

©1995

МАГНЕТИКИ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ И ЧЕТЫРЕХСПИНОВЫМ ОБМЕНОМ

С.С.Аплеснин

Институт физики им.Л.В.Киренского СО РАН, Красноярск
(Поступила в Редакцию 15 июня 1994 г.)

Методом Монте-Карло вычислены фурье-спектр спиновых корреляционных функций, магнитная восприимчивость легкоплоскостного антиферромагнетика в зависимости от анизотропии обмена, величины фрустрированной связи и четырехспинового обмена. Найдено соотношение для определения константы четырехспинового обмена из восприимчивости, критическая величина фрустрированной связи, при которой меняется тип ближнего порядка.

Магнетики, имеющие правильную кристаллическую решетку и конкурирующие взаимодействия, являются фрустрированными и вырожденными системами [1]. Фрустрация изменяет корреляционный радиус и соответственно поведение термодинамических характеристик. С помощью численного моделирования можно установить характерные особенности поведения термодинамических характеристик, изменение ближнего порядка, вызванное конкуренцией обмена.

Магнетики с тетрагональной симметрией имеют вырождение в базисной плоскости, которое снимается четырехспиновым взаимодействием, как в Vi_2CuO_4 [2]. Многочастичный обмен также изменяет термодинамические характеристики и магнитный порядок. Используя численное моделирование, можно определить величину четырехспинового взаимодействия из восприимчивости, вычислить фурье-спектр ближнего порядка на всем температурном интервале в рамках одного метода в зависимости от анизотропии обмена, фрустрированного и четырехспинового взаимодействия.

1. Модель

Рассмотрим классическую модель Гейзенберга с анизотропным распределением обменных взаимодействий на трехмерной решетке, имеющей тетрагональную симметрию (рис.1). Гамильтониан легкоплоскостного антиферромагнетика (AFM) с анизотропным билинейным и четырехспиновым обменом имеет вид

$$H = - \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^4 J_n^{\alpha\alpha} (i-j) \sum_{i<j}^{(n)} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} - \sum K_{ijkl} (\bar{S}_i \bar{S}_j) (S_k S_l) - \sum_{\alpha} \sum_j^3 h_j^{\alpha} S_j^{\alpha},$$

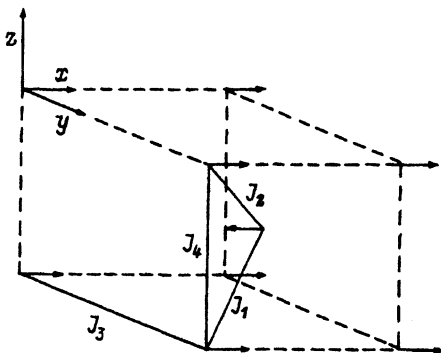


Рис. 1. Магнитная структура AFM. Сплошными линиями обозначены обменные параметры J_i .

где $J_{1,2} < 0$, $J_{1,2}^{zz} < J_{1,2}^{x,y}$, $J_{3,4}$ — произвольные изотропные параметры, $K > 0$ — константа четырехспинового обмена по всем ближайшим прямым и скошенным плакетам, h — внешнее магнитное поле, n — суммирование по z_n соседям, изображенным на рис. 1, S — классический нормированный спин ($\alpha = x, y, z$).

В вычислениях использован метод Монте-Карло [3] с периодическими и зеркальными граничными условиями на решетке размером $N = 3456$ и 11664. Магнитная структура и ближний порядок определялись из спин-спиновой корреляционной функции $\langle S^\alpha(0)S^\alpha(\tau) \rangle$ и ее фурье-преобразования, вычисленного по ребрам и диагонали куба [111], параметра Эдвардса-Андерсона. Все используемые величины: температура $T = T/(k_B J_1 S^2)$, энергия E , восприимчивость $\chi^\alpha = m^\alpha/h^\alpha$, намагниченность m^x — даны в безразмерных единицах, все обмены нормированы на J_1^x .

2. Обсуждение результатов

Рассмотрим случай, когда многочастичный обмен отсутствует, $K = 0$. Спины лежат в плоскости перпендикулярно направлению внешнего поля ($h^y > 0$). Спин-спиновая корреляционная функция по z, y -компонентам спина положительна по ребрам куба и экспоненциально убывает с расстоянием. Ее значения фурье-спектра для $q = 0$ и $q = \pi$ отличаются на порядок (рис. 2,а). С увеличением анизотропии обмена $\Delta J = |J^{x,y} - J^z|$, т.е. соответственно с уменьшением связи $J_{1,2}^{zz}$, магнитная система становится более слоистой и квазидвумерной по S^z -компоненте спина. В магнетике образуются солитоны, которые приводят к выравниванию фурье-преобразования $R(q) = \langle S_q^z S_{-q}^z \rangle$ по волновому вектору q , когда значения $R(q = 0)$ и $R(q = \pi)$ отличаются на 30–50% (рис. 2,а) в плоскости xy , и независимости $R(q)$ от q по [001] при $T > J_2^{zz}$. Зависимость $\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle$ имеет вид белого шума, например, для $J_2^{zz} = -0.07$ и $T = 0.2$ (рис. 2,б). Наличие фрустрированной связи во второй координационной сфере $J_{3,4} < 0$ приводит к AFM границам изинговского типа по S^z и слабой зависимости $R(q)$ от q . Когда значение $J_{3,4}$ превышает критическую величину $(J_1^z + J_2^z)/2$, происходит смена ближнего порядка с FM на AFM во второй координационной сфере по S^z (рис. 2,с).

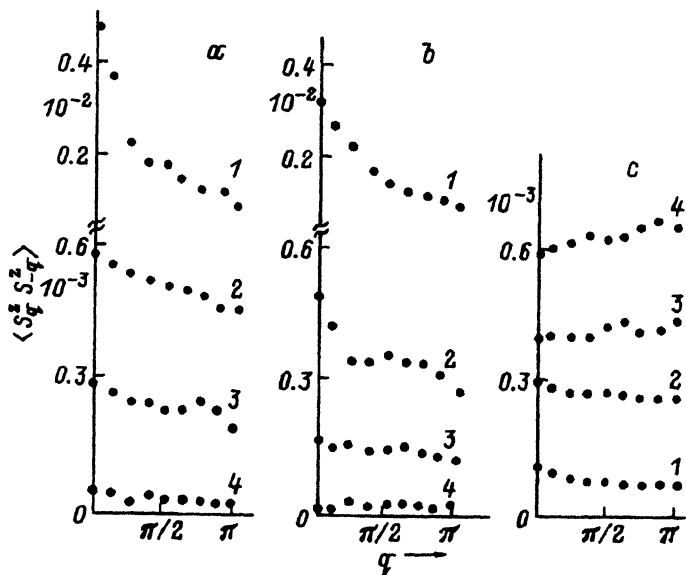


Рис. 2. Фурье-спектр спин-спиновой корреляционной функции $\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle$ АФМ с анизотропией обмена $\Delta J = |J^x - J^z| = 0.01$ (1), 0.2 (2), 0.4 (3), 0.8 (4) по [010] (а) и [001] (b); АФМ с $\Delta J = 0.5$ по [010] и фрустрированными обменами $|J_3| = 0.15$ (1), 0.25 (2), 0.3 (3), 0.35 (4) при $T/k_B J_1 = 0.2$ (с).

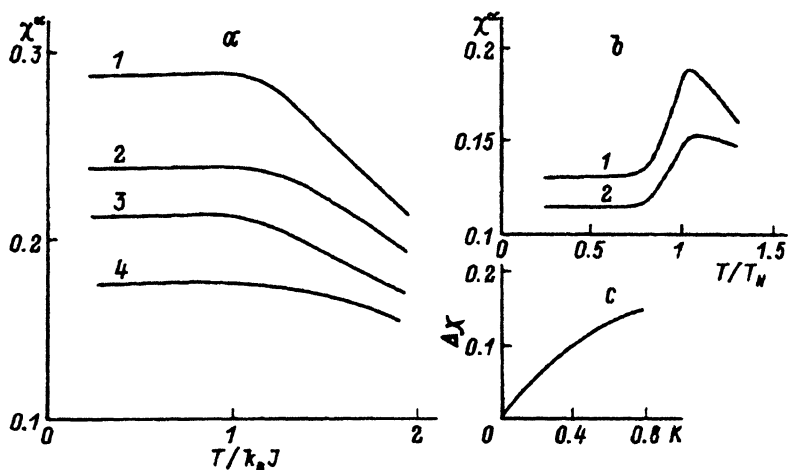


Рис. 3. а) Зависимость продольной χ^x (1,3) и поперечной χ^y (2,4) восприимчивости АФМ с одинаковыми энергиями в поле $h = 0.1$, $J_1^{x,y} = -0.75$, $J_1^z = -0.56$, $J_2^{x,y} = -0.25$, $J_2^z = -0.17$, $J_{3,4} = 0$ (1,2) и с фрустрированными обменами $J_1^y = -1$, $J_1^z = -0.75$, $J_2^{x,y} = -0.35$, $J_2^z = -0.26$, $J_3 = -0.3$, $J_4 = -0.1$ (3,4) от температуры; б) зависимости χ^x (1) и $\chi^{x,y}$ (2) АФМ с четырехспиновым обменом $K = 0.2$, $\Delta J = 0.25$ от нормированной температуры; в) зависимость $\Delta \chi^x = \chi^x(T/T_N = 0.2) - \chi^x(T_N)$ от величины четырехспинового обмена.

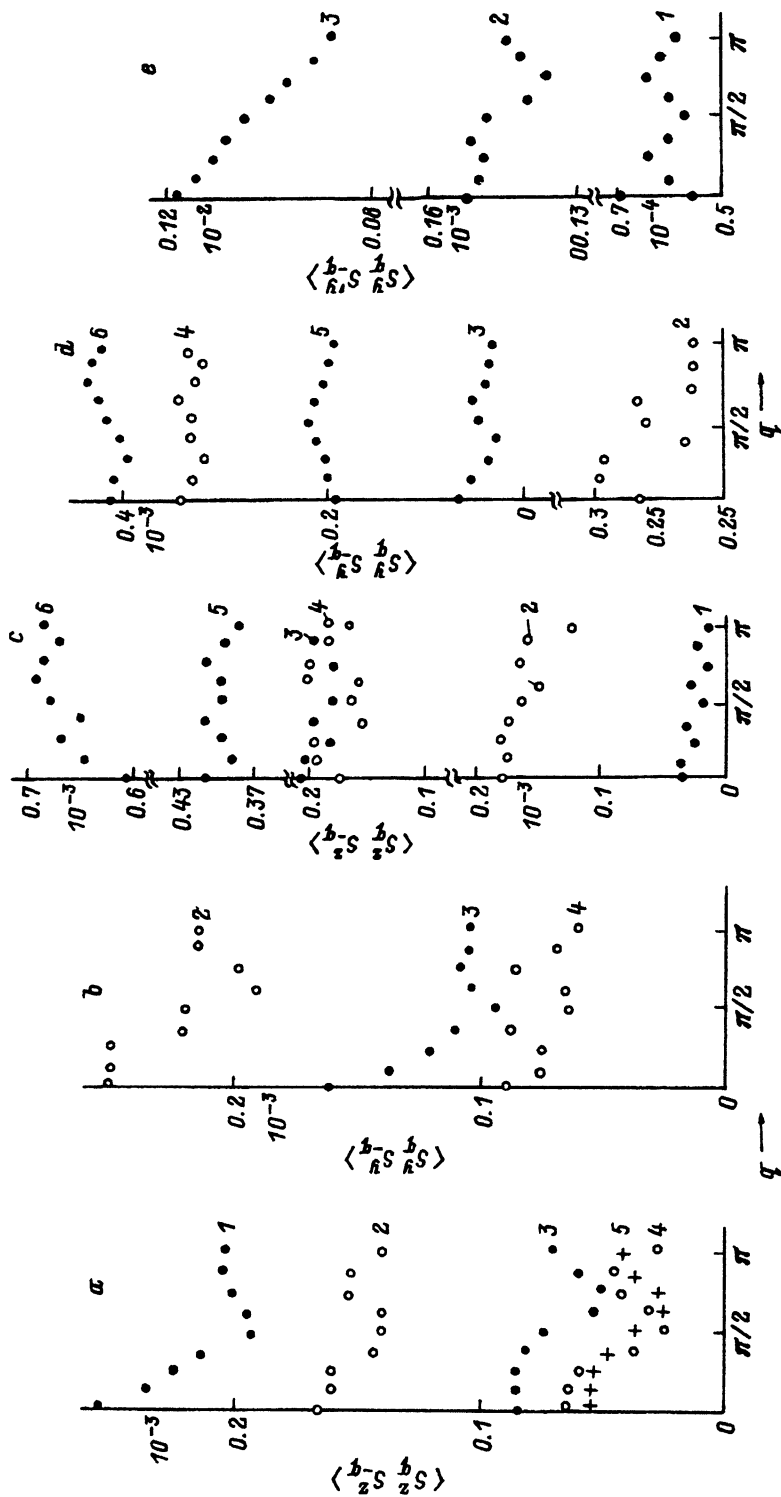


Рис. 4. Фурье-спектр $\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha} S_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle$ анизотропного АФМ.

a, b — $\Delta J = 0.2, J_{3,4} = 0, K: 1, 2$ — $0.1, 3, 4$ — $0.2, 5$ — 0.3 по [010] (1, 3, 5) и [001] (2, 4); c, d — $\Delta J = 0.2, K = 0.1, J_3: 1, 2$ — $-0.2, 3, 4$ — $0.3, 5$ — $0.4, 6$ — 0.5 по [010] (1, 3, 5, 6) и по [001] (2, 4); e — $K = 0.2, \Delta J = 0.25, J_3 = -0.2$ по [001] при различных температурах $T/T_{\text{KB}J_1}$: 1 — $0.5, 2$ — $1.5, 3$ — 2 .

Фрустрация уменьшает значения восприимчивости. Причем величина χ^z уменьшается тем быстрее $\chi^{x,y}$, чем больше анизотропия системы. На рис. 3,а изображено температурное поведение восприимчивости для двух АФМ, имеющих одинаковые энергии и локальные поля с фрустрированными связями (3,4) и с $J_{3,4} = 0$ (1,2). Анизотропия восприимчивости $\Delta\chi = (\chi^{x,y} - \chi^z)/\chi^{x,y}$ уменьшается с ростом $J_{3,4}$ и для АФМ на рис. 3,а составляет соответственно $\Delta\chi = 0.13$ и 0.18 для $J_3 = -0.3$, $J_4 = -0.1$ и $J_{3,4} = 0$. Уменьшается и температура Нееля (на 10%), хотя энергии АФМ равны.

Четырехспиновый обмен в АФМ образует анизотропию четвертого порядка и качественно меняет поведение спиновых корреляционных функций по S^y -компонентам спина. Фурье-спектр $\langle S_q^{z,y} S_{-q}^{z,y} \rangle$ слабо зависит от q с ростом величины константы четырехспинового обмена (рис. 4,а, б). В АФМ с фрустрированными взаимодействиями и $K > 0$ в области низких температур $T/T_N < 0.3$ уменьшается критическая величина J_c , при которой исчезает ближний FM порядок по $[001]$ и в плоскости. Сильные флуктуации четырехспинового взаимодействия приводят $\langle S_q^\alpha S_{-q}^\alpha \rangle$ к белому шуму сначала по $\alpha = z$, затем по $\alpha = y$, например, для АФМ с $\Delta J = 0.2$, $K = 0.1$ $J_{3c}^z \simeq 0.3$ и $J_{3c}^y \simeq 0.4$ (рис. 4,с,д). Ближний АФМ порядок образуется при более высоких значениях констант фрустрированной связи, т.е. существует интервал значений $J_{3,4c}^{\text{FM}} < J_{3,4} < J_{3,4c}^{\text{AFM}}$, в котором вектор ближнего порядка в магнитоупорядоченной фазе вырожден. Это вырождение с ростом температуры снимается, так как вклад в энергию от четырехспинового обмена уменьшается пропорционально четвертой степени намагниченности (рис. 4,е).

Температурное поведение восприимчивости АФМ с четырехспиновым обменом качественно меняется. В зависимости $\chi(T)$ появляется максимум при $T = T_N$ (рис. 3,б). Низкотемпературное значение восприимчивости уменьшается с ростом величины K , и $\Delta\chi = \chi(T/T_N = 0.2) - \chi(T_N)$ растет, как изображено на рис. 3,с. Используя эту зависимость, из статических измерений восприимчивости можно определить параметр четырехспинового обмена.

Итак, фрустрация приводит к слабому изменению фурье-спектра ближнего порядка по q , уменьшению величины восприимчивости и ее анизотропии. Четырехспиновый обмен образует максимум в температурном поведении восприимчивости легкоплоскостного АФМ, по величине которого можно определить этот обмен. АФМ с четырехспиновым обменом в определенном интервале величин фрустрированных связей не имеет ближнего порядка.

Работа выполнена при поддержке Краевого фонда науки (грант 3F0065).

Список литературы

- [1] Гехт Р.С. УФН 159, 2, 261 (1989).
- [2] Roessli B., Fisher P., Furrer A., Petrákovskii G., Sablina K., Valkov V., Fedoseev B. J. Appl. Phys. 73, 10, 6448 (1993).
- [3] Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. М. (1982), 396 с.