

# Спиральная магнитная структура в гейзенберговских и негейзенберговских магнетиках

© Ю.А. Фридман, Д.А. Матюнин, Ф.Н. Клевец, Г.А. Гореликов

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского,  
Симферополь, Украина

E-mail: frid@tnu.crimea.ua

(Поступила в Редакцию 2 июня 2009 г.

В окончательной редакции 4 сентября 2009 г.)

Исследована возможность реализации модулированной (спиральной) магнитной структуры в анизотропных гейзенберговских и негейзенберговских магнетиков с фрустрированным гейзенберговским обменным взаимодействием. Показано, что в гейзенберговских магнетиках с большой легкоплоскостной анизотропией кроме реализации однородных состояний (ферромагнитного и квадрупольного) возможно существование спиральной магнитной структуры. Ось спирали совпадает с направлением внешнего магнитного поля. Учет биквадратичного обменного взаимодействия приводит к сужению области существования спиральной структуры по магнитному полю. В отсутствие внешнего магнитного поля реализация спиральной структуры возможна только для случая анизотропии типа „легкая ось“.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (проект № 269/09).

## 1. Введение

Первая модулированная магнитная структура — простоя магнитная спираль — была экспериментально обнаружена в  $MnAu_2$  более 40 лет назад (см. обзор [1]). На сегодняшний день известно большое число магнетиков, в которых реализуется спиральная магнитная структура; в частности к ним относятся редкоземельные металлы [2]. Причиной возникновения таких структур является конкуренция положительных и отрицательных обменных взаимодействий между соседними и следующими за ними атомами в магнитном кристалле.

Спиральные магнитные структуры хорошо изучены в магнетиках с малой одноионной анизотропией (существенно меньшей обменных взаимодействий) [1–4]. Однако существует широкий класс магнитоупорядоченных систем, в которых константа одноионной анизотропии сравнима или даже превосходит обменные интегралы. К таким системам можно отнести, например, редкоземельные металлы  $Dy$ ,  $Tb$  [4], соединения  $CsFeBr_3$ ,  $CsFeCl_3$  [5], в которых при величине псевдоспина иона  $Fe^{2+}$   $S = 1$  константа одноионной анизотропии достигает 20–30 К, тогда как обменные интегралы принимают значения 3–5 и 0.3–0.4 К соответственно. К таким системам относятся также  $NiZrF_6 \cdot 6H_2O$ ,  $FeSiF_6 \cdot 6H_2O$  [6], для которых отношение константы одноионной анизотропии к обменному интегралу составляет примерно 40 и 4 соответственно.

Необходимо отметить, что механизм формирования спиральной магнитной структуры в редкоземельных металлах имеет ряд особенности, а именно в таких системах существенную роль во взаимодействии локализованных магнитных моментов играет механизм РККИ, поэтому период модулированной структуры в основном

определяется особенностями поверхности Ферми этих металлов.

Магнетики с большой одноионной анизотропией типа „легкая плоскость“ обладают рядом необычных свойств. Если константа одноионной анизотропии превосходит константу обменного взаимодействия, в магнетике формируется одинаковое для всех ионов синглетное спиновое состояние. Физически это означает, что из трех возможных одноионных спиновых состояний с проекциями  $S^z = \pm 1, 0$  на ось  $C_3$  нижайшим оказывается последнее. Теоретические исследования таких систем восходят к работе Мория [7]. В ней было показано, что при  $\beta/2J_0 > 1$  даже при абсолютном нуле температур ( $T = 0$ ) в отсутствие внешнего поля реализуется немагнитное квадрупольно-упорядоченное основное состояние. В таких магнетиках квантовые свойства отдельных спинов в эффективном магнитном поле играют решающую роль в формировании динамических и термодинамических свойств. В [8] было показано, что конкуренция двух типов взаимодействий — одноионной анизотропии и обмена — приводит к существованию своеобразных типов спиновых структур при  $T = 0$ : одноионная анизотропия также создает эффективное поле, но не ферромагнитного, а квадрупольного типа. Соответствующий квадрупольный порядок в рассматриваемом случае можно представить как хаотичное упорядочение спинов в плоскости, перпендикулярной оси ферромагнетизма, выделенной, например, внешним полем, и характеризовать квадрупольным параметром порядка  $q = 3\langle(S^z)^2\rangle - S(S+1)$ . Таким образом, несмотря на отсутствие векторного магнитного порядка, соответствующие структуры являются спин-упорядоченными, и порядок в них определяется тензорными характеристиками. По этой причине их свойства отличаются от

свойств парамагнетиков, в частности, оказываются близкими к свойствам антиферромагнетиков (а конкретно — одноосных антиферромагнетиков в поле, параллельном оси анизотропии). Такие системы называют также ван-Флековскими парамагнетиками [5,9].

Другим механизмом (кроме одноионной анизотропии), приводящим к существованию квадрупольных фаз, может быть наличие биквадратичного обменного взаимодействия [4,10,11].

Существование обменных взаимодействий высших порядков по спиновым переменным можно пояснить следующим образом. Обменный гамильтониан Гейзенберга имеет общий характер, так как он построен на основе выражения, составленного из операторов атомных спинов и инвариантного относительно спиновых вращений. Именно такой инвариантностью обладает исходный гамильтониан, включающий энергию кулоновского взаимодействия электронов.

В случае  $S = \frac{1}{2}$  других инвариантов, составленных из операторов спинов двух атомов, не существует. Если же  $S > \frac{1}{2}$ , то независимыми инвариантами являются

$$(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'}); (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2; \dots (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^{2S},$$

где  $S$  — величина спина магнитного иона. Все эти выражения необходимо учитывать при феноменологическом построении гамильтониана. На этот факт впервые обратил внимание Шредингер в 1940 г.

Для магнитоупорядоченных систем с  $S = 1$  в обменном гамильтониане возникает слагаемое  $\sim (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2$ . Природа возникновения этого обменного взаимодействия может быть различна: это может быть сверхобмен через немагнитные атомы [12] либо сильное спин-орбитальное взаимодействие [13].

В числе первых экспериментальных исследований по определению величины биквадратичного обмена были работы по изучению электронного парамагнитного резонанса ионов  $\text{Mn}^{2+}$  в  $\text{MgO}$ , содержащем 1%  $\text{Mn}$  [14]. Эти исследования показали, что в магнетиках со значительным обменным взаимодействием высших порядков по спину может реализовываться квантовый квадрупольный порядок, когда в основном состоянии кристалла все средние проекции спинов равны нулю, а кооперативное упорядочение происходит не по магнитному моменту, а по квадрупольному. Свойства таких систем во многом напоминают свойства магнетиков, в которых магнитное упорядочение отсутствует из-за сильного влияния кристаллического поля одноионной анизотропии. Кстати, в определенных случаях влияние кристаллического поля одноионной анизотропии формально сводится к обмену высших порядков по спину [4].

Однако, как это ни удивительно, возможность реализации спиральных магнитных структур в сильно анизотропных гейзенберговских магнетиках и магнетиках с большим биквадратичным обменным взаимодействием (негейзенберговских магнетиках), насколько нам известно, не исследована.

## 2. Спиральная магнитная структура в сильно анизотропном гейзенберговском магнетике

Рассмотрим бесконечный магнитный кристалл, обладающий большой одноионной анизотропией типа „легкая плоскость“. В качестве базисной плоскости выберем плоскость  $XOY$ . Система находится во внешнем магнитном поле, перпендикулярном базисной плоскости ( $\mathbf{H} \parallel OZ$ ). Спин магнитного иона предполагается равным единице ( $S = 1$ ) — это то минимальное значение спина, при котором возможно существование одноионной анизотропии. Гамильтониан такого магнетика можно представить в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{f,f'} \tilde{J}(f-f') \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'} + \frac{\beta}{2} \sum_f (S_f^z)^2 - H \sum_f S_f^z, \quad (1)$$

где  $f = (l, n)$  — номер узла в кристалле, а обменное взаимодействие определено следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{J}(f-f') = & J(n-n') \delta_{l,l'} - J^{(1)}(l-l') \delta_{n,n'} \delta_{l',l+1} \\ & + J^{(2)}(l-l') \delta_{n,n'} \delta_{l',l+2}, \end{aligned}$$

$n$  — номер узла в базисной плоскости ( $XOY$ ), индекс  $l$  нумерует узлы вдоль направления  $OZ$ , которое совпадает с направлением волнового вектора спирали;  $S_f^i$  —  $i$ -я компонента спинового оператора в узле  $f$ ;  $\beta > 0$  — константа легкоплоскостной одноионной анизотропии. При этом  $J^{(1)}$ , очевидно, больше, чем  $J^{(2)}$ ; кроме того, предполагается, что  $\beta > \tilde{J}$ . Дальнейшие вычисления будем проводить для случая низких температур ( $T = 0$ ), в котором наиболее ярко проявляются свойства большой одноионной анизотропии.

Поскольку нас интересуют эффекты, связанные с большой одноионной анизотропией, необходимо учитывать это взаимодействие точно. Это можно сделать, используя технику операторов Хаббарда [15–19]. Операторы строятся на полном базисе собственных состояний одноионного гамильтониана, включающего в себя эффекты самосогласованного поля [17].

В общем случае кроме молекулярного поля, связанного с наличием гейзенберговского обменного взаимодействия, в рассматриваемом магнетике возникают дополнительные (квадрупольные) молекулярные поля, связанные с учетом большой одноионной анизотропии

$$q_2^0 = \langle Q_2^0 \rangle, \quad q_2^z = \langle Q_2^z \rangle,$$

где  $Q_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1)$ ,  $Q_{2f}^z = (S_f^x)^2 - (S_f^y)^2$  — операторы Стивенса.

Выделяя в (1) среднее поле  $\langle S_f^z \rangle$ , связанное с упорядочением магнитного момента, и дополнительное поле  $\langle Q_{2f}^p \rangle \equiv q_2^p$ , определяющее средний квадрупольный момент, для эффективного одноузельного гамильтониана

$\mathcal{H}_0(f)$  получаем следующее выражение

$$\mathcal{H}_0(f) = \varepsilon_0 - \bar{H}S_f^z + B_2^0 Q_{2f}^0 - B_2^2 Q_{2f}^0, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_0 = \frac{\beta}{6} S(S+1) + \frac{1}{2} \bar{J}_0 \langle S^z \rangle^2$ ,  $\bar{H} = H + \bar{J}_0 \langle S^z \rangle$ ,  $B_2^0 = \frac{\beta}{6}$ ,  $B_2^2 = q_2^2$ .

Последнее слагаемое в гамильтониане (2) введено нами формально, поскольку, как мы покажем в дальнейшем, для гейзенберговского магнетика компонента тензора квадрупольных моментов  $q_2^2 = 0$  при любых соотношениях материальных констант.

Решение уравнения Шредингера с одноузельным гамильтонианом (2) позволяет получить энергетические уровни магнитного иона (с точностью до аддитивной константы  $\varepsilon_0$ )

$$E_1 = 3B_2^0 - \sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2}, \quad E_0 = 0, \\ E_{-1} = 3B_2^0 + \sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2} \quad (3)$$

и собственные функции (2)

$$\Psi_n(1) = \cos \theta |1\rangle + \sin \theta |-1\rangle, \quad \Psi_n(0) = |0\rangle, \\ \Psi_n(-1) = -\sin \theta |1\rangle + \cos \theta |-1\rangle, \quad (4)$$

где

$$\cos \theta = \left[ \frac{\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2} + \bar{H}}{2\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2}} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \sin \theta = \left[ \frac{\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2} - \bar{H}}{2\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2}} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$|M\rangle$  — собственные векторы оператора  $S^z$  ( $M = 1, 0, -1$ ).

На собственных функциях  $\Psi_n(M)$  построим операторы Хаббарда [15,16,18,19], которые определяются следующим образом:

$$X_n^{M'M} \equiv |\Psi_n(M')\rangle \langle \Psi_n(M)|$$

и описывают переход магнитного иона из состояния  $M'$  в состояние  $M$ .

Для изучаемой нами системы связь спиновых операторов с операторами Хаббарда имеет вид

$$S_n^+ = \sqrt{2} \{ \sin \theta (X_n^{01} - X_n^{-10}) + \cos \theta (X_n^{0-1} + X_n^{10}) \},$$

$$S_n^- = \sqrt{2} \{ \sin \theta (X_n^{10} - X_n^{0-1}) + \cos \theta (X_n^{-10} + X_n^{01}) \},$$

о

$$S_n^z = \cos 2\theta (X_n^{11} - X_n^{-1-1}) - \sin 2\theta (X_n^{-11} + X_n^{1-1}). \quad (5)$$

Как следует из (5), параметры порядка системы при  $T = 0$  можно представить в виде

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta, \quad q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - 2, \quad q_2^2 = \sin 2\theta. \quad (6)$$

Исходя из выражений (6) и (3), можно сказать, что при  $T = 0$  существует как минимум два интервала полей, в которых реализуются однородные фазовые состояния.

1) При  $H > \beta/2$  в системе реализуется ферромагнитная фаза с магнитным моментом, направленным вдоль внешнего магнитного поля (параллельно оси  $OZ$ ). При этом, как следует из (3), нижайшим энергетическим уровнем является  $E_1$ , а волновая функция этого состояния  $\Psi(1) = |1\rangle$ . Параметры порядка системы, как видно из (6), имеют вид

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0. \quad (7)$$

Из (7) следует, что в случае больших полей  $\cos 2\theta = 1$ ,  $\sin 2\theta = 0$  и  $\langle (S^z)^2 \rangle = 1$ ,  $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{1}{2}$ .

2) Если внешнее поле  $H < \beta/2$ , то, как следует из (3), нижайшим энергетическим уровнем является  $E_0$ . Волновая функция этого состояния  $\Psi(0) = |0\rangle$ , а параметры порядка системы равны

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = -2, \quad q_2^2 = 0. \quad (8)$$

Хотя, как следует из (8), средняя намагниченность (на один узел) в этом состоянии равна нулю, данное фазовое состояние не является парамагнитным, поскольку парамагнитное состояние характеризуется следующим выражением:

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{2}{3}.$$

В рассматриваемом случае выполняется иное соотношение, а именно

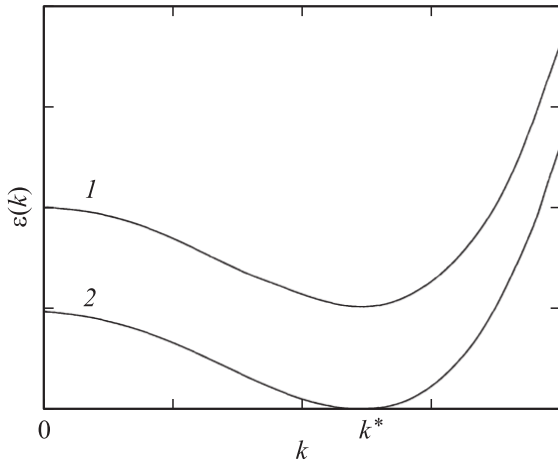
$$\langle (S^z)^2 \rangle = 0, \quad \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

Такое фазовое состояние мы будем называть квадрупольно-упорядоченным, поскольку отличным от нуля параметром порядка является компонента тензора квадрупольных моментов  $q_2^0$  [4]. В некоторых работах такое фазовое состояние называют ван-Флекковским парамагнетиком [5,9].

Нашей задачей является определение областей существования ферромагнитной и квадрупольной фаз. Для этого исследуем спектры элементарных возбуждений в соответствующих фазах. Процедура получения дисперсионного уравнения подробно описана, например, в [16,18,19]. Как показано в этих работах, дисперсионное уравнение, определяющее спектры элементарных возбуждений, получено при точном учете одноионной анизотропии и справедливо при произвольных соотношениях материальных констант.

Рассмотрим решение дисперсионного уравнения в случае больших магнитных полей ( $H \geq \beta/2$ ). Тогда энергетические уровни магнитного иона

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \bar{H}, \quad E_0 = 0, \quad E_{-1} = \frac{\beta}{2} + \bar{H}. \quad (9)$$



**Рис. 1.** Магнонный спектр трехмерного фрустрированного магнетика в ферромагнитной фазе. Кривая 1 соответствует случаю  $H > \beta/2$ , кривая 2 —  $H = H_{c1}$ .

Как следует из (9), нижайшим энергетическим уровнем в этом случае является  $E_1$ . Тогда, как следует из (5) и (6), параметры порядка имеют вид

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0$$

и, следовательно, в этом случае в системе реализуется ферромагнитная фаза.

Спектр магнонов в этом случае имеет вид

$$\varepsilon(k) = H - \frac{\beta}{2} + \tilde{J}_0 - \tilde{J}(k), \quad (10)$$

где  $\tilde{J}(k) = J_0 - J_0^{(1)} \cos k + J_0^{(2)} \cos 2k$  — Фурье-образ констант обменного взаимодействия. Здесь предполагается, что волновой вектор ориентирован вдоль оси  $OZ$ , т.е.  $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ . Спектр магнонов (10) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= H - \frac{\beta}{2} + k^2 \left( -\frac{J_0^{(1)}}{2} + 2J_0^{(2)} \right) + k^4 \left( \frac{J_0^{(1)}}{24} - \frac{2J_0^{(2)}}{3} \right) \\ &= H - \frac{\beta}{2} + \delta k^2 + \gamma k^4, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\delta = -\frac{J_0^{(1)}}{2} + 2J_0^{(2)} < 0, \quad \gamma = \frac{J_0^{(1)}}{24} - \frac{2}{3}J_0^{(2)} > 0.$$

Из условия обращения в нуль щели в спектре (11) найдем поле фазового перехода из ферромагнитной фазы. При этом необходимо учесть перенормировку щели, связанную с конечностью волнового вектора. Как следует из (11), спектр магнонов в ферромагнитной фазе имеет локальный минимум при  $k = 0$ , а при  $(k^*)^2 = -\delta/2\gamma$  — абсолютный (рис. 1). Таким образом, величина поля перехода из ферромагнитной фазы в состояние со спиральным распределением вектора намагниченности зависит от величины критического значения

волнового вектора  $k^*$

$$H_{c1} = \frac{\beta}{2} + \frac{\delta^2}{4\gamma}. \quad (12)$$

Как видно из (11) и (12), при  $H = H_{c1}$  система испытывает фазовый переход второго рода из ферромагнитной фазы в спиральную магнитную структуру с осью спирали, параллельной оси  $OZ$ . При этом шаг магнитной спирали равен  $1/k^* = \sqrt{-2\gamma/\delta}$ . Этот результат совпадает с результатом работы [2].

Рассмотрим теперь случай малых полей ( $H < \beta/2$ ). Как следует из (3), при больших значениях одноионной анизотропии и малых магнитных полях происходит инверсия энергетических уровней, и нижайшим уровнем магнитного иона становится  $E_0$ . Тогда параметры порядка системы равны (см. (5) и (6))

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = -2, \quad q_2^2 = 0,$$

т.е. магнетик находится в квадрупольной фазе. Как уже отмечалось, это не есть парамагнитное состояние, поскольку средние от квадратов компонент спинового оператора не равны друг другу. Эту квадрупольную фазу назовем  $QU_2$ -фазой.

Спектр магнонов в  $QU_2$ -фазе имеет вид

$$\varepsilon(k) = \frac{1}{2} \sqrt{\beta(\beta - 4\tilde{J}_0 + 4\delta k^2 + 4\gamma k^4)} - H. \quad (13)$$

Из (13) следует, что спектр магнонов имеет локальный минимум при  $k = 0$ , а при  $(k^*)^2 = -\delta/2\gamma$  — абсолютный. Поэтому при

$$\begin{aligned} H_{c2} &= \sqrt{\frac{\beta}{4} \left( \beta - 4\tilde{J}_0 - \frac{\delta^2}{\gamma} \right)} \\ &\approx \frac{\beta}{2} - J_0 + J_0^{(1)} - J_0^{(2)} - \frac{\delta^2}{4\gamma} \end{aligned} \quad (14)$$

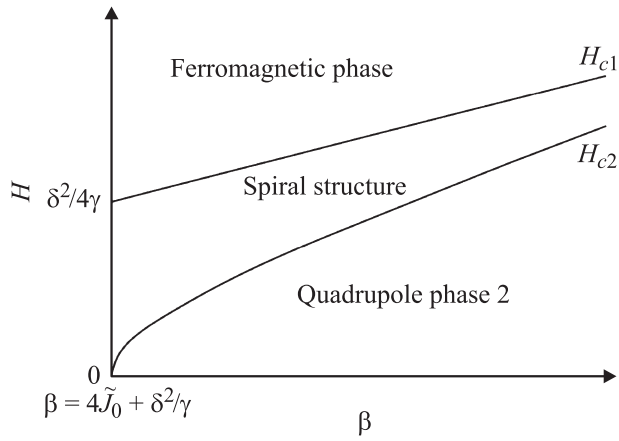
исследуемая система переходит из  $QU_2$ -фазы в спиральную фазу с шагом спирали  $1/k^* = \sqrt{-2\gamma/\delta}$ . Спектр магнонов в этом случае аналогичен показанному на рис. 1, однако теперь кривая 1 будет соответствовать случаю слабых полей ( $H < \beta/2$ ), а кривая 2 — случаю  $H = H_{c2}$ .

Таким образом, во фрустрированном магнетике с большой одноионной анизотропией возможна реализация спиральной магнитной структуры. Область существования этого фазового состояния (по магнитному полю)

$$\Delta H = H_{c1} - H_{c2} \approx J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)} + \frac{\delta^2}{2\gamma},$$

а шаг магнитной спирали определяется константами обменных взаимодействий. Фазовая диаграмма рассматриваемой системы для случая  $T = 0$  схематически представлена на рис. 2.

Как отмечалось в [4], в случае одноосных кристаллов вектор модулированной структуры направлен



**Рис. 2.** Фазовая диаграмма сильно анизотропного легкоплоскостного гейзенберговского ферромагнетика с фрустрированным обменным взаимодействием.

по оси кристалла. Магнитную структуру таких систем удобно описывать одним комплексным вектором  $\mathbf{m} = \mathbf{m}_+ + i\mathbf{m}_-$ . Синусоидальной модуляции отвечают  $\mathbf{m}_+$  и  $\mathbf{m}_-$ , параллельные друг другу, а геликоидальной — перпендикулярные друг другу и равные по величине.

При симметрии кристалла типа „легкая плоскость“, рассматриваемой в данном случае, существенными являются только компоненты намагниченности, перпендикулярные вектору структуры, и, следовательно, в системе реализуется спиральная магнитная структура.

Также необходимо отметить, что полученные нами результаты относятся к случаю, когда константы обменного взаимодействия таковы, что  $J_0 > J_0^{(1)}$ . Если же обменные интегралы таковы, что  $J_0 < J_0^{(1)}$ , то, как следует из (12) и (14),  $H_{c2} > H_{c1}$  и в системе реализуется один фазовый переход первого рода из ферромагнитной фазы в QU<sub>2</sub>-фазу через неоднородное состояние типа магнитной спирали.

### 3. Спиральная магнитная структура в анизотропном негейзенберговском магнетике

Рассмотрим теперь анизотропный негейзенберговский магнетик, описываемый гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{f,f'} \tilde{J}(f-f') \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') \delta_{ll'} (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 + \frac{\beta}{2} \sum_f (S_f^z)^2 - H \sum_f S_f^z, \quad (15)$$

где  $K(n-n') \delta_{ll'} > 0$  — константа биквадратичного обменного взаимодействия в базисной плоскости. Все остальные обозначения, использованные в гамильтониане (15), соответствуют обозначениям, введенным выше. Как и ранее, будем рассматривать магнетик со спином

магнитного иона  $S = 1$  при  $T = 0$ . При этом в отличие от рассмотренного случая гейзенберговского магнетика знак константы анизотропии мы не фиксируем. Волновой вектор ориентирован вдоль оси OZ, т. е.  $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ .

Выделяя в гамильтониане (15) среднее поле, связанное с упорядочением магнитных моментов, и дополнительные поля, определяющие квадрупольное упорядочение, получаем для одноузельного гамильтониана  $\mathcal{H}_0(n)$

$$\mathcal{H}_0(f) = -\bar{H} S_f^z + B_2^0 Q_{2f}^0 - B_2^2 Q_{2f}^2 + \frac{\beta}{2} (S_f^z)^2, \quad (16)$$

где

$$\bar{H} = \left( J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle,$$

$$B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0, \quad B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2, \quad (17)$$

$$Q_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1), \quad Q_{2f}^2 = \frac{1}{2} \left[ (S_f^+)^2 + (S_f^-)^2 \right],$$

$$q_2^0 \equiv \langle Q_2^0 \rangle, \quad q_2^2 \equiv \langle Q_2^2 \rangle.$$

Энергетические уровни магнитного иона и собственные функции одноузельного гамильтониана (16) определяются выражениями (3) и (4) соответственно, но с учетом соотношений (17).

Как и ранее, для описания исследуемой системы будем использовать технику операторов Хаббарда. Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда определяется соотношением (5), но опять-таки с учетом (17). При этом параметры порядка системы формально имеют тот же вид, что и в случае гейзенберговского магнетика,

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta, \quad q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - 2, \quad q_2^2 = \sin 2\theta, \quad (18)$$

где  $\cos 2\theta$  определяется с учетом соотношений (17).

Из соотношений (18) можно определить параметры порядка системы в различных фазовых состояниях. Так же как и в гейзенберговском магнетике возможна реализация ферромагнитной фазы при достаточно больших полях и QU<sub>2</sub>-фазы при относительно малых полях. Причем реализация этой фазы, так же как и в гейзенберговском магнетике, связана с большой одноионной анизотропией и, как следствие, с инверсией энергетических уровней. Параметры порядка этих фаз определяются соотношениями (7) и (8) соответственно.

Однако в негейзенберговском магнетике возможна еще одна нетривиальная ситуация при  $H = 0$ . В этом случае при достаточно большом биквадратичном обмене ( $K_0 > J_0$ ) в системе может реализоваться еще одно квадрупольное состояние (QU<sub>1</sub>-фаза). В этой фазе нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона, как следует из (3) и (17), является  $E_1$ . Однако параметры порядка системы в этом случае имеют вид

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 1, \quad (19)$$

а волновая функция этого состояния  $\Psi(1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times (|1\rangle + |-1\rangle)$ . При этом

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S^y)^2 \rangle = 0.$$

Дисперсионное уравнение, определяющее спектры элементарных возбуждений, формально имеет тот же вид, что и в случае гейзенберговского магнетика (см. [16,18,19]). Однако включение биквадратичного обменного взаимодействия требует использования восьмерного базиса.

Исследуем спектры элементарных возбуждений в различных однородных фазовых состояниях.

При достаточно больших магнитных полях ( $H > \beta/2$ ) система находится в ферромагнитном состоянии с параметрами порядка (7). Биквадратичное обменное взаимодействие не оказывает никакого влияния на термодинамические и динамические свойства магнетика в ферромагнитной фазе. Спектр магнонов в этой фазе определяется соотношениями (10) и (11), поле перехода из ферромагнитной фазы в модулированное состояние определяется выражением (13), а шаг спирали тот же, что и в случае гейзенберговского ферромагнетика.

Более интересная ситуация наблюдается при малых ( $H < \beta/2$ ) и нулевых полях. Рассмотрим вначале случай малых полей. При этом в системе происходит инверсия энергетических уровней, так что нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона становится  $E_0$ . Параметры порядка системы определяются соотношениями (8), т.е. система находится в  $QU_2$ -фазе. Спектр магнонов в этой фазе имеет вид

$$\varepsilon(k) = \sqrt{\beta \left[ \frac{\beta}{4} + K_0 - (J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}) - k^2 \left( \frac{J_0^{(1)}}{2} - 2J_0^{(2)} \right) + \frac{k^4}{3} \left( \frac{J_0^{(1)}}{8} - 2J_0^{(2)} \right) \right]} - H, \quad (20)$$

где  $\beta > 0$ , т.е. в системе существует одноионная анизотропия типа „легкая плоскость“. Легко видеть, что спектр магнонов в  $QU_2$ -фазе теряет устойчивость не только при  $k = 0$ , но и при  $(k^*)^2 = -\frac{\delta}{2\gamma}$ , где  $\delta = -\frac{J_0^{(1)}}{2} + 2J_0^{(2)} < 0$ ,  $\gamma = \frac{J_0^{(1)}}{24} - \frac{2}{3}J_0^{(2)} > 0$ . Как известно, такого рода неустойчивость характерна для модулированных (спиральных) магнитных структур. Таким образом, поле перехода системы из  $QU_2$ -фазы в спиральное состояние имеет вид

$$\tilde{H}_{c2} = \sqrt{\beta \left[ \frac{\beta}{4} + K_0 - (J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}) - \frac{\delta^2}{4\gamma} \right]}. \quad (21)$$

Как видно из (20) и (21), в негейзенберговском магнетике переход  $QU_2$ -фаза–спиральная магнитная структура может реализоваться не только за счет большой одноионной анизотропии, как это наблюдалось в гейзенберговском магнетике, но и за счет влияния достаточно большого биквадратичного обменного взаимодействия

( $K_0 > J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}$ ). Кроме того, область существования спиральной магнитной структуры в негейзенберговском магнетике по магнитному полю ( $\Delta\tilde{H} = H_{c1} - \tilde{H}_{c2}$ ) существенно меньше, чем в гейзенберговском магнетике. Как видно из выражений (21) и (14), это связано с влиянием биквадратичного взаимодействия. Необходимо отметить, что при  $K_0 = \tilde{J}_0$  область существования спиральной магнитной структуры определяется только фрустрированным гейзенберговским обменом

$$H_{c1} - \tilde{H}_{c2} \approx \frac{\delta^2}{2\gamma},$$

и при отсутствии фрустрации поля переходов из ферромагнитной фазы и  $QU_2$ -фазы совпадают ( $H_{c1} = \tilde{H}_{c2}$ ), что согласуется с результатами работы [19].

Теперь рассмотрим случай, когда магнитное поле равно нулю. При этом в зависимости от соотношения материальных констант возможна реализация двух однородных фаз.

1) При  $\tilde{J}_0 > K_0$  в системе реализуется ферромагнитная фаза, параметры порядка которой определяются соотношениями (7).

2) При  $\tilde{J}_0 < K_0$  в системе реализуется  $QU_1$ -фаза, параметры порядка которой определяются соотношениями (19).

Спектр магнонов в ферромагнитной фазе имеет вид

$$\varepsilon(k) = -\frac{\beta}{2} - k^2 \left( \frac{J_0^{(1)}}{2} - 2J_0^{(2)} \right) + \frac{k^4}{3} \left( \frac{J_0^{(1)}}{8} - 2J_0^{(2)} \right).$$

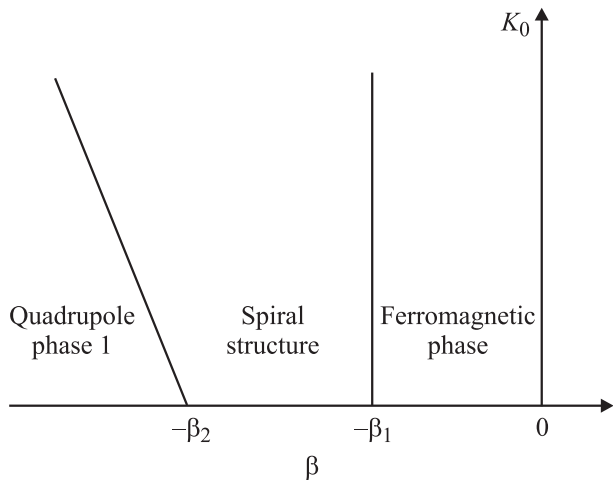
Легко видеть, что этот спектр не имеет физического смысла, если константа одноионной анизотропии  $\beta > 0$ , т.е. если в системе реализуется анизотропия типа „легкая плоскость“ ( $XOY$  — базисная плоскость). Этот результат очевиден, поскольку для формирования спиральной магнитной структуры необходимо наличие выделенного направления (оси квантования). Ранее такое направление формировало внешнее магнитное поле. Если же предположить, что в системе реализуется анизотропия типа „легкая ось“ ( $\beta < 0$ ), перпендикулярная плоскости  $XOY$ , то ситуация кардинально меняется. Спектр магнонов в ферромагнитной фазе тогда примет вид

$$\varepsilon(k) = \frac{|\beta|}{2} - k^2 \left( \frac{J_0^{(1)}}{2} - 2J_0^{(2)} \right) + \frac{k^4}{3} \left( \frac{J_0^{(1)}}{8} - 2J_0^{(2)} \right). \quad (22)$$

Как и ранее, спектр (22) неустойчив при  $(k^*)^2 = -\delta/2\gamma$ , а щель в спектре магнонов обратится в нуль при

$$|\beta_1| = \frac{2}{3} \frac{\delta^2}{\gamma}.$$

При таком значении константы анизотропии типа „легкая ось“ магнетик перейдет из ферромагнитного состояния в состояние магнитной спирали.



**Рис. 3.** Фазовая диаграмма анизотропного фрустрированного негейзенберговского ферромагнетика в отсутствие внешнего магнитного поля.

Аналогичная ситуация наблюдается в  $QU_1$ -фазе, т.е. спиральная магнитная структура реализуется только в случае одноионной анизотропии типа „легкая ось“ ( $\beta < 0$ ), что легко видеть из спектров магнонов в  $QU_1$ -фазе

$$\varepsilon(k) = \sqrt{|\beta| \left[ \frac{|\beta|}{4} + K_0 - (J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}) - k^2 \left( \frac{J_0^{(1)}}{2} - 2J_0^{(2)} \right) + \frac{k^4}{3} \left( \frac{J_0^{(1)}}{8} - 2J_0^{(2)} \right) \right]}. \quad (23)$$

Из (23) следует, что магнетик претерпевает фазовый переход  $QU_1$ -фаза–спиральная магнитная структура при

$$|\beta_2| = 4(J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}) - 4K_0 + \frac{\delta^2}{\gamma}. \quad (24)$$

Необходимо отметить, что выражение (24) имеет смысл, если

$$(J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}) + \frac{\delta^2}{4\gamma} > K_0.$$

Кроме того,  $QU_1$ -фаза реализуется при  $K_0 > J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}$ . Следовательно, реализация спиральной магнитной структуры в негейзенберговском магнетике в нулевом поле возможна только для тех значений биквадратичного обменного взаимодействия, которые удовлетворяют неравенству

$$J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)} + \frac{\delta^2}{4\gamma} > K_0 > J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)}.$$

Фазовая диаграмма рассматриваемой системы в нулевом магнитном поле для случая  $K_0 > J_0$  и  $T = 0$  схематически показана на рис. 3.

## 4. Заключение

В результате проведенных исследований нами установлено, что в сильно анизотропном легкоплоскостном гейзенберговском магнетике возможно существование модулированной (спиральной) магнитной структуры, обладающей целым рядом особенностей.

Прежде всего, в гейзенберговском магнетике с фрустрированными обменными взаимодействиями и большой одноионной анизотропией типа „легкая плоскость“ в зависимости от величины внешнего магнитного поля возможна реализация не только ферромагнитного состояния, но и магнитоупорядоченного состояния, характеризуемого тензорным параметром порядка, — квадрупольного состояния ( $QU_2$ -фаза). Необходимо отметить, что реализация этого состояния связана с инверсией энергетических уровней магнитного иона. При изменении внешнего магнитного поля система переходит из однородных состояний (ферромагнитного и  $QU_2$ ) в модулированное состояние — магнитную спираль. В случае малой одноионной анизотропии (см., например, [2]) магнитная спираль существует в широком интервале полей: от нуля до  $H_{c1}$ , определяемого формулой (12). В рассматриваемом случае полевой интервал существования спиральной структуры существенно уменьшается и равен  $\Delta H \approx J_0 - J_0^{(1)} + J_0^{(2)} + \delta^2/2\gamma$ . Фазовая диаграмма рассматриваемой системы приведена на рис. 2.

Наиболее существенные особенности наблюдаются в системе с биквадратичным обменным взаимодействием. Нами рассматривалась модель, в которой биквадратичное обменное взаимодействие действует только в базисной плоскости. В этом случае, как и ранее, при  $H \neq 0$  кроме ферромагнитной и  $QU_2$ -фаз в системе реализуется спиральная магнитная структура. Область ее существования существенно меньше, чем в гейзенберговском магнетике. Сужение области существования спиральной магнитной структуры связано с влиянием биквадратичного обменного взаимодействия, которое расширяет область существования  $QU_2$ -фазы. Фазовая диаграмма в данном случае аналогична диаграмме, приведенной на рис. 2. При этом необходимо учесть, что линия перехода  $QU_2$ -фаза–спиральная структура определяется соотношением (21).

Кроме того, при  $H = 0$  в системе также возможна реализация ферромагнитной и квадрупольной ( $QU_1$ ) фаз в зависимости от соотношения материальных констант. Однако  $QU_1$ -фаза не связана с инверсией энергетических уровней магнитного иона, а определяется влиянием биквадратичного обменного взаимодействия. Также при нулевом магнитном поле возможна реализация спиральной магнитной структуры, причем существование этого состояния возможно только при наличии анизотропии типа „легкая ось“. Это связано с тем, что для возникновения спирального состояния необходимо выделенное направление, определяющее симметрию спирали. Такое направление может быть задано либо внешним полем, либо легкоосной анизотропией. Область существования

спирального состояния в данном случае определяется не только константами гейзенберговского обменного взаимодействия, но и константами биквадратичного обмена. Фазовая диаграмма, соответствующая случаю  $H = 0$ , приведена на рис. 3.

## Список литературы

- [1] Ю.А. Изюмов. УФН **144**, 439 (1984).
- [2] В.Д. Бучельников, В.Г. Шавров. ФТТ **30**, 1167 (1988).
- [3] А.А. Гиппиус, А.С. Москвин, Е.Н. Морозова, К.С. Охотников. ЖЭТФ **132**, 99 (2007).
- [4] Э.Л. Нагаев. Магнетика со сложными обменными взаимодействиями. Наука, М. (1988). 231 с.
- [5] В.М. Калита, В.М. Локтев. ЖЭТФ **125**, 1149 (2004).
- [6] В.Г. Борисенко, Ю.В. Переверзев. ФНТ **11**, 730 (1985).
- [7] Т. Мориya. Phys. Rev. **117**, 635 (1960).
- [8] Ф.П. Онуфриева. ЖЭТФ **89**, 2270 (1985).
- [9] V.M. Kalita, I. Ivanova, V.M. Loktev. Phys. Rev. B **78**, 104415 (2008).
- [10] H.H. Chen, P.M. Levy. Phys. Rev. Lett. **27**, 1383 (1971).
- [11] В.М. Матвеев. ЖЭТФ **65**, 1626 (1973).
- [12] R. Anderson. Solid State Phys. **14**, 99 (1965).
- [13] R. Elliot, M. Thorpe. Appl. Phys. **39**, 802 (1968).
- [14] E. Harris, J. Owen. Phys. Rev. Lett. **11**, 9 (1963).
- [15] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- [16] Ю.Н. Мицай, Ю.А. Фридман. ТМФ **81**, 263 (1989).
- [17] В.М. Локтев, В.С. Островский. УФЖ **23**, 1708 (1978).
- [18] В.В. Вальков, Т.А. Вальков, С.Г. Овчинников. ЖЭТФ **88**, 550 (1985).
- [19] Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, Ph.N. Klevets. J. Magn. Mater. **320**, 435 (2008).