

УДК 537.638.214

© 1992

ОБРАЗОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО ПОРЯДКА В АНИЗОТРОПНОМ ФРУСТРИРОВАННОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ

С. С. Аплеснин

В двумерной модели Гейзенберга с анизотропным распределением антиферро- и ферро-магнитных связей на квадратной решетке и спином $S=1/2$ вычислена фазовая диаграмма антиферромагнетика, имеющего ферромагнитное упорядочение по поперечным компонентам спина в зависимости от анизотропии обмена и величины фрустрированной ферромагнитной связи.

1. В квадратной решетке конкуренция обменов возникает из-за несоответствия знаков обменных взаимодействий в первой I_1 и второй I_2 координационных сферах характеру спинового упорядочения. Это приводит при определенном соотношении обмена $\lambda = I_2/I_1$ к исчезновению дальнего порядка в изотропном антиферромагнетике (АФМ) и образованию парафазы в классической модели Гейзенберга при $\lambda = 1/2$ [1] или спиновой жидкости в квантовой модели со спином $S=1/2$ при $\lambda \approx 0.6$ [2].

В случае анизотропного распределения антиферро- и ферромагнитных связей на квадратной решетке и разных параметров обмена между продольными и поперечными компонентами спинов для классического спина в конечной области температур и обменов обнаружена методом численного моделирования слабо скошенная структура с малым магнитным моментом [3]. Аналогичные структуры обнаружены экспериментально в нейтронографических измерениях на $MgCu_2O_3$ [4] и из измерений восприимчивости и намагниченности от поля в $SuGeO_3$ [5]. Вычисленные в классической ($S \rightarrow \infty$) и квантовой ($S=1/2$) моделях Гейзенберга типы магнитных состояний в антиферромагнетике приведены в таблице.

Цель данной работы заключается в определении магнитной структуры в квантовой модели Гейзенберга со спином $S=1/2$, включая температуру $T=0$, в зависимости от трех факторов: 1) анизотропного распределения обменных

Типы магнитных структур анизотропного АФМ с обменным взаимодействием в первой (K, I_1) и второй координационных сферах (I_2)

S	$K^{\alpha\alpha} < 0$	$I_1^{\alpha\alpha}$	$I_2^{\alpha\alpha}$	Тип структуры
$\rightarrow \infty$	$K^{xx} = K^{yy} = K^{zz}$	$I_1^{\alpha\alpha} = K^{\alpha\alpha}$	$2I_2 = I_1 < 0$	Парамагнетик [1]
1/2	$K^{xx} = K^{yy} = K^{zz}$	$I_1^{\alpha\alpha} = K^{\alpha\alpha}$	$I_2/I_1 = 0.6$	Спиновая жидкость [2]
1/2	$K^{xx} \neq K^{yy} \neq K^{zz}$	$I_1^{\alpha\alpha} \leq K^{\alpha\alpha} < 0$	$I_2 = 0$	Антиферромагнетик
1/2	$K^{xx} \neq K^{yy} \neq K^{zz}$	$0 < I_1^{zz} < K^{zz} $	$I_2/I_1 < 1/2$	Смешанное упорядочение: ФМ и АФМ соответственно по поперечным и продольным компонентам спина

взаимодействий разного знака в квадратной решетке; 2) разных параметров обменов между продольными и поперечными компонентами спинов; 3) величины фрустрированной связи во второй координационной сфере.

Данная задача решается методом гриновских функций в первом порядке теории возмущения.

2. Рассмотрим двумерный магнетик в квантовой модели Гейзенберга со спином $S=1/2$. Гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \sum_{i=1}^N K_{i, i+1}^{\alpha\alpha} S_i^{\alpha} S_{i+1}^{\alpha} + \sum_{j=1}^N (I_1^{\alpha\alpha})_{j, j+1} S_j^{\alpha} S_{j+1}^{\alpha} + \sum_{ij} (I_2^{\alpha\alpha})_{ij} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \right\}, \quad (1)$$

где $K^{\alpha\alpha} < 0$ — антиферромагнитное обменное взаимодействие между компонентами спинов $\alpha=x, y, z$, расположенных вдоль оси y (суммирование ведется по индексу i); $I_1^{\alpha\alpha} > 0$ — ферромагнитный (ФМ) обмен по оси x (суммирование по индексу j); $I_2^{\alpha\alpha} > 0$ — ферромагнитный обмен во второй координационной сфере. Ограничимся рассмотрением анизотропных ферромагнитных обменных взаимодействий типа «легкая ось» $J_1^{xx} = J_1^{yy} \neq J_1^{zz}$, $J_2^{xx} = J_2^{yy} \neq J_2^{zz}$ в нулевом внешнем магнитном поле.

Представляя спиновые операторы через операторы Паули и переходя в импульсное представление, запишем гамильтониан антиферромагнитной фазы

$$H = E_0 + H_1 + H_2^a + H_2^b,$$

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} K(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \tau_{-\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) (a_{-\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+ + b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} D(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ + b_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+) -$$

$$- \sum_{\mathbf{k}} I_2(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \tau_{-\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} I_2(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+ + b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}) \xi_2 / 2,$$

$$\xi_2 = I_2^x, y / I_2^z,$$

$$H_2^a = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} I_1(\mathbf{k}) \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}},$$

$$H_2^b = H_2^a,$$

$$K(\mathbf{k}) = - \sum_{ij} K_{ij}^{zz} e^{-i\mathbf{k}(i-j)},$$

$$E_0 = - \frac{N}{8} [K^{zz}(0) + I_1^{zz}(0) - 2I_2^{zz}(0)],$$

$$A(\mathbf{k}) = I_1(0) (1 + \xi_1 j_{\mathbf{k}}) / 2,$$

$$\eta = K^y / K^z,$$

$$C(\mathbf{k}) = |K(\mathbf{k})| (\xi + \eta) / 4,$$

$$D(\mathbf{k}) = |K(\mathbf{k})| (\xi - \eta) / 4,$$

$$\xi = K^x / K^z, \quad \xi_1 = I_1^x, y / I_1^z. \quad (2)$$

Здесь H_2^a , описывающий взаимодействие спинов на подрешетке A , имеет вид, аналогичный H_2^b , так как внешнее магнитное поле отсутствует. Введем одночастичные корреляционные функции нормального и аномального типов для операторов из одной или различных подрешеток

$$\bar{n}_{\mathbf{k}}^a = \bar{n}_{\mathbf{k}}^b = \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle,$$

$$\bar{m}_{\mathbf{k}} = \bar{m}_{-\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+ \rangle,$$

$$\bar{q}_{\mathbf{k}} = \bar{q}_{-\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \rangle,$$

$$\begin{aligned}\sigma^{a, b} &= \pm 1/2 \mp \bar{n}^{a, b}, \\ \bar{n}^{a, b} &= 2/N \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}}^{a, b}.\end{aligned}\quad (3)$$

Соответственно корреляционные функции поперечных компонент спинов в узлах ближайших соседей имеют вид

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \bar{m}_{\mathbf{k}}, \\ \kappa &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \bar{q}_{\mathbf{k}}, \\ \nu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \bar{l}_{\mathbf{k}}, \\ \sigma &= \sigma^a = \sigma^b.\end{aligned}\quad (4)$$

После линеаризации операторов нелинейного взаимодействия и выделения средних в обобщенном приближении Хартри—Фока (ОПХФ) пишем уравнения для функций Грина. Решая систему четырех линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, получаем решение для $\hat{G}_{\mathbf{k}}(t)$ в виде

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}(t) = -i\theta(t) \hat{U}_{\mathbf{k}} \exp(-i\hat{E}_{\mathbf{k}}t) \hat{U}_{\mathbf{k}}^{-1} \langle [B_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}}^{\dagger}] \rangle, \quad (5)$$

где $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ — матрица, составленная из столбцов собственных векторов $\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger})$,

$$\begin{aligned}\Omega_{\mathbf{k}}^{11} &= -\Omega_{\mathbf{k}}^{22} = -\Omega_{\mathbf{k}}^{33} = \Omega_{\mathbf{k}}^{44} = B_{1\mathbf{k}} = \sigma \bar{I} - \mu [(\xi + \eta)/2 - 2\lambda_2 \xi_2] - \\ &\quad - \kappa (\xi - \eta)/2 + \lambda_1 \xi_1 \nu - \lambda_1 (\xi_1 \sigma + \nu) \cos k_x a, \\ \bar{I} &= 1 + \lambda_1 - 2\lambda_2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Omega_{\mathbf{k}}^{12} &= -\Omega_{\mathbf{k}}^{21} = -\Omega_{\mathbf{k}}^{34} = \Omega_{\mathbf{k}}^{43} = B_{2\mathbf{k}} = \kappa [2\lambda_2 \xi_2 - (\xi + \eta)/2] + \mu (\eta - \xi)/2, \\ \Omega_{\mathbf{k}}^{13} &= -\Omega_{\mathbf{k}}^{31} = -\Omega_{\mathbf{k}}^{24} = \Omega_{\mathbf{k}}^{42} = B_{3\mathbf{k}} = [\sigma (\xi + \eta)/2 - \mu + 2\lambda_2 (\mu - \sigma \xi_2) \cos k_x a] \cos k_y a, \\ \Omega_{\mathbf{k}}^{14} &= -\Omega_{\mathbf{k}}^{41} = -\Omega_{\mathbf{k}}^{23} = \Omega_{\mathbf{k}}^{32} = B_{4\mathbf{k}} = [\sigma (\xi - \eta)/2 - \kappa] \cos k_y a + 2\lambda_2 \kappa \cos k_y a \cos k_x a, \\ \lambda_1 &= I_1^{z*} / |K^{zz}|, \quad \lambda_2 = I_2^{z*} / |K^{zz}|,\end{aligned}\quad (6)$$

$\hat{E}_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^{-1} \hat{\Omega}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}}$ — диагональная матрица, четыре компоненты которой $\pm E_{\mathbf{k}}^{\pm}$ являются вещественными корнями биквадратного секулярного уравнения

$$(E_{\mathbf{k}}^{\pm})^2 = [B_{1\mathbf{k}} - B_{2\mathbf{k}} \pm (B_{4\mathbf{k}} - B_{3\mathbf{k}})] [B_{1\mathbf{k}} + B_{2\mathbf{k}} \pm (B_{3\mathbf{k}} + B_{4\mathbf{k}})]. \quad (7)$$

Далее находим компоненты матрицы спектральной плотности и с помощью спектральной теоремы получаем систему четырех уравнений для корреляционных функций

$$\begin{aligned}\bar{n}_{\mathbf{k}} &= D(\mathbf{k}) \left\{ \frac{B_{2\mathbf{k}} + B_{3\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^+ + B_{1\mathbf{k}} + B_{4\mathbf{k}}} - \frac{B_{2\mathbf{k}} - B_{3\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}} - B_{4\mathbf{k}} + B_{1\mathbf{k}}} + \frac{2(B_{1\mathbf{k}} - B_{4\mathbf{k}})}{B_{3\mathbf{k}} - B_{2\mathbf{k}}} n(E_{\mathbf{k}}^-) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(B_{1\mathbf{k}} + B_{4\mathbf{k}})}{B_{2\mathbf{k}} + B_{3\mathbf{k}}} n(E_{\mathbf{k}}^+) \right\},\end{aligned}$$

$$D(\mathbf{k}) = \frac{\sigma}{2} \sqrt{\frac{B_{2\mathbf{k}}^2 + B_{3\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}^+ E_{\mathbf{k}}^-}},$$

$$\bar{q}_k = D(k) \left\{ \frac{B_{2k} + B_{3k}}{E_k^+ + B_{1k} + B_{4k}} + \frac{B_{2k} - B_{3k}}{E_k^- - B_{1k} + B_{4k}} \frac{2(B_{1k} - B_{4k})}{B_{3k} - B_{2k}} n(E_k^-) + \frac{2(B_{1k} + B_{4k})}{B_{2k} + B_{3k}} n(E_k^+) \right\},$$

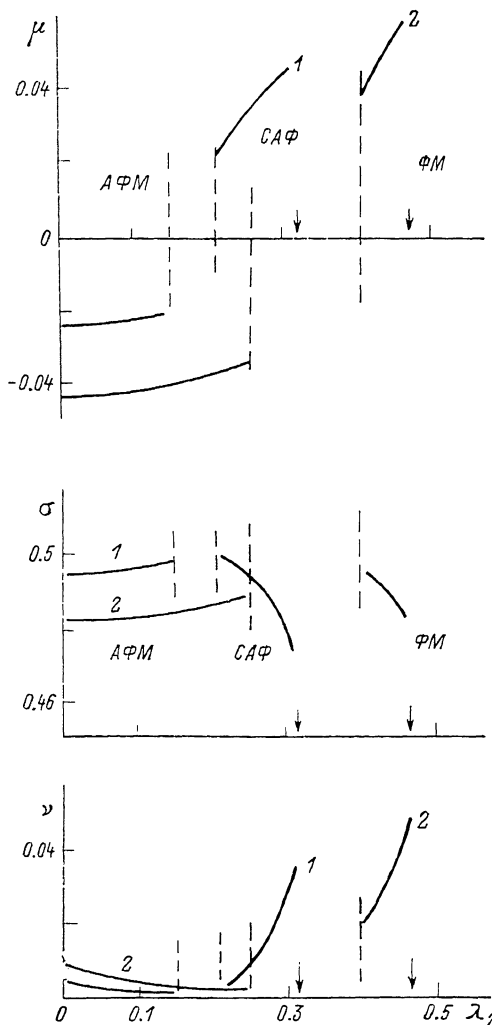


Рис. 1. Меж- и внутриподрешеточные корреляционные функции μ и ν , подрешеточная намагниченность z от величины нормированной фрустрированной связи λ_2 при $\xi=0.25(I)$, 0.5 (2) и $(1 - \eta/\xi)=0.01$.

Штриховыми линиями выделены области с отсутствующими решениями для неслеевского (АФМ) и смешанного (САФ) антиферромагнетика, имеющего по поперечным компонентам ферромагнитный порядок.

$$\bar{m}_k = D(k) [1 + n(E_k^+) + n(E_k^-)],$$

$$n(E_k^\pm) = \frac{1}{\exp[E_k^\pm/k_B T] - 1},$$

$$T = \hat{T} / |K^{zz}(0)|. \quad (8)$$

Здесь \sum_k означает суммирование по магнитной зоне Бриллюэна. Выражение для энергии в ОПХВ можно записать

$$\langle H \rangle = E_0 + \frac{4}{N} \sum_{\mathbf{k}} D(\mathbf{k}) \left\{ \frac{E_{\mathbf{k}} (B_{2\mathbf{k}} - B_{3\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}} + B_{1\mathbf{k}} - B_{4\mathbf{k}}} - \frac{E_{\mathbf{k}}^+ (B_{2\mathbf{k}} + B_{3\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}} + B_{1\mathbf{k}} + B_{4\mathbf{k}}} - \frac{2(E_{\mathbf{k}})^2}{B_{2\mathbf{k}} - B_{3\mathbf{k}}} n(E_{\mathbf{k}}) + \right. \\ \left. + \frac{2(E_{\mathbf{k}}^+)^2}{B_{2\mathbf{k}} + B_{3\mathbf{k}}} n(E_{\mathbf{k}}^+) \right\} + \frac{1}{2} \tilde{I} \bar{n}^2 - \bar{n} \mu, \\ [(\xi + \eta)/4 - \lambda_2 \xi_2] - \bar{n} x (\xi - \eta)/4 - \lambda_1 \bar{n} \nu \xi_1/4 + (\mu^2 + x^2)(1 - 2\lambda_2)/2. \quad (9)$$

3. Для изотропного ферромагнитного обмена $\xi_1 = \xi_2 = 1$, но с $k^x \neq k^y \neq k^z$ щель в спектре спиновых волн имеет вид

$$E_{k=0}^+ = \sqrt{(1 - \eta)(1 + \xi - 4\lambda_2)[(\sigma + x)^2 - \mu^2]}, \\ E_{k=0}^- = \sqrt{(1 - \xi)(1 + \eta - 4\lambda_2)[(\sigma - x)^2 - \mu^2]}. \quad (10)$$

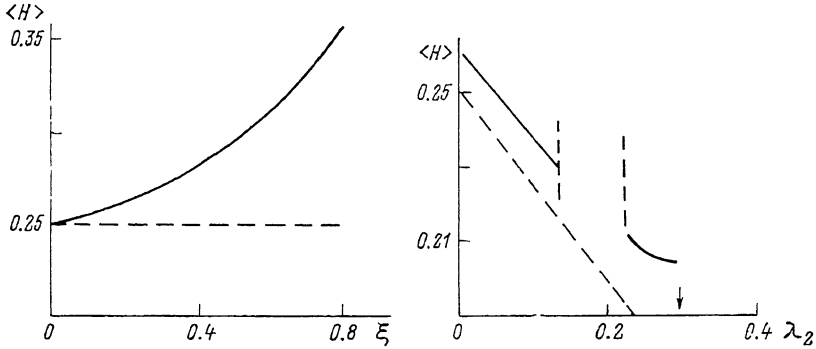


Рис. 2. Средняя энергия в зависимости от анизотропии обмена (а) и величины ФМ связи $\lambda_2 = I_2/|K^{zz}|$ (б) при $\xi = 0.25$, $1 - \eta/\xi = 0.01$.

Отсюда видно, что АФМ типа «легкая ось» неустойчив относительно ориентационного фазового перехода в фазу «легкая плоскость» при $\lambda_{2k_2} = (1 + \eta)/4$ или при $\lambda_{2k_2} = (1 + \xi)/4$.

Если $\xi = \eta$, то $x = 0$, $E^+ = E^-$ и выражение для корреляционных функций сильно упрощается

$$\mu = -\frac{2\sigma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sigma(\xi - 2\lambda_2 \cos k_x a) - \mu(1 - 2\lambda_2 \cos k_x a)}{E_{\mathbf{k}}} \cos^2 k_y a \operatorname{cth} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}, \\ n_{\mathbf{k}} = \sigma \left[\frac{\sigma(1 - 2\lambda_2) - \mu(\xi - 2\lambda_2) + \lambda_1 \nu - \lambda_1(\sigma + \nu) \cos k_x a}{E_{\mathbf{k}}} \operatorname{cth} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} - 1 \right]. \quad (11)$$

Для $\lambda_2 = 0$ подрешеточная намагниченность уменьшается, а внутри- и межподрешеточные корреляционные функции увеличиваются с уменьшением анизотропии обмена. Появление и увеличение константы ФМ обмена во второй сфере приводят к уменьшению квантовых флуктуаций. В результате подрешеточная намагниченность увеличивается, а ν и μ уменьшаются с ростом λ_2 (рис. 1). Достигнув критической величины $\lambda_2 = \lambda_{2\lambda 1}$, двухподрешеточное коллинеарное состояние становится неустойчивым и соответствующие решения системы отсутствуют. Возможно, что магнетик при $\lambda_2 > \lambda_{2\lambda 1}$ состоит из четырех подрешеток или образуется геликоид. Поэтому здесь необходимо оперировать с новой структурой вакуумных состояний. Для этого проведем унитарное преобразование в одной из подрешеток, повернув ось координат вокруг оси Oz на 180° , т. е. $\tilde{S}_B^x = -S_B^x$, $\tilde{S}_B^y = -S_B^y$, $\tilde{S}_B^z = S_B^z$. В этой системе при $\lambda_2 \geq \lambda_{2k_2}$ существует решение, причем межподрешеточная корреляционная функция становится

положительной ($\mu > 0$) и возрастает так же, как внутримоделеточный коррелятор ν , а подрешеточная намагниченность резко уменьшается (рис. 1). Энергия нулевых колебаний увеличивается по сравнению с классическим выражением (рис. 2).

Сделаем еще одно преобразование в каждой подрешетке $\hat{U}_y(\alpha)$, повернув систему координат вокруг оси Oy на угол α . Преобразованный гамильтониан имеет нормированные параметры обмена $\tilde{K}^{\alpha\alpha}$, изотропный ферромагнитный обмен не меняется. При повороте на угол $\alpha \approx 0.042 \div 0.06$ средняя энергия (9) увеличивается на $\Delta E \sim 10^{-6}$. Корреляционные функции также уве-

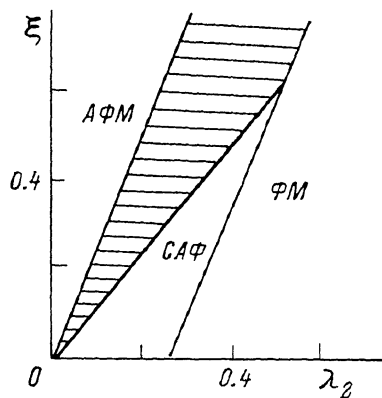


Рис. 3. Фазовая диаграмма неелевского (АФМ) магнетика со смешанным типом упорядочения: по продольным компонентам спина — антиферромагнитное, а по поперечным — ферромагнитное (САФ), легкоплоскостного ферромагнетика (ФМ) и с неизвестной структурой (заштриховано) на плоскости анизотропия обмена ξ — величина фрустрированной ФМ связи $\lambda_2 = I_2 / |K^{zz}|$ при $1 - \eta/\xi = 0.01$.

личиваются $\Delta\mu \sim 2\%$, $\Delta\nu \sim 6\%$, $\Delta\chi$ в 5–7 раз возрастает. Подрешеточный параметр порядка уменьшается незначительно $\Delta\sigma \sim 0.3\%$, т. е. в рамках данного метода в области $\lambda_{2k2} \leq \lambda_2 \leq (1 + \xi)/4$ отсутствует спонтанный ферромагнитный момент при $T=0$.

При $\xi > 0.6$ данная структура не реализуется, так как нулевые колебания, связанные с АФМ порядком, сильно возрастают и их энергия превышает энергию ФМ упорядочения по поперечным компонентам спина. Вычисленная фазовая диаграмма изображена на рис. 3. Между критическими значениями λ_{2k1}

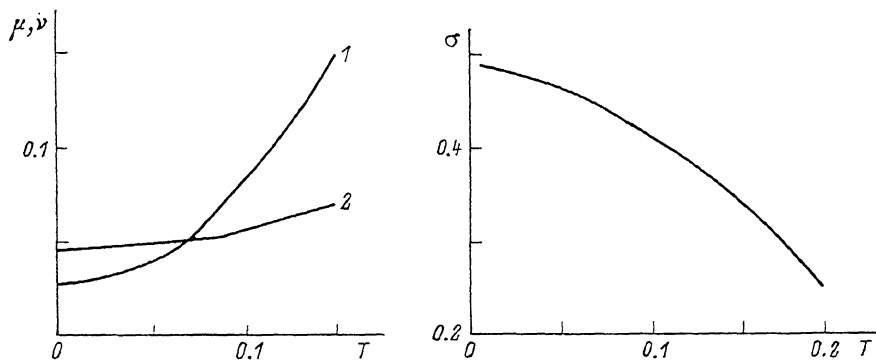


Рис. 4. Корреляционные функции ближайших соседей ν (1), μ (2) и подрешеточная намагниченность σ смешанного АФМ с $\xi=0.25$, $\eta=0.248$, $\lambda_2=0.3$ от нормированной температуры $T=T/2 K^{zz}$.

и λ_{2k2} существует область с неизвестной структурой вакуумных состояний (заштрихованная область на рис. 3). Парафаза является метастабильным состоянием, и ее энергия на границе много больше энергии АФМ.

При увеличении температуры анизотропия спиновых корреляционных функций μ и ν уменьшается и при некоторой температуре их величины сравниваются между собой, затем $\nu > \mu$. Характерной особенностью анизотропного

фрустрированного АФМ является слабая зависимость межподрешеточной корреляционной функции от температуры (рис. 4). В области высоких температур, где $\sigma \sim \mu$, первый порядок теории возмущений в ОПХФ не работает, так как щель в спектре стремится к нулю.

Итак, в анизотропном фрустрированном магнетике с анизотропным распределением анти- и ферромагнитных связей на квадратной решетке, кроме неелевского АФМ и ФМ типа «легкая плоскость», существует переходная область: магнетик с антиферромагнитным упорядочением по продольным компонентам и с ферромагнитным упорядочением по поперечным компонентам спина, не имеющим по ним дальнего порядка.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Binder K., Kinzel W., Stauffer D. // Z. Phys. B. 1979. V. 36. N 1. P. 161—174.
- [2] Барабанов А. Ф., Старых О. А. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. № 5. С. 271—274.
- [3] Аплеснин С. С. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 1. С. 189—193.
- [4] Zeiske Th., Graf H. A., Dachs H., Clausen K. N. // Sol. St. Comm. 1989. V. 71. N 6. P. 501—504.
- [5] Петраковский Г. А., Саблина Н. А., Воротынов А. М., Круглик А. И., Клименко А. Г., Балаев А. Д., Аплеснин С. С. // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. № 4. С. 1382—1389.

Институт физики им. Л. В. Киренского
СО РАН
Красноярск

Поступило в Редакцию
22 мая 1991 г.
В окончательной редакции
16 сентября 1991 г.