

УДК 537.622.5

© 1991

**ПОВЕДЕНИЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА
С ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ
В МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРОИЗВОЛЬНОГО НАПРАВЛЕНИЯ**

Э. А. Завадский, Ю. Д. Заворотнев

Рассмотрен двухподрешеточный антиферромагнетик типа «легкая плоскость» со спином $|s|=1$ в магнитном поле, направленном под малым углом к главной оси кристалла. Показано, что поведение подрешеток существенно отличается друг от друга. В частности, для одной подрешетки имеет место одно решение, а для другой в районе пересечения низших энергетических уровней — два решения. Рассмотрено поведение квадрупольного упорядочения для обеих подрешеток.

Как известно [1], в магнетиках с одноионной анизотропией (ОА) типа «легкая плоскость» в перпендикулярной главной оси кристалла плоскости возможно возникновение магнитного упорядочения. Появление последнего определяется соотношением между константами ОА и обменного взаимодействия (критерий Мория [1]). В последнее время этот вопрос активно обсуждался в литературе [2–4]. Однако в большинстве работ предполагалось, что магнитное поле направлено перпендикулярно «легкой плоскости». Результаты этих работ трудно сопоставлять с данными эксперимента, так как реально направить ось образца строго по полю крайне затруднительно. При постановке соответствующего эксперимента всегда будет незначительное отклонение. Поэтому представляет интерес рассмотрение задачи, в которой магнитное поле направлено под малым углом к оси кристалла. Необходимо отметить, что этот вопрос в случае кристалла типа «легкая ось» теоретически рассматривался в [5].

Рассмотрим двухподрешеточный антиферромагнетик с модельным гамильтонианом, отнесенным к одной подрешетке в приближении молекулярного поля

$$\mathcal{H} = Ds_z^2 + g\mu|\mathbf{H}|(s_z \cos \theta + s_x \sin \theta) - I s_x \langle s_x \rangle - I s_z \langle s_z \rangle, \quad (1)$$

где $D > 0$ — константа одноионной анизотропии, \mathbf{H} — напряженность внешнего магнитного поля, θ — угол между направлениями магнитного поля и главной осью кристалла, I — постоянная обменного взаимодействия, s_x , s_y , s_z — проекции спинового момента на оси ($|s|=1$). Волновые функции нулевого гамильтониана выбирались в виде $|0\rangle$, $|-1\rangle$, $|1\rangle$. Собственные значения E гамильтониана (1) определяются из кубического уравнения

$$\begin{vmatrix} -E & \alpha_1 & \alpha_1 \\ \alpha_1 & \alpha_2 - E & 0 \\ \alpha_1 & 0 & \alpha_3 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2)$$

где

$$\alpha_1 = 1/\sqrt{2}(g\mu|\mathbf{H}| \sin \theta - I \langle s_x \rangle), \quad \alpha_2 = D - g\mu|\mathbf{H}| \cos \theta + I \langle s_z \rangle,$$

$$\alpha_3 = D + g\mu|\mathbf{H}| \cos \theta - I \langle s_x \rangle.$$

Решения уравнения (2) имеют вид [6]

$$\begin{aligned} E_1 &= 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma}{3}\right) - \frac{\beta_1}{3}, \\ E_2 &= 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma}{3} + \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{\beta_1}{3}, \\ E_3 &= 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma}{3} + \frac{4\pi}{3}\right) - \frac{\beta_1}{3}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь

$$p = -\frac{\beta_1^2}{3} + \beta_2, \quad q = 2\left(\frac{\beta_1}{3}\right)^3 - \frac{\beta_1\beta_2}{3} + \beta_3,$$

$$\begin{aligned} \beta_1 &= -(\alpha_2 + \alpha_3), \quad \beta_2 = \alpha_2\alpha_3 - 2\alpha_1^2, \quad \beta_3 = \alpha_1^2(\alpha_2 + \alpha_3), \\ \cos \gamma &= -q/(2\sqrt{(-p/3)^3}). \end{aligned}$$

В (3) состояние E_2 в слабых полях является синглетным, а остальные — компоненты возбужденного дублета. Свободная энергия F определяется следующим образом

$$F = -kT \ln Z + 0.5I\langle s_z \rangle^2 - 0.5I\langle s_x \rangle^2, \quad (4)$$

где Z — статистическая сумма. Дифференцируя выражения (4) по $\langle s_z \rangle$ и $\langle s_x \rangle$, находим два нелинейных уравнения для нахождения этих величин

$$\begin{aligned} I\langle s_z \rangle - \sum_{i=1}^3 \exp(-E_i/(kT)) [1/\sqrt{-(p/3)} \partial p/\partial \langle s_z \rangle \cos(\gamma/3 + 2\pi(i-1)/3) + \\ + 2\sqrt{-(p/3)} \sin(\gamma/3 + 2\pi(i-1)/3) \partial \gamma/\partial \langle s_z \rangle + \partial \beta_1/\partial \langle s_z \rangle]/(3Z) = 0, \\ I\langle s_x \rangle + \sum_{i=1}^3 \exp(-E_i/(kT)) [1/\sqrt{-(p/3)} \partial p/\partial \langle s_x \rangle \cos(\gamma/3 + 2\pi(i-1)/3) + \\ + 2\sqrt{-(p/3)} \sin(\gamma/3 + 2\pi(i-1)/3) \partial \gamma/\partial \langle s_x \rangle]/(3Z) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

В (5) применены следующие обозначения

$$\begin{aligned} \partial p/\partial \langle s_z \rangle &= 2I(g\mu|\mathbf{H}| \cos \theta - I\langle s_z \rangle), \\ \partial p/\partial \langle s_x \rangle &= 2I(g\mu|\mathbf{H}| \sin \theta - I\langle s_x \rangle), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial \gamma/\partial \langle s_z \rangle &= I(I\langle s_z \rangle - g\mu|\mathbf{H}| \cos \theta)(\beta_1/3 + 3q/(2p)) (\sqrt{-(p/3)^3} \sqrt{1 - \cos^2 \gamma})^{-1}, \\ \partial \gamma/\partial \langle s_x \rangle &= I(I\langle s_x \rangle - g\mu|\mathbf{H}| \sin \theta)(D/3 + 3q/(2p)) \sqrt{-(p/3)^3} (\sqrt{1 - \cos^2 \gamma})^{-1}. \end{aligned}$$

При $\theta=0$, как следует из второго уравнения (5), всегда имеется решение $\langle s_x \rangle=0$. Для нахождения решения отличного от нуля при $\theta=0$ последнее уравнение необходимо разделить на $\langle s_x \rangle$. В результате в районе пересечения низших уровней (синглета и компоненты дублета с $s_z=-1$), в соответствии с [2-4], возникает магнитное упорядочение, график которого имеет колоколообразную форму. Необходимо отметить, что при $\theta=0$ уравнения инвариантны относительно замены $\langle s_x \rangle \rightarrow -\langle s_x \rangle$. Это означает идентичность поведения обеих подрешеток.

При $\theta \neq 0$ вышеуказанная инвариантность отсутствует. Следовательно, подрешетки будут вести себя по-разному. Расчет был выполнен при условии, что $D=2 \cdot 10^{-22}$ Дж, $I=-6 \cdot 10^{-23}$ Дж, $\theta=3^\circ$. Соответствующие графики представлены на рис. 1. Видно, что в слабых полях благодаря наличию θ имеет место магнитное упорядочение в базисной плоскости одинаковое для обеих подрешеток. В районе пересечения низших энергетических уровней появляется решение для отрицательной компоненты $\langle s_x \rangle$ (вторая подрешетка), причем этих решений два. По-видимому, моменты равновероятно располагаются по этим состояниям, но этот вопрос подробно не

рассматривался. Совершенно очевидно, что на графике суммарного магнитного момента обеих подрешеток в базисной плоскости в районе пересечения уровней имеет место провал, который может быть определен экспериментально.

С уменьшением θ крылья колокола положительных значений $\langle s_x \rangle$ опускаются, а щель между отрицательными решениями увеличивается. При $\theta=0$ имеем две симметричные относительно оси полей колоколообразные кривые, а третье решение вырождается в прямую линию $\langle s_x \rangle=0$.

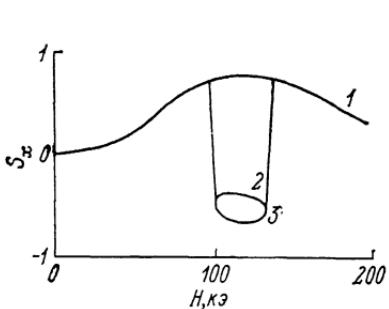


Рис. 1. Магнитное упорядочение первой (кривая 1) и второй (кривые 2, 3) подрешеток.

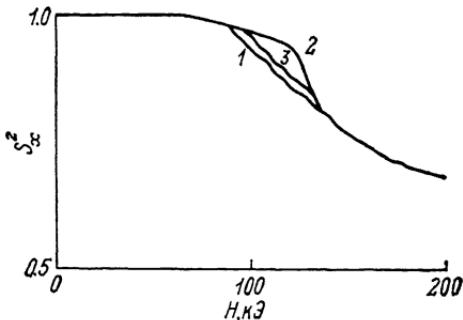


Рис. 2. Квадрупольное упорядочение первой (кривая 1) и второй (кривые 2, 3) подрешеток.

Поскольку в каждой из подрешеток магнитное упорядочение появляется уже в сколь угодно слабых полях, то введение соотношений типа $T-H$ диаграмм становится затруднительным. По-видимому, ее можно ввести как совокупность точек появления отрицательного решения.

Как показано в [6], в легкоплоскостных магнетиках возможно, наряду с магнитным порядком, существование тензорного порядка. Одним из них является квадрупольное упорядочение, характеризуемое величиной $\langle s_x^2 \rangle$. Для нахождения этой величины необходимо с помощью стандартной методики вычислить волновые функции ψ полного гамильтонiana (1). Полученные выражения подставлялись в формулу

$$\langle s_x^2 \rangle = \sum_{i=1}^3 \exp(-E_i/(kT)) \langle \psi_i | s_x^2 | \psi_i \rangle \left(\sum_{i=1}^3 \exp(-E_i/(kT)) \right).$$

Результаты вычислений для всех трех решений $\langle s_x \rangle$ представлены на рис. 2 в полях до 200 кЭ при $\theta=3^\circ$ и температуре $T=1$ К. Видно, что поведение этих кривых практически одинаковое. Только для дополнительного решения (см. кривую 2 на рис. 1) имеет место более резкая зависимость от поля.

Список литературы

- [1] Morija T. // Phys. Rev. 1960. V. 117. N 3. P. 635—647.
- [2] Tsuneto T., Murao T. // Physica. 1971. V. 51. P. 186—196.
- [3] Переверзев Ю. В., Борисенко В. Г. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 4. С. 1249—1252.
- [4] Борисенко В. Г., Переверзев Ю. В. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 7. С. 730—736.
- [5] Онуфриева Ф. П. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 9. С. 2664—2673.

Донецкий
физико-технический институт

Поступило в Редакцию
10 августа 1990 г.
В окончательной редакции
23 ноября 1990 г.