A. Posinger, M. Reissner, W. Steiner et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 7277 (1993).
8. V. Paul-Boncour, A. Lindbaum, M. Latroche et al., *Intermetallics* **14**, 483 (2006).
9. M. Forker, P. de la Presa, and A. F. Pasquevich, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 253 (2005).
10. E. Gratz and A. S. Markosyan, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, R385 (2001).
11. F. Z. Mohammad, S. Yehia, and S. Aly, *Int. J. Phys. and Appl.* **2**, 135 (2010).
12. O. Myakush, V. Babizhetskyy, P. Myronenko et al., *Chem. Met. Alloys* **4**, 152 (2011).
13. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, and S. D. Antipov, *J. Magn. Magn. Mater.* **98**, 285 (1991).
14. L. G. Khvostantsev, V. N. Slesarev, and V. V. Brazhkin, *High Press. Res.* **24**, 371 (2004).
15. A. V. Tsvyashchenko, *J. Less Comm. Met.* **99**, L9 (1984).
16. С. И. Рейман, Н. И. Рохлов, В. С. Шпинель и др., *ЖЭТФ* **86**, 330 (1984).
17. А. С. Меченов, *Регуляризованный метод наименьших квадратов*, Изд-во Моск. ун-та, Москва (1988).
18. M. G. Luijpen, P. C. M. Gubbens, A. M. van der Kraan et al., *Physica B+C* **86–88**, 141 (1977).
19. G. J. Bowden, D. St. P. Bunbury, A. P. Guimaraes et al., *J. Phys. C* **1**, 1376 (1968).
20. K. H. J. Buschow, *Rep. Progr. Phys.* **40**, 1179 (1977).
21. K. Itoh, K. Kanematsu, and K.-I. Kobayashi, *J. Phys. Soc. Jpn* **58**, 4650 (1989).
22. M. J. Besnus, P. Bauer, and J. M. Genin, *J. Phys. F* **8**, 191 (1978).
23. S. K. Arif, I. Sigalas, and D. S. T. P. Bunbury, *Phys. Stat. Sol. (a)* **41**, 585 (1977).
24. A. M. van der Kraan and P. C. M. Gubbens, *J. Phys. Colloques* **35**, C6-469 (1974).
25. R. M. Moon, W. C. Koehler, and J. Farrell, *J. Appl. Phys.* **36**, 978 (1965).
26. O. Eriksson, B. Johansson, M. S. S. Brooks et al., *Phys. Rev. B* **40**, 9519 (1989).
27. K. Yoshimura, Y. Yoshimoto, M. Mekata et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **70**, 147 (1987).
28. T. Goto, K. Fukamichi, T. Sakakibara et al., *Sol. St. Comm.* **72**, 945 (1989).
29. A. V. Tsvyashchenko, L. N. Fomicheva, E. N. Shirani et al., *Phys. Rev. B* **55**, 6377 (1997).
30. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran et al., *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
31. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).